

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



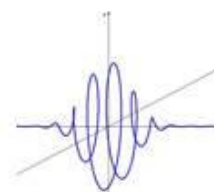
Тверской
государственный
университет



Физика, химия и новые технологии

Сборник материалов

ТВЕРЬ 2020



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

Физика, химия и новые технологии

*Сборник материалов
всероссийской научно-технической конференции
молодых учёных
в рамках Каргинских чтений*

Тверь 2020

УДК 54(082)

ББК Г.я431

Ф48

Ответственные за выпуск:

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

Ф48 Физика, химия и новые технологии: Сборник материалов всероссийской научно-технической конференции молодых учёных в рамках Каргинских чтений. – Тверь: Тверской государственный университет, 2020. – 141 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.

ISBN 978-5-7609-1522-1

© Тверской государственный
университет, 2020

© Авторы статей, 2020

Оглавление

<u>Д.А. Абсук</u>, <u>Л.Ж. Никошвили</u> Гидрирование леулиновой кислоты до гамма-валеролактона с применением цеолитного катализатора Ru/HZSM-5	11
<u>А.Н. Адамян</u>, <u>С.Д. Хижняк</u>, <u>П.М. Пахомов</u> Гелеобразование в растворе на основе L-цистеина и ацетата серебра в среде D ₂ O	12
<u>А.Д. Алексеев</u>, <u>А.А. Репин</u> Нейронная сеть для поиска дефектов в оптических волоконных системах связи	13
<u>Я.В. Андрианова</u>, <u>С.Д. Хижняк</u>, <u>П.М. Пахомов</u> Супрамолекулярные гидрогели на основе цистеин-серебряного раствора и солей одно-, двух- и трехзарядных металлов	14
<u>В.С. Антонова</u>, <u>И.И. Осовская</u> Измерение удельной поверхности при низкотемпературной обработке целлюлозы	15
<u>А.С. Базутин</u>, <u>И.Ю. Егорова</u> Получение комплекса меди (II) на основе 2,4-динитрофенилгидразона 4-гидрокси-3-метоксибензальдегида	15
<u>Е.С. Бахвалова</u>, <u>Э.М. Сульман</u>, <u>Л.Ж. Никошвили</u> Применение конкурирующих субстратов для повышения скорости синтеза целевого продукта реакции кросс-сочетания Сузуки	17
<u>Е.В. Безлепкина</u>, <u>Н.П. Русакова</u>, <u>Ю.Д. Орлов</u> Квантовохимическое сравнение бензолзамещенных	18
<u>А.В. Бертова</u>, <u>Л.Ж. Никошвили</u> Влияние обработки палладиевого катализатора карбонатом натрия на процесс селективного гидрирования алкинолов	19
<u>В.О. Богдалов</u>, <u>О.В. Калугин</u> Использование контроллеров типа AVR на базе микроконтроллера ATMEGA 168-15AD	20
<u>А.С. Бомбин</u>, <u>И.Л. Кислова</u> Процессы переключения в кристаллах ТГС и ДТГС	21
<u>А.М. Бородина</u>, <u>И.И. Осовская</u> Модификация ксантановой камеди	22
<u>Р.В. Бровко</u>, <u>М.Е. Григорьев</u> Изучение механизма каталитического гидрирования моно- и дисахаридов на Ru/СПС MN 100	23
<u>Р.В. Бровко</u>, <u>В.Ю. Долуда</u> Кинетические особенности гидрирования D-глюкозы на никельсодержащем сверхсшитом полистироле	24
<u>Д.В. Брянецев</u>, <u>М.Г. Виноградова</u> Энтропия алифатических альдегидов. Топологический подход	25
<u>А.А. Варламова</u>, <u>В.М. Никольский</u> Замена не разлагаемого и накапливающегося в океане комплексона этилендиаминтетрауксусной кислоты на экологически безопасные комплексы	27

А.Д. Васильев, А.И. Иванова Особенности микроструктуры сплавов Гейслера	27
А.П. Васильева, И.И. Осовская Пленкообразующая способность гуаровой камеди	28
К.И. Васильева, И.Л. Кислова Влияние внешних воздействий на диэлектрический отклик монокристаллов семейства ТГС	29
М.В. Вахрушкина, В.М. Никольский Создание ионоселективного электрода для анализа лекарственных средств группы ремантадина	30
В.В. Веролайн, С.А. Темникова Смеси поверхностно-активных веществ как стабилизаторы эмульсий	31
О.Ю. Взорова, Н.В. Веролайн Высокодисперсные системы, как методы очистки воды	32
И.С. Викторов, М.А. Феофанова Анализ содержания редуцирующих сахаров в суфлейной и ирисной массах	33
Н.В. Востров, Д.В. Вишневецкий, Д.В. Аверкин Разработка систем холодной экструзии различных жидких сред в аддитивном производстве	34
А.А. Ганичева, А.С. Павлов Оптимизация геометрии и расчет энергии транс- и цис- изомеров производных азобензола	35
Т.Е. Горкина, Т.А. Суставова, В.А. Липин Полиамфолит на основе полиакриловой кислоты	36
Е.М. Грачев, Г.И. Мантров Определение потенциометрических характеристик ионселективного электрода с откликом на N,N-диметилимиддикарбоимиддиамид	37
П.А. Гусева, А.А. Степачева Катализаторы деоксигенирования соединений био-нефти в комплексном сверхкритическом растворителе	38
А.Б. Данилова, А.С. Павлов Компьютерное моделирование триблок-сополимеров	39
А.В. Деканова, Е.В. Барабанова Диэлектрические свойства легированной керамики ниобата лития	40
Е.В. Деревцова, А.И. Иванова Доменная структура сплавов гейслера	41
М.А. Дзюба, Н.В. Лакина Исследование цеолитных катализаторов в реакции каталитической трансформации метанола в углеводороды	42
И.Д. Дорошенко, С.Д. Хижняк Изучение химического состава образцов мать-и-мачехи спектральными методами	43
М.О. Дубов, Н.В. Веролайн Получение и свойства цвиттер-ионных поверхностно-активных веществ на основе N,N-диэтилэтаноламина	44

Г.Г. Дунаева, А.Ю. Карпенков Температурные исследования трансформации доменной структуры соединения MN5GE3	45
Н.Э. Еремченкова, Л.Ж. Никошвили, А.В. Быков Исследование стабильности каталитической системы 3%-Pt/MN270 в жидкофазных процессах гидрирования ароматических субстратов.....	46
Д.В. Жигунов, А.А. Репин Реализация модуля БПФ на VHDL. Часть 2.....	47
И.С. Жохов, Е.И. Лагусева Синтез сополиамидных фибридов-бПТ методом газожидкостной поликонденсации.....	48
С.В. Забенкова, А.Ф. Мейсурова Оценка влияния некоторых солей металлов на борцевик сосновского	49
В.А. Завилейская, Д.В. Аверкин, Д.В. Вишневецкий Структурообразование в низкоконцентрированных водных системах на основе аминокислоты N-ацетил-L-цистеина и ацетата серебра	50
А.И. Завьялов, И.Л. Кислова Диэлектрический отклик сенсорных пьезоэлектрических пленочных структур на основе сополимера винилиденфторида с трифторэтиленом и углеродных нанотрубок	51
С.Д. Завьялова, Н.Н. Большакова Диэлектрический гистерезис в ниобийсодержащих кристаллах титаната бария	52
А.Г. Зайкова, В.Г. Бондалетов, А.А. Мананкова Получение диперфторгептилового эфира эндиковой кислоты для метатезисной полимеризации с раскрытием цикла.....	53
А.В. Зиганин, Н.П. Русакова, В.В. Туровцев Особенности распределения электронной плотности в краун-эфирах и их тиоаналогах	54
И.А. Зуев, Е.И. Лагусева Морфология жирноароматических полимеров, синтезированных реакционным формованием	55
А.С. Зуева, Н.В. Баранова Физико-химический анализ анальгина разных производителей	56
И.Д. Исаев, Д.С. Исаев Утилизация и переработка пенополистирола в школьных лабораторных условиях	57
Д.А. Исаева, А.С. Павлов Изучение свойств водных растворов 2,2,2,-трифторэтанола и этанола методами компьютерного моделирования.....	58
Л.А. Калюжная, М.Г. Виноградова Теория графов в исследовании корреляций «структура – энтальпия образования» тиоспиртов.....	59
К.А. Камышева, Р.Ф. Шеханов, С.Н. Гридчин Оксалатно-сульфатные и фторид-хлоридные электролиты для электроосаждения сплавов олово-кобальт	60
С.С. Капустина, Н.В. Веролайн Экологически-безопасные незамерзающие стеклоомывающие жидкости	61

А.В. Карчевский, Н.В. Баранова Количественное определение индометацина в лекарственных средствах	62
К.М. Ковальчук, Н.В. Веролайн Исследование влияния различных факторов на стабильность суспензии ментолаб3	
Н.А. Косолапов, О.Б. Дегтева Анализ микроструктуры спеченных композиций на основе порошков сплавов, содержащих редкоземельные и 3-d переходные металлы	64
А.В. Котомкин, Ю.Д. Орлов, В.В. Туровцев Исследование электронного строения фтораллильных радикалов	65
А.А. Крылов, В.Г. Алексеев Изучение влияния рН среды на геометрию пленки поли- α -нафтиламина.....	66
М.Е. Крылова, Н.П. Русакова Электроотрицательность групп и индуктивный эффект в метилоктилкетоне и его серосодержащих аналогах.....	67
Т.В. Крюков, М.А. Феофанова Исследование твердых комплексов церия и празеодима с цефазолином методом ИК-спектроскопии	68
А.А. Кузнецова, В.Г. Алексеев Квантовохимический расчет ИК спектра цефуроксима	69
Л.С. Кузнецова, Н.В. Лакина Изучение эффективности применения биэнзимных катализаторов на основе глюкооксидазы и пероксидазы.....	70
В.А. Кузьмина, О.Е. Журавлев Синтез и свойства ионных жидкостей на основе бис-четвертичных солей пиридиния	71
А.М. Кулагин, Ю.А. Малышкин Регистрация пролёта рукокрылых с помощью лазерных сетей.....	72
Г.Ф. Куракин, Н.П. Лопина, Г.Е. Бордина Компьютерное моделирование связывания флавоноидов и изовальтерата с аденозиновыми рецепторами	73
Г.А. Курочкин, Н. П. Русакова, Ю.Д. Орлов Сравнение групповых зарядов бензола и его серосодержащих аналогов.....	74
А.К. Кучурова, А.Н. Адамян, П.М. Пахомов Образование гидрогелей в водном растворе ПМГ-ГХ, L-цистеина и ацетата серебра	75
И.Е. Лебедева, Е.В. Ожмикова Биоконверсия лигноцеллюлозного сырья.....	76
Ю.В. Левицкая, С.А. Темникова Синтез алкилсульфосукцинатов на основе малеинового ангидрида	77
В.А. Левчукова, Д.В. Вишневецкий Усиление механических свойств L-цистеин/AgNO ₃ /ПВС супрамолекулярной системы.....	78
Н.Н. Лимонова, К.А. Шухина, С.Д. Хижняк Формирование наноагрегатов в водных растворах глицина, нитрата серебра и поливинилового спирта.....	79

М.Ю. Литвинов, И.И. Осовская Исследование структуры полифенилсилсесквиоксан- полидиорганосилоксановых блок-сополимеров	80
В.А. Лобзова, Н.В. Баранова Кислотное титрование, как метод определения казеина в молоке	81
А.В. Луцай, А.А. Репин Повышение точности механических перемещений на станках с числовым программным управлением при помощи обратной связи с высокоскоростной камерой-микроскопом и использованием алгоритмов компьютерного зрения и математических моделей	82
Н.А. Макарова, О.В. Гребенникова, А.М. Сульман Магнитные наночастицы, как эффективный носитель для иммобилизации ферментов	83
М.Д. Малышев, П.В. Комаров Многомасштабное моделирование цистеин-серебряного раствора	84
А.А. Малякова, О.Е. Журавлев Синтез и свойства ионных жидкостей на основе четвертичных солей N-алкилпиридиния	85
А.И. Маркова, П.М. Пахомов Оценка морфологии грубодисперсных систем спектроскопическим методом	85
М.Е. Маркова, Э.М. Сульман Допированные катализаторы синтеза Фишера-Тропша	87
Я.А. Матус, Н.П. Русакова, В.В. Туровцев Связевые характеристики электронной плотности замещенных бензола	88
П.Д. Михайлова, Е.В. Ожимкова Перспективы получения антиоксидантов из отходов заготовки бобовых культур	89
С.П. Михайлов, Э.М. Сульман, А.М. Сульман Восстановительное аминирование для получения биологически активных веществ	90
С.П. Михайлов, А.М. Сульман, О.В. Гребенникова Иммобилизация ферментов для синтеза биологически активных соединений	90
М.А. Монжаренко, А.А. Степачева Исследование кинетики гидрирования жирных кислот	92
Л.С. Мушинский, В.Ю. Долуда Изучение кинетических особенностей синтеза анилина на Ni-содержащем сверхсшитом полистироле	93
М.С. Никитин, О.В. Жданова Магнитная доменная структура орторомбических ферромагнетиков на основе Со	94
Н.М. Оспельников, Е.В. Барабанова Влияние ионов железа на проводимость твердых растворов ниобата натрия	95
Е.Н. Петрова, С.А. Темникова Конденсация ароматических альдегидов с гидразином	96
Е.Е. Пономарчук, Л.Ж. Никошвили Возможность применения биметаллических к атализаторов в реакции Сузуки	97

А.С. Попов, А.А. Алексеев, К.Н. Бойцова Исследование эффективной массы носителя заряда германия n-типа	98
А.В. Прокопович, Е.А. Панкратов Вредные промышленные выбросы в производстве полиэтиленовой пленки методом раздува	99
Ю.А. Просяник, Н.В. Веролайн Исследование пенообразующих свойств смесей сульфанола и полиэтиленголя	100
А.С. Радин, М.А. Феофанова Разработка газового сенсора для определения волопола на основе полипиррола, модифицированного гетерополианионом типа доусона	101
П.А. Ракунов, А.Ю. Карпенков Влияние условий намагничивания на магнитострикцию соединения $DyCO_2$	102
Н.Ю. Рассказова, О.Е. Журавлев Синтез и термическая стабильность тетрафторборатов N-алкилпиридиния	103
П.М. Рассказова, Л.Ж. Никошвили Чайный гриб как продуцент бактериальной целлюлозы	104
А.М. Рихмайер, А.Н. Белов Программный модуль визуализации итерационной последовательности	105
Т.В. Ростова, А.И. Иванова Влияние дефектов на магнитные свойства эпитаксиальных висмутсодержащих магнитных пленок феррит-граната	106
Д.В. Рудь, А.А. Степачева Получение углеводов жирного ряда реакцией деоксигенирования	107
М.В. Русаков, С.Д. Хижняк Изучение влияния антропогенных факторов на химический состав березы повислой спектральными методами	108
П.А. Свешников, А.И. Иванова Влияние температуры на морфологию поверхности монокристаллов германия	109
Т.В. Селезнева, Д.В. Аверкин, Д.В. Вишневецкий Надмолекулярное структурирование в низкоконцентрированных водных растворах на основе L-цистеина, N-ацетил-L-цистеина и ацетата серебра	110
А.М. Семенова, А.А. Степачева Конверсия тяжелых нефтей в сверхкритических условиях	111
А.Ю. Симанова, А.А. Степачева Селективное восстановление карбоксильной группы стеариновой кислоты	112
А.И. Синкевич, Е.М. Семенова Определение параметров доменной структуры соединения $SmCo_5$ по данным МСМ	113
М.И. Скобин, М.А. Феофанова Исследование комплексного соединения гепарина с гадолинием в водном растворе и твердом состоянии	114
Е.В. Смирнова, Е.В. Ожимкова Перспективы использования лигнина в качестве экологически безопасных стимуляторов роста <i>Linum usitatissimum</i>	115

А.В. Соколов, П.М. Пахомов, В.П. Галицын Роль растворителя при получении высокопрочных волокон СВМПЭ методом гель-формования.....	116
А.С. Стречень, Е.М. Семенова Трансформация микро-, нано- и доменной структуры сплавов SmZrCoCuFe в результате термических обработок.....	117
А.М. Суворова, Л.И. Ворончихина Термическая стабильность ионных жидкостей с тетрахлопалладат анионом.....	118
Т.А. Суставова, В.А. Липин Свойства полиамфолитных гидрогелей на основе гидролизованного полиакриламида	119
В.О. Томилов, А.В. Кадомиева Роль металлоорганических соединений в комплексном лечении гнойно-воспалительных процессов.....	120
Ю.Н. Травников, О.Е. Журавлев Влияние природы ионных жидкостей на размер квантовых точек сульфида цинка	121
В.Д. Усачева, Н.Н. Большакова Диэлектрический гистерезис в кобальт - и хромсодержащих кристаллах триглицинсульфата	122
А.В. Уткина, А.В. Быков Алкоксикарбонилирование пара-броманизола в присутствии каталитической системы Pd/MN100	123
О.С. Ушанова, О.Е. Журавлев Синтез и свойства ионных жидкостей на основе триэтиламина и 3-метилпиридина.....	124
В.В. Феногенова, А.В. Солнышкин, О.Н. Сергеева Диэлектрические свойства двухслойных монокристаллов нитрид алюминия/нитрид алюминия галлия.....	125
Н.-М. Филяповская, В.С. Лазусева, С.Л. Хижняк Олностакийный способ получения гидрогелей на основе аминокислоты L-цистеин с галогенидами металлов	126
П.В. Цай, А.А. Репин Реализация модуля БПФ на VHDL. Часть 1	127
М.Д. Чигина, С.А. Темникова Изучение реакции алкилирования 6-метилурацила	128
В.И. Шамахов, Ю.А. Рыжков Определение массовых долей золы и влаги в образцах какао-порошка.....	129
Л.А. Шаранова, В.М. Никольский Изучение минерального состава волжской воды на территории Тверского региона.....	130
К.Н. Шкерина, Л.Ж. Никошвили Влияние условий проведения реакции Сузуки на скорость превращения 4-броманизола с использованием катализатора Pd/MN100	131
А.Д. Шубин, С.А. Темникова Синтез производных 6-метилурацила	132

О.А. Шустова, А.В. Солнышкин, О.Н. Сергеева Пирозлектрический эффект в тонких монокристаллических пластинах AlN/AlGaN	133
К.А. Шухина, С.Д. Хижняк, П.М. Пахомов Процессы самоорганизации в водных растворах глицина, нитрата серебра и поливинилового спирта.....	134
А.И. Щеглова, И.Л. Кислова Исследование структуры и диэлектрических свойств релаксора $(Pb_xLa_{1-x})(Zr_yTi_{1-y})O_3$	135
А.А. Эрендженова, К.В. Шайтан Влияние вязкости среды на формирование вторичной структуры модельных полипептидов.....	136
Г.С. Юлмасов, В.Г. Алексеев Синтез и исследование металлокомплексов цефотаксима.....	137
Н.С. Яблокова, А.А. Степачева Магнитоотделяемые катализаторы деоксигенирования жирных кислот	138
Д.В. Ярмак, Ю.А. Рыжков Синтез и свойства катионных ПАВ на основе 2-диметиламиноэтанола	139
М.В. Ярусов, П.М. Пахомов, А.И. Маркова Оценка морфологии эмульсий методом оптической спектроскопии.....	140

УДК 544.473-039.63

Абусуек Диаля Атия

ГИДРИРОВАНИЕ ЛЕВУЛИНОВОЙ КИСЛОТЫ ДО ГАММА- ВАЛЕРОЛАКТОНА С ПРИМЕНЕНИЕМ ЦЕОЛИТНОГО КАТАЛИЗАТОРА Ru/HZSM-5

Руководитель: Л.Ж. Никошвили

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

В настоящее время процессы каталитического превращения лигноцеллюлозной биомассы в топливо и различные химические соединения стали привлекать все большее внимание исследователей. Левулиновая кислота (ЛК), являющаяся недорогим и универсальным химическим соединением-платформой, получаемая в процессе кислотного гидролиза лигноцеллюлозы, используется в качестве исходного материала для синтеза множества важных органических соединений, таких как гамма-валеролактон (ГВЛ), метилтетрагидрофуран и сложные эфиры ЛК. ГВЛ получил распространение в качестве «зеленого» растворителя и компонента в составе жидких транспортных топлив [1, 2]. ГВЛ часто синтезируют гидрированием ЛК с использованием различных гетерогенных катализаторов, в том числе и на основе цеолитов. Цеолиты распространены в топливно-нефтяной промышленности в качестве каталитического носителя для благородных (Pd, Pt, Ru) и неблагородных металлов (Ni), благодаря своей относительно высокой кислотности и минимальному выщелачиванию металлов из каталитической системы [3].

В рамках данного исследования методом пропитки по влагоемкости был синтезирован катализатор на основе цеолита HZSM-5 с расчетным содержанием Ru 3 мас.%, содержащий в качестве активной фазы частицы RuO₂. В ходе тестирования каталитической системы 3%-Ru/HZSM-5 в реакции гидрирования ЛК в периодическом режиме в водной среде были подобраны оптимальные условия реакции (интенсивность перемешивания, температура, давление водорода, масса ЛК и катализатора), что позволило достичь 99% выхода ГВЛ в относительно мягких условиях.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-58-80008).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Cao S., Monnier J. R., Regalbuto J.R., J. Catal. 2017. V. 347. P. 72-78.
2. Albani D., [Li Q.](#), Vilé G. et al., Green Chem., 2017. V.19. P. 2361-2370.
3. Losch P., Pinar A. B., Willinger M. G. et al., J. Catal., 2017. V. 345. P. 11-23.

УДК 541.64:546.57

Адамян Анна Нориковна

ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЕ В РАСТВОРЕ НА ОСНОВЕ L-ЦИСТЕИНА И АЦЕТАТА СЕРЕБРА В СРЕДЕ D₂O

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

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра физической химии

В настоящее время супрамолекулярная химия, химия молекулярных ансамблей и межмолекулярных связей, активно развивается, поскольку вносит большой вклад не только в фундаментальных знаниях, но и в практической разработках новых материалов. Такими материалами являются гидрогели на основе серосодержащей аминокислоты L-цистеина и ацетата серебра [1]. Для выяснения роли растворителя была произведена замена H₂O на D₂O. Образцы гелей были исследованы с помощью УФ и ИК спектроскопии, спектроскопия ЯМР, метод динамического светорассеяния (ДСР).

Как и в случае с обычной водой, при смешении исходных компонентов, растворенных в тяжелой воде, также сначала образуется мутная смесь, являющаяся продуктом взаимодействия катиона серебра и тиольной группы цистеина (меркаптид серебра), однако через 3-6 часов раствор становится прозрачным с желтоватым оттенком, что может свидетельствовать об образовании цепочечных структур из молекул меркаптида серебра, образуется при этом цистеин-серебряный раствор (ЦСР). УФ-спектры образцов с одинаковой концентрацией L-цистеина (3 мМ) имеют различия: наблюдается сдвиг полосы в сторону больших длин волн, что может свидетельствовать о некотором отличии в формировании супрамолекулярных цепей из молекул МС. ЦСР-H₂O имеет более кислую среду (рН = 3.60) по сравнению с ЦСР-D₂O (рН= 4,00), т.е. количество карбоксилатных групп в ЦСР-D₂O больше, чем в ЦСР-H₂O.

Методом спектроскопии ЯМР определена возможная структура супрамолекулярного агрегата и верифицирован механизм его взаимодействия с вводимыми в систему анионами соли в процессе формирования конечных гидрогелей. Результаты, полученные методами УФ, ДРС и ЯМР спектроскопии, подтверждают супрамолекулярную природу ЦСР и гидрогелей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Пахомов П. М., Хижняк С. Д., Овчинников М. М., Комаров П. В., Супрамолекулярные гели. Тверь: Твер. гос. университет, 2011

*Работа выполнена при финансовой поддержке фонда РФФИ
(проект № 18-33-00146мол_а) на оборудовании Центра коллективного пользования
Тверского государственного университета.*

УДК 681.785

Алексеев Алексей Дмитриевич

НЕЙРОННАЯ СЕТЬ ДЛЯ ПОИСКА ДЕФЕКТОВ В ОПТИЧЕСКИХ ВОЛОКОННЫХ СИСТЕМАХ СВЯЗИ

Руководитель: А.А. Репин

Тверской государственной университет, г. Тверь

Кафедра общей физики

В настоящее время в обработке большого количества данных активно внедряется технология искусственного интеллекта (ИИ). Для поддержания функционирования линий связи используют рефлектометрию. Использование ИИ в анализе рефлектограмм является следующим шагом развития измерительного оборудования (рефлектометров).

В среде Matlab мною реализована искусственная нейронная сеть, позволяющая автоматически интерпретировать результат рефлектометрических измерений. Путем изменения числа скрытых слоев сети и количества нейронов, выбрана оптимальная структура сети (рис. 1).

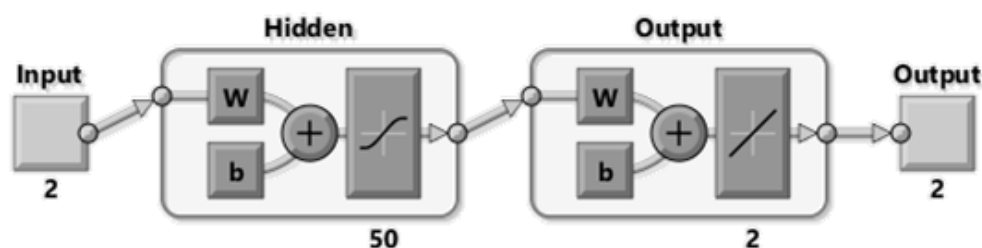


Рис. 1 Схематичное представление нейронной сети

Нейронная сеть интегрирована в алгоритм распознавания отклонений от типичной рефлектограммы «идеального» оптического волокна. Затем начинается обучение. Сеть обрабатывает записи в обучающих данных по одному, используя веса и функции в скрытых слоях, а затем сравнивает полученные результаты с желаемыми выходами. Во время обучения, один и тот же набор данных обрабатывается много раз, так как веса соединений постоянно уточняются.

Разработаны требования к локализации программы синтезированного алгоритма распознавания дефектов в ПЛИС на языке «VHDL». Рассмотрены два основных типа дефектов: неотражающие событие – сварка, напоминающая на рефлектограмме «ступеньку», и отражающие событие, наблюдаемое при переходе волокно/внешняя среда. Качественный и высокопроизводительный анализ рефлектометрических измерений является одним из главных показателей, характеризующих рефлектометр. Выработан оптимальный подход – предварительный поиск аномалий на рефлектограмме с дальнейшей проверкой и уточнением позиции события посредством искусственной нейронной сети.

УДК 541.64:546.57

Андрианова Яна Вячеславовна

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ГИДРОГЕЛИ НА ОСНОВЕ ЦИСТЕИН- СЕРЕБРЯНОГО РАСТВОРА И СОЛЕЙ ОДНО-, ДВУХ- И ТРЕХЗАРЯДНЫХ МЕТАЛЛОВ

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

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Супрамолекулярный гидрогель на основе L-цистеина и нитрата серебра представляет уникальную модельную систему для изучения процессов самоорганизации в разбавленном водном растворе с концентрацией растворенного вещества 0,01% и ниже. Наличие в водном растворе аминокислоты L-цистеина, нитрата серебра и электролита запускает процесс формирования супрамолекулярного ансамбля и образование пространственной гель-сетки. Было обнаружено, что хлориды металлов являются инициаторами процесса гелеобразования в цистеин-серебряном растворе (ЦСР). Цель работы - комплексное изучение процессов самоорганизации в ЦСР и гелеобразования под воздействием хлоридов металлов методами динамического светорассеяния (ДСР), измерения электропроводности, вибрационной вискозиметрии.

При добавлении в ЦСР электролита (хлориды металлов: Na^+ , Cu^{+2} , Al^{+3}) образуется тиксотропный гидрогель. С использованием пятибалльной шкалы удалось оценить прочностные свойства гидрогелей с разными инициаторами и определить концентрацию электролита, при которой достигается наивысшая прочность геля в 5 баллов: для NaCl – $8,3-8,7 \cdot 10^{-5}$; CuCl_2 – $9,2-9,6 \cdot 10^{-5}$; AlCl_3 – $8,2-8,4 \cdot 10^{-5}$ мМ. Методом вибрационной вискозиметрии проведены количественные измерения вязкости указанных гидрогелей, установлено соответствие между прочностными и реологическими свойствами системы. Показания динамической вязкости гидрогеля существенно зависят от заряда вводимого электролита: NaCl ($\eta \sim 9,5$); CuCl_2 ($\eta \sim 8,5$) и AlCl_3 ($\eta \sim 7,03$) мПа·с. Проведена сравнительная характеристика между кондуктометрическими и вискозиметрическими измерениями: уменьшение значений электропроводности напрямую зависит от увеличения вязкости в гидрогеле, т.е. свидетельствует о структурировании пространственной гель-сетки в ходе процесса гелеобразования. Проанализировано влияние заряда электролита на размер частиц в момент гелеобразования. Так, для ЦСР характерен размер кластеров $\sim 70-100$ нм. После добавления электролита происходит сдвиг полос в сторону больших значений (с увеличением концентрации и заряда электролита), что свидетельствует об увеличении размеров частиц в процессе гелеобразования и образовании больших кластеров - «зародышей гель-сетки».

УДК 676.017.62

Антонова Вероника Сергеевна

ИЗМЕРЕНИЕ УДЕЛЬНОЙ ПОВЕРХНОСТИ ПРИ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ОБРАБОТКЕ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ

Руководитель: И.И. Осовская

Высшая школа технологии и энергетики Санкт-Петербургского государственного
университета промышленных технологий и дизайна

г. Санкт-Петербург

Кафедра физической и коллоидной химии

Целлюлоза – биополимер, обладающий развитой капиллярно-пористой системой и сложной надмолекулярной организацией [1].

В ранее опубликованной работе [2] разработан метод низкотемпературной обработки (НТО) сульфатной беленой целлюлозы для улучшения гидрофильных и бумагообразующих свойств. Выявлены оптимальные условия замораживания влажных целлюлозных волокон для развития капиллярно-пористой структуры целлюлозы (время, температура, влажность) [2]. Развитием работы [2] является исследование влияния НТО на величину удельной поверхности методом сорбции газов. Измерения проводили на анализаторе сорбции газов NOVA 4200e фирмы Quantachrome [3]. Дегазацию азотом и полное высушивание образца проводили в течение суток при температуре 160 °С под вакуумом. Изотермы относятся к IV типу, а наличие гистерезиса на кривых изотерм адсорбции-десорбции свидетельствует о мезопористом характере поверхности. Полученные результаты исследования показали увеличение удельной поверхности целлюлозы, обработанной при оптимальных условиях НТО (77 К, 8 с), на 20 % в сравнении с необработанной целлюлозой, свидетельствующее о развитии капиллярно-пористой структуры целлюлозы в процессе НТО. Полученные результаты не противоречат выводам термодинамического анализа [2].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Ю. Б. Грунин, Л. Ю. Грунин, В. И. Таланцев, Р. Г. Сафин, Д. Б. Просвирников. Исследование влияния замораживания на состояние связанной воды в волокнах древесной целлюлозы // Вестник Казанского технологического университета. 2014. № 1. Т. 17. С. 46-48.
2. Osovskaya I.I., Antonova V.S. Khimiya Rastitel'nogo Syr'ya, 2019, no. 4, pp. 359–364. (in Russ.)
3. Вячеславов А.С., Померанцева Е.А. Измерение площади поверхности и пористости методом капиллярной конденсации азота: методическая разработка. - М.: Изд-во МГУ, 2006. – 55 с.
4. Антонова В.С. Влияние гидротермических воздействий на удельную поверхность целлюлозного волокна// XXV Каргинские чтения: тезисы докладов. - Тверь: ТвГУ, 2019. С. 98.

УДК 547.556.9

Базутин Арсений Сергеевич

**ПОЛУЧЕНИЕ КОМПЛЕКСА МЕДИ (II) НА ОСНОВЕ
2,4-ДИНИТРОФЕНИЛГИДРАЗОНА 4-ГИДРОКСИ-3-
МЕТОКСИБЕНЗАЛЬДЕГИДА**

Руководитель: И.Ю. Егорова

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра органической химии

Гидразон 4-гидрокси-3-метоксибензальдегида (ванилина) является одним из исходных веществ для получения азотсодержащего лиганда 1-фенил-3-(-4-гидрокси-3-метоксифенил)-5-(-2,4-динитрофенил)формаза. Формазаны содержат структурный фрагмент $-N=N-C=N-NH-$, где π -электроны кратной связи и p -электроны неподеленной пары атомов азота обуславливают донорные свойства и их способность образовывать различные производные, например, комплексные соединения с металлами. Это свойство применяется в аналитической химии для обнаружения металлов, а также для экстракции металлов. Комплексы формазанов являются хорошими водо- и светостойкими красителями, что обеспечивает их применимость в текстильной промышленности. А также формазанаты металлов используют в качестве катализаторов и компонентов оптических регистрирующих сред. Представленная работа посвящена получению 1-фенил-3-(-4-гидрокси-3-метоксифенил)-5-(-2,4-динитрофенил)формазаната меди (II).

Взаимодействием 4-гидрокси-3-метоксибензальдегида с 2,4-динитрофенилгидразином получен фенилгидразон альдегида. На следующем этапе синтеза был получен азотсодержащий лиганд путём азосочетания фенилдиазоний хлорида с 2,4-динитрофенилгидразоном ванилина. Реакцию проводили в метаноле в присутствии гидроксида натрия NaOH и карбоната натрия Na_2CO_3 (pH = 9) при температуре 2-3 °C и постоянном перемешивании в течении 1,5 часов. Третий этап состоял в получении комплекса двухвалентной меди смешением спиртового раствора 1-фенил-3-(-4-гидрокси-3-метоксифенил)-5-(-2,4-динитрофенил)-формаза с водным раствором сульфата меди (II).

Полученное соединение представляет собой мелкокристаллическое вещество темно-фиолетового цвета. Строение, растворимость и температура плавления исследуются.

УДК 66.097.3

Бахвалова Елена Сергеевна

ПРИМЕНЕНИЕ КОНКУРИРУЮЩИХ СУБСТРАТОВ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ СКОРОСТИ СИНТЕЗА ЦЕЛЕВОГО ПРОДУКТА РЕАКЦИИ КРОСС-СОЧЕТАНИЯ СУЗУКИ

Руководители: Э.М. Сульман, Л.Ж. Никошвили

Тверской государственный университет, г. Тверь
Региональный технологический центр

Образование углерод-углеродных связей является ключевым инструментом органической химии. К продуктам, получаемым посредством реакции Сузуки, относят лиганды, полимеры и сложные фармакологически активные молекулы, которые возможно синтезировать благодаря мягким условиям реакции, а также выборочной активации необходимых функциональных групп [1].

Актуальным остается поиск путей увеличения выхода целевого продукта в процессах кросс-сочетания с уменьшением затрат на сырье и катализаторы процесса. К одним из таких способов можно отнести метод конкурирующих субстратов, суть которого заключается в том, что одна и та же частица (это может быть молекула, свободный радикал, ион) одновременно взаимодействует с несколькими реагентами [2].

В рамках данной работы рассматривалось протекание кросс-сочетания арилгалогенидов и фенилбороновой кислоты в условиях конкурирующих субстратов. Были подобраны оптимальные параметры для проведения реакции Сузуки в присутствии катализатора на основе сверхсшитого полистирола, содержащего наночастицы Pd(0) в качестве активной фазы. Было обнаружено, что добавление 4-броманизола (4-БрАн) к 4-йоданизолу (4-ЙодАн) позволяет существенно повысить реакционную способность 4-ЙодАн и в десятки раз сократить время до достижения полной конверсии последнего. В случае смеси 4-хлоранизола и 4-БрАн было выявлено негативное влияние хлор содержащего арилгалогенида на протекание реакции Сузуки. Таким образом, было показано, что эффект от одновременного присутствия двух субстратов в некоторых случаях может быть успешно применен в синтезе биариллов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-08-00429).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Pan, C. Palladium catalyzed ligand-free Suzuki cross-coupling reaction Catalysis communication. 2008. V. 9. P. 321-323.
2. Денисов, Е.Т. Кинетика гомогенных каталитических реакций. М.: Высш. шк. 1978. 367 с.

УДК 544.169:544.134

Безлепкина Елизавета Владимировна

КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ СРАВНЕНИЕ БЕНЗОЛЗАМЕЩЕННЫХ

Руководители: Н.П. Русакова, Ю.Д. Орлов

Тверской государственной университет, г.Тверь
Кафедра физической химии, кафедра общей физики

Химия получения большого количества лекарственных препаратов на подготовительных этапах включает использование бензола (C_6H_6) и его замещенных, таких как фенол (C_6H_5-OH), толуол ($C_6H_5-CH_3$), бензойная кислота (C_6H_5-COOH) и других. Анализ распределения электронной плотности ($\rho(r)$) в молекулах позволит оценить влияние заместителей $-OH$, $-CH_3$ и $-COOH$ на электронные параметры топологических групп C и CH ароматического цикла (C_6H_5-) (Рис.). Геометрия C_6H_6 , C_6H_5-OH , $C_6H_5-CH_3$ и C_6H_5-COOH оптимизирована с помощью Gaussian03. Группы OH и $COOH$ находятся в плоскости, а в CH_3 один H - перпендикулярно плоскости ядер циклов. Заряды, энергии и объемы атомов вычислены в AIMALL и суммированы в параметры групп ($q(R)$, $E(R)$, $V(R)$).

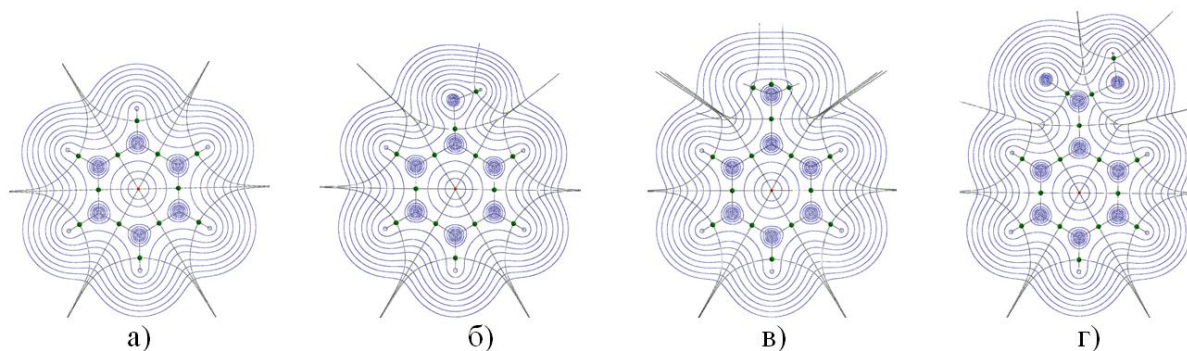


Рисунок: Распределение электронной плотности, связевые пути, критические точки на них и межатомные поверхности, проходящие через них в молекулах а) C_6H_6 б) C_6H_5-OH в) $C_6H_5-CH_3$ г) C_6H_5-COOH .

Равномерное распределение $\rho(r)$ по бензолу дает идентичные параметры $q(CH) = 0,000$ а.е., $E(CH) = -38,722$ а.е. и $V(CH) = 19,87 \text{ \AA}^3$, что делает C_6H_6 удобным репером для сравнения. Группа $-CH_3$ в толуоле является донором $\rho(r)$ для всех CH ароматического кольца, поэтому в *орто*-положениях $q(CH) = -0,017$ а.е., а остальные $q(CH) = -0,004$ а.е. Их $E(CH)$ немного уменьшается, а $V(CH)$ увеличиваются. Функциональные фрагменты $-OH$ и $-COOH$ в C_6H_5-OH и C_6H_5-COOH проявляют себя как акцепторы $\rho(r)$ с цикла, величина $q(CH)$ становится положительной, $E(CH)$ несколько увеличиваются, а $V(CH)$ уменьшается. Асимметричность геометрии $-OH$ и $-COOH$ приводит к разным изменениям $q(CH)$, $E(CH)$ и $V(CH)$, находящихся по отношению к заместителям в идентичных положениях. В феноле и толуоле параметры атомов H в *пара*-положении по отношению к $-OH$ и $-CH_3$ такие же как в бензоле $E(H) = -0,004$ а.е. и $V(H) = 7,46 \text{ \AA}^3$.

УДК 544.473:66.097.5

Бертова Алена Вениаминовна

ВЛИЯНИЕ ОБРАБОТКИ ПАЛЛАДИЕВОГО КАТАЛИЗАТОРА КАРБОНАТОМ НАТРИЯ НА ПРОЦЕСС СЕЛЕКТИВНОГО ГИДРИРОВАНИЯ АЛКИНОЛОВ

Руководитель: Л.Ж. Никошвили

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

Обработка катализаторов различными соединениями-модификаторами приводит к возникновению новых свойств, приводящих к изменению активности и селективности катализатора. Указанные характеристики являются ключевыми для промышленного использования, поскольку катализаторы, обладающие высокой активностью и селективностью, позволяют синтезировать наибольшие количества целевого продукта при минимальном получении побочных веществ.

В данной работе было проведено исследование возможности обработки палладиевого катализатора гидрирования на основе свержсшитого полистирола (СПС) марки MN100 водным раствором Na_2CO_3 различной концентрации. Pd-содержащий катализатор на основе СПС синтезировали методом пропитки по «влагоемкости» (импрегнации) из раствора, содержащего прекурсор палладия, исходя из расчетного содержания Pd 1%(масс.). Модификацию катализатора так же проводили методом пропитки по «влагоемкости» растворами карбоната натрия концентрацией 0.035 моль/л и 0.0175 моль/л (образцы катализаторов обозначили как 1%-Pd/MN100-1 и 1%-Pd/MN100-2, соответственно).

Исходный (необработанный) катализатор 1%-Pd/MN100, а также модифицированные образцы 1%-Pd/MN100-1 и 1%-Pd/MN100-2 были протестированы в реакции селективного гидрирования ацетиленового спирта C_5 до соответствующего олефинового спирта (полупродукта синтеза душистых веществ и жирорастворимых витаминов E и K) в периодическом режиме в термостатируемом стеклянном реакторе качания при атмосферном давлении H_2 при температуре 90°C с использованием толуола в качестве растворителя. Перед началом каждого эксперимента катализатор восстанавливался водородом в условиях реакции в течении 1 ч. Было показано, что после обработки раствором карбонатом натрия концентрацией 0.0175 моль/л (образец 1%-Pd/MN100-2) наблюдается заметное возрастание селективности по олефиновому спирту (с 76% до 98%) при 100% конверсии ацетиленового спирта).

УДК 53.087.9

Богдалов Виталий Олегович

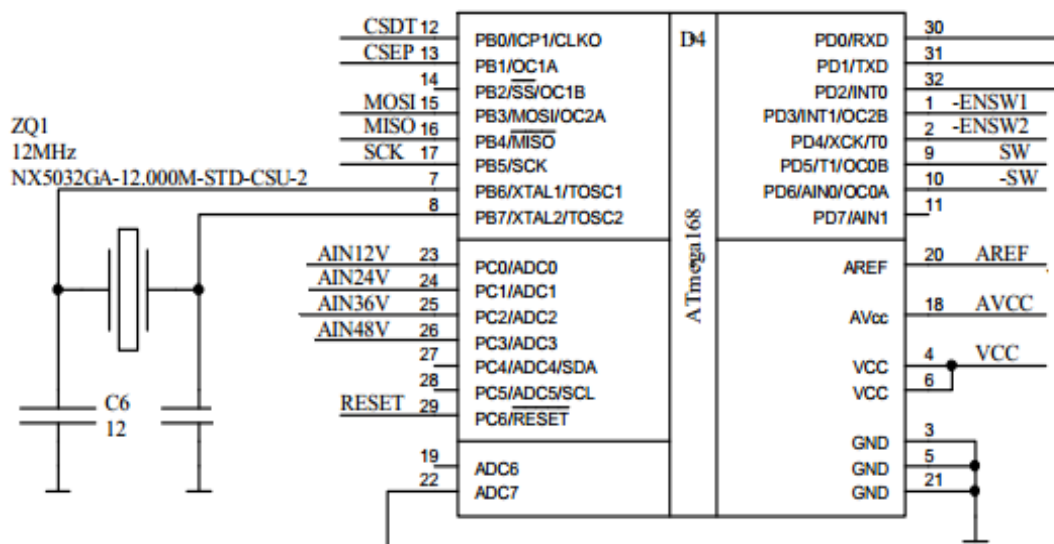
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КОНТРОЛЛЕРОВ ТИПА AVR НА БАЗЕ МИКРОКОНТРОЛЛЕРА АТМЕГА 168-15AD

Руководитель: О.В. Калугин

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра прикладной физики

При использовании автономных источников для питания скважинной геофизической аппаратуры, эксплуатируемой в условиях повышенной температуры, в большей степени для источников на основе литиевых элементов, контролируется напряжение, ток потребления и температура. Для обеспечения работоспособности аппаратуры и безопасности ее эксплуатации, при достижении минимально допустимого напряжения, короткого замыкания, превышение максимально допустимой температуры, есть необходимость отключения потребителя от источников питания.

Реализуется эта функция с помощью микроконтроллера семейства АТМЕГА, управляющего электронными ключами. Данные микроконтроллеры имеют низкое энергопотребление, встроенное АЦП и откалиброванный генератор. На вход VCC подается напряжение для питания микросхемы. Генерируется частота на ключи по выводам SW и –SW.



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Datasheets for electronics components, ATMEGA 168.
2. Белов А.В. Конструирование устройств на микроконтроллерах. СПб.: Наука и техника, 2005.

УДК 537.226.4

Бомбин Антон Сергеевич

ПРОЦЕССЫ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ ТГС И ДТГС

Руководитель: И.Л. Кислова

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физики конденсированного состояния

В последние годы активно разрабатывается подход к записи и хранению информации, основанный на использовании сегнетоэлектрических доменных конфигураций, легко переключаемых электрическим полем, но стабильным к другим воздействиям. В настоящей работе были исследованы процессы переключения в кристаллах ТГС и ДТГС. Исследования проводились в переменных полях в области частот от 30 до 7000 Гц. Были изучены зависимости сдвига фаз от напряженности и частоты приложенного поля.

Экспериментально установлена экстремальная зависимость сдвига фаз как от частоты, так и от напряженности измерительного поля. Установлено, что с увеличением частоты приложенного поля экстремум смещается в область больших значений приложенного электрического поля. Проведен расчет коэффициента вязкости по формуле:

$$\beta^2 = \frac{E^2 * (P_0 - P_a)}{P_a^2 * 2 * \omega^2}$$

Экспериментально установлено, что величина коэффициента диэлектрической вязкости убывает с увеличением частоты приложенного поля. Характер поведения экспериментальных кривых частотной и полевой зависимостей поляризации в области низких частот совпадает с рассчитанными в соответствии с теорией диэлектрической вязкости, предложенной В.М. Рудяком [1]. Частотная зависимость поляризации носит экспоненциальный характер при всех напряженностях приложенного поля.

На основании полученных экспериментальных результатов выявлена общность механизмов ионной проводимости и процессов реполяризации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Рудяк В.М. Вязкостные явления в сегнетоэлектриках и сегнетоэластиках // Изв.АН СССР. Сер.физ. 1983. Т.47, №4. С.798.

УДК 665.94

Бородина Анастасия Максимовна

МОДИФИКАЦИЯ КСАНТАНОВОЙ КАМЕДИ

Руководитель: И.И. Осовская

Высшая школа технологии и энергетики Санкт-Петербургского государственного университета промышленных технологий и дизайна,
г. Санкт-Петербург
Кафедра физической и коллоидной химии

Многочисленные исследования ксантановой камеди в основном связаны с её применением в качестве загустителя, стабилизатора и эмульгатора в косметике, фармацевтике, текстиле и в пищевой промышленности. Одним из наиболее важных свойств ксантановой камеди является способность увеличивать вязкость жидкости. В отличие от других смол, ксантановая камедь стабильна в широком диапазоне температур и рН. [1–3].

Целью данного исследования является использование модифицированной формы ксантановой камеди в качестве связующего для получения твердого древесного топлива – древесных гранул [4]. Модификацию проводили путем взаимодействия ксантановой камеди с уксусным ангидридом. Изучено влияние модификации на поверхностную активность ксантановой камеди. В работе выявлены оптимальные условия получения модифицированной формы ксантановой камеди (концентрации уксусного ангидрида, температуры и времени обработки) с целью увеличения поверхностной активности (измеренной методом Дю-Нуи), которая возрастает с повышением концентрации уксусного ангидрида, блокирующего часть гидроксогрупп. Число остаточных гидроксогрупп определяли методом ИК-спектроскопии.

Исследования показали, что композиция на основе древесного сырья и модифицированной камеди способствует увеличению прочности, более высокой теплотворной способности древесного топлива.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Влияние рН среды на вязкость и поверхностную активность модифицированных форм гуаровой камеди – материала для оболочек капсул. А.М. Бородина, А.П. Васильева / XXV Каргинские чтения: тезисы докладов. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2019. – С. 101.
2. Патент РФ № 2019110536, 22.11.2019. Композиция для получения твердого древесного топлива // Патент России № 2707072. 2019. Бюл. № 33. / Осовская И.И., Демьянцева Е.Ю., Бородина А.М., Васильева А.П.

УДК 544.476.2

Бровко Роман Викторович

ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА КАТАЛИТИЧЕСКОГО ГИДРИРОВАНИЯ МОНО- И ДИСАХАРИДОВ НА Ru/СПС MN 100

Руководитель: М.Е. Григорьев

Тверской государственной технической университет, г. Тверь
Кафедра БХС

Реакции каталитического гидрирования имеют большое значение для получения крупнотоннажные продукты промышленного назначения, например полиолов. При использовании новых катализаторов гидрирования проводят не только кинетические изыскания, но и физико-химические исследования катализаторов [1, 2], которые имеют большое значение для выяснения возможного механизма реакции гидрирования.

В ходе кинетического исследования гетерогенного катализатора Ru/СПС MN 100 в процессе жидкофазного гидрирования ксилозы, маннозы, лактозы и целлобиозы до полиолов было подобрано математическое уравнение процесса гидрирования:

$$W = \frac{kX_1}{1 + QX_2}$$

(k – кинетический параметр; Q – адсорбционно-координационный параметр, W – скорость гидрирования; X_1 – концентрация субстрата; X_2 – концентрация полиола). Состав поверхности катализатора, установленный в ходе моделирования, на основании энергий связи подуровней $3d_{5/2}$ и $3p_{3/2}$ рутения полученных методом РФЭС, характеризовался наличием RuO_2 и $RuO_2 \cdot H_2O$, а так же Ru. Такой состав поверхности способствует связыванию исходных субстратов (моно- и дисахаридов и водорода) поверхность катализатора (активными центрами). Это, а также математическое уравнение процесса дает основания предположить модель Ленгмюра-Хиншельвуда для реакции жидкофазного каталитического гидрирования моно- и дисахаридов.

Работа была выполнена в рамках проекта 19-08-00419 финансируемого РФФИ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Víctor Alberto Sifontes Herrera Hydrogenation of L-arabinose, D-galactose, D-maltose and L-rhamnose // Laboratory of Industrial Chemistry and Reaction Engineering Åbo Akademi University. 2012. P.97.
2. Haibin Jiang, Shuliang Lu, Xiaohong Zhang, Wei Dai and Jinliang Qiao Polymer-Supported Raney Nickel Catalysts for Sustainable Reduction Reactions. // Molecules- 2016. V. 21. P. 833.

УДК 661.715.7: 544.473-039.61

Бровко Роман Викторович

КИНЕТИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ГИДРИРОВАНИЯ D-ГЛЮКОЗЫ НА НИКЕЛЬСОДЕРЖАЩЕМ СВЕРХСШИТОМ ПОЛИСТИРОЛЕ

Руководитель: В.Ю. Долуда

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

Исследование синтезированных катализаторов в трансформации проводилось на реакторе повышенного давления «утка-автоклава». Анализ моносахаридов осуществлялся с помощью ВЭЖХ хроматографа с рефрактометрическим детектором.

Конверсию D-глюкозы рассчитывают по формуле (1):

$$K = \frac{C_{\text{глюк}}^{\text{нач}} - C_{\text{глюк}}^{\text{тек}}}{C_{\text{глюк}}^{\text{нач}}} * 100\% \quad (1)$$

Селективность процесса гидрирования D-глюкозы определялась по формуле (2).

$$S = \frac{C_{\text{сорб}}^{\text{тек}}}{C_{\text{глюк}}^{\text{нач}} - C_{\text{глюк}}^{\text{тек}}} * 100 \quad (2)$$

В ходе проведения экспериментов было определено влияние количества активного металла в катализаторе, среднего размера частиц катализатора, скорости перемешивания, концентрации глюкозы и катализатора, давления водорода на скорость образования D-сорбита. В результате исследования кинетики трансформации D-глюкозы в D-сорбит установлено, что оптимальные условия для достижения наиболее высокого выхода D-сорбита составляют: температура 140°C, парциальное давление водорода 60 атмосфер, начальная концентрация катализатора 0.068 г/мл, начальная концентрация глюкозы 0.165 моль/л, скорость перемешивания 150 об/мин, средний диаметр фракции 70 мкм, концентрация металла в катализаторе 25%.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Григорьев М.Е., Лебедева М.Б., Манаенков О.В., Долуда В.Ю., Филатова А.Е., Матвеева В.Г. // Бюллетень науки и практики. 2017. Т25, № 12 С. 118-124.

УДК 541.6

Брянцев Дмитрий Витальевич

ЭНТРОПИЯ АЛИФАТИЧЕСКИХ АЛЬДЕГИДОВ. ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД

Руководитель: М.Г. Виноградова

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Целью данной работы является – установление количественных корреляций «структура – энтропия» в альдегидах.

В работе рассмотрены методы теории графов и линейной алгебры. В частности для определения линейно независимых параметров расчетных схем через исходные экспериментальные данные. Также используются методы статистической обработки данных и методы регрессионного анализа, а найти наилучшие значения параметров позволяет метод наименьших квадратов (МНК).

Для достижения поставленной цели в работе были решены следующие задачи:

1) Проведена оценка состояния численных данных по энтропии в рассматриваемых соединениях.

2) Проанализированы и выбраны для построения корреляций «структура–свойство» наиболее подходящие топологические индексы. Дана теоретико-графовая интерпретация аддитивных схем.

Показано, что многие известные ТИ участвуют как числа параметров в конструировании таких схем.

3) По полученным формулам проведены численные расчёты энтропии выбранных соединений.

Рассчитанные величины согласуются с экспериментальными и позволяют предсказать в пределах ошибок опыта недостающие значения энтропии членов исследуемого ряда.

4) Проанализированы графические зависимости «Свойство – топологический индекс», «Свойство – номер изомера» и «Топологический индекс – номер изомера» и др., позволяющие графическим путём получать недостающие значения о свойствах.

Показано, что в одних случаях наблюдается симбатное изменение энтропии и топологического индекса. Это свидетельствует о хорошей корреляции между P и ТИ. В других случаях такой корреляции нет.

С увеличением числа изомеров корреляции между энтропией и ТИ усложняются, что необходимо учитывать при аналитическом изучении зависимостей «Энтропия – ТИ».

УДК 54.057

Варламова Анна Александровна

**ЗАМЕНА НЕ РАЗЛАГАЕМОГО И НАКАПЛИВАЮЩЕГОСЯ
В ОКЕАНЕ КОМПЛЕКСОНА
ЭТИЛЕНДИАМИНТЕТРАУКСУСНОЙ КИСЛОТЫ
НА ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНЫЕ КОМПЛЕКСЫ**

Руководитель: В.М. Никольский

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Установлено [1], что ЭДТА и ее соединения накапливаются в мировом океане, так как практически не поддаются разложению и поэтому считаются одними из наиболее опасных антропогенных загрязнителей. Мировая общественность обеспокоена угрожающим накоплением этого неразлагающегося в природной среде комплексона. Присутствие заметных количеств ЭДТА в окружающей среде создает серьезные экологические проблемы.

В соответствии с рекомендациями European Chemical Bureau, нами были получены комплексоны: N-(карбоксиметил)аминоянтарная кислота (КМАК); N,N'-бис(карбоксиметил)аминоянтарная кислота (БКАК); иминодиянтарная кислота (ИДЯК), этилендиаминдиянтарная кислота (ЭДДЯК), 1,6-гексаметилендиамин-N,N'-диянтарная кислота (ГМДЯК), производные янтарной кислоты (КПЯК) и изучены их кислотно-основные характеристики.

Из перечня изученных КПДК наиболее оптимальной по цене и свойствам оказалась этилендиаминдиянтарная кислота (ЭДДЯК), так как ее синтез осуществляется взаимодействием наиболее дешевых малеиновой кислоты и этилендиамина.

Комплексонаты металлов ЭДДЯК легко усваиваются, а в клетках разлагаются на аминокислоты и сукцинат, которые участвуют в энергообмене. Важной особенностью данных комплексонатов является содержание тех же структурных компонентов (амины, этилен) в растениях, что делает их естественными регуляторами метаболизма.

Поэтому мы предлагаем введение в составы пестицидных препаратов вместо неорганических солей магния комплексонаты магния, так как они способны из почвы вовлекать в биологическую цепочку дополнительное количество металла путем образования биядерных и даже полиядерных комплексов.

УДК 537.632

Васильев Алексей Денисович

ОСОБЕННОСТИ МИКРОСТРУКТУРЫ СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА

Руководитель: А.И. Иванова

Тверской государственный университет, г.Тверь
Кафедра прикладной физики

В настоящее время возрастает научный и технический интерес к «интеллектуальным» материалам, обладающим многофункциональными свойствами. Примером таких материалов являются сплавы Гейслера $Ni_{2+x}Mn_{1-x}X$ ($X = Al, Ga, In, Sn, Sb$). При приложении магнитного поля к данным сплавам, возникает обратимая деформация вследствие «перестройки» двойников мартенсита; такой эффект называется ферромагнитным эффектом памяти формы (ФЭПФ).

В настоящей работе представлены результаты исследования микроструктуры сплавов состава $Ni_{2,18}Mn_{0,82}Ga$, $Ni_{2,14}Mn_{0,81}Fe_{0,05}Ga$ и $Ni_{2,16}Mn_{0,86}Ga$. Микроструктура сплавов Гейслера изучается с использованием методов оптической, растровой и просвечивающей электронной микроскопии, атомно- силовой микроскопии и др. Данные методы позволяют определить особенности структуры сплавов Гейслера в зависимости от химического состава, а также от влияния дефектов и деформаций на микроструктуру. Сплавы Гейслера, обладающие мартенситным фазовым переходом, в высокотемпературной аустенитной фазе имеют кубическую структуру и относятся к пространственной группе $Fm\bar{3}m$. В низкотемпературной мартенситной фазе структура сплавов Гейслера зависит от химического состава и технологии получения. На рисунке 1 представлен мартенситный рельеф на механически полированных поверхностях сплавов Гейслера, выявленный с помощью оптической поляризационной микроскопии.

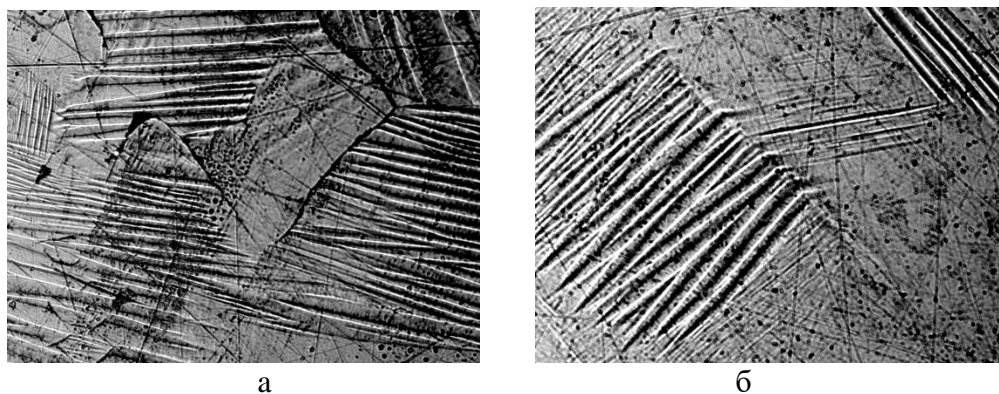


Рисунок 1 – Мартенситная структура сплавов $Ni_{2,18}Mn_{0,82}Ga$ (а)
и $Ni_{2,14}Mn_{0,81}Fe_{0,05}Ga$ (б)

УДК 665.94

Васильева Анастасия Павловна

ПЛЕНКООБРАЗУЮЩАЯ СПОСОБНОСТЬ ГУАРОВОЙ КАМЕДИ

Руководитель: И.И. Осовская

Высшая школа технологии и энергетики Санкт-Петербургского государственного
университета промышленных технологий и дизайна
г. Санкт-Петербург
Кафедра физической и коллоидной химии

Изучение свойств гуаровой камеди в основном направлено на практическое использование биополимера, преимущественно в пищевой промышленности [1]. Отсутствие фундаментальных знаний природного полимера ограничивает ее более широкое применение. В ранее опубликованной работе изучено влияние рН среды на вязкость модифицированных форм гуаровой камеди - материала для оболочек капсул [2].

Целью данного исследования является оптимизация условий получения тонких и гибких плёнок из камеди с различными функциями. Найдены оптимальные условия получения пленок различной толщины, различной растворимости и поверхностной активности в широком диапазоне рН и температур. Оптимальная температура растворения пленок из гуаровой камеди составила 30 °С. Показано влияние рН на растворимость пленок. В частности, при рН = 5 наблюдается снижение скорости растворения в 2 раза. Однако экспериментальные данные показали, что сильные кислоты провоцируют гидролиз и потерю вязкости растворов. Для повышения эластичности пленок вводили различные пластификаторы (0-5 %) – жесткие пленки, 5-15 % – полужесткие, более 15 % – мягкие. Показано влияние коалесцентом (2-4 % от массы пленкообразователя) на образование пленок и их свойства. Исследовали скорость и продолжительность испарения для предотвращения дефектов пленок.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Дзюбенко Н.И., Дзюбенко Е.А., Потоккина Е.К., Булынецов С.В. Гуар *Cyamopsis tetragonoloba* (L.) Taub.: характеристика, применение, генетические ресурсы и возможность интродукции в России. *Сельскохозяйственная биология*. – 2017. – №52. – № 6. – С. 1116-1128.
2. Влияние рН среды на вязкость и поверхностную активность модифицированных форм гуаровой камеди – материала для оболочек капсул. А.М. Бородина, А.П. Васильева / XXV Каргинские чтения: тезисы докладов. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2019. – С. 101.

УДК 537.226.4

Васильева Кристина Игоревна

ВЛИЯНИЕ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ОТКЛИК МОНОКРИСТАЛЛОВ СЕМЕЙСТВА ТГС

Руководитель: И.Л. Кислова

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физики конденсированного состояния

Известно, что сегнетоэлектрические кристаллы семейства (ТГС), применяются в пьезоэлектрических видикопах, что требует создания в них устойчивого монокристаллического состояния. Беспримесный ТГС не обладает заметной ростовой униполярностью. Для создания монокристаллических кристаллов ТГС в них вводятся различные примеси типов внедрения и замещения.

В настоящей работе исследованы диэлектрические свойства монокристаллических пластин кристаллов ТГС, ДТГС, кристаллов ТГС и ДТГС, легированных L- α -аланином. Кроме того, исследовано влияние внешних воздействий, а именно: воздействие переменного и постоянного полей, влияние отжига на диэлектрические свойства кристаллов.

Исследования проводились с помощью измерителя иммитанса Е7-20. Величина внешнего переменного поля изменялась в пределах от 0,04 В до 1 В. Во всех образцах наблюдалась дисперсия диэлектрической проницаемости, которая становилась более выраженной при увеличении напряженности внешнего переменного поля. Наиболее сильной дисперсионной зависимостью обладают кристаллы ДТГС с примесью L- α -аланина: величина диэлектрической проницаемости равна 2400 в низкочастотном диапазоне и 15 в высокочастотном диапазоне. Это может свидетельствовать о вкладе доменной структуры в процессы переполяризации образцов. В этих же образцах тангенс угла диэлектрических потерь по своим значениям был существенно выше, чем в образцах ТГС и ДТГС.

Поляризация образцов постоянным электрическим полем привела к существенному уменьшению величины диэлектрической проницаемости – почти в 20 раз у кристаллов ДТГС с L- α -аланином и в три раза у кристаллов ТГС, что связано с возникновением поляризованного состояния. Значения тангенса угла диэлектрических потерь также уменьшились. Это свидетельствует об отсутствии вклада доменных стенок в величину поляризации. Отжиг кристаллов при температуре выше температуры Кюри привел к тому, что во всех образцах появился максимум тангенса угла диэлектрических потерь в районе 10^4 Гц, что свидетельствует о наличии объемно-зарядовой поляризации.

УДК 615.074

Вахрушкина Мария Валерьевна

СОЗДАНИЕ ИОНОСЕЛЕКТИВНОГО ЭЛЕКТРОДА ДЛЯ АНАЛИЗА ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ ГРУППЫ РЕМАНТАДИНА

Руководитель: В.М. Никольский

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

В связи с возрастающим количеством новых лекарственных веществ (ЛВ) как никогда актуальна проблема их идентификации и определения. Равновесные электрохимические методы анализа ЛВ (прямая потенциометрия и потенциометрическое титрование) являются перспективными для определения лекарственных препаратов, которые могут быть переведены в соответствующую ионную форму. Эти методы отличаются высокой селективностью, достаточной точностью в сочетании с простотой изготовления. Отличительной особенностью электрохимических методов анализа ЛВ с помощью ионоселективных электродов является простота изготовления и удобство в работе.

В своей работе для стабилизации потенциала на границе ионоселективная мембрана – токоотвод мы использовали ионно - электронный трансдьюсер на основе полианилина. Чувствительный элемент созданного электрода выполнен в виде ионоселективной мембраны на основе пластифицированного поливинилхлорида и электродоактивного вещества в виде ионного ассоциата фосфорновольфрамовой кислоты с ремантадином.

Важнейшей характеристикой ИСЭ является рабочий диапазон рН. Исследования показали, что рабочий диапазон рН созданного электрода, когда при изменении кислотности среды потенциал электрода остаётся постоянным, достаточно широк от кислой области (рН = 2) до нейтральных значений (рН = 6). Это свидетельствует о том, что созданный электрод применим для анализа различных лекарственных средств – аналогов ремантадина (Ремантадин Аевксима, Ремантадин Актитаб, Ремантадин Велфарм, Ремантадин Кидс).

УДК 544.72

Веролайнен Виолетта Андреевна

СМЕСИ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ КАК СТАБИЛИЗАТОРЫ ЭМУЛЬСИЙ

Руководитель: С.А. Темникова

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра органической и биоорганической химии

Исследование смесей поверхностно-активных веществ (ПАВ) представляет значительный интерес, такие системы широко используются в различных прикладных целях, для стабилизации дисперсий косметических средств и лекарственных препаратов. В связи с этим большое значение приобретают исследования взаимного влияния различных поверхностно-активных веществ на физико-химические свойства их смесей.

В данной работе исследовался молекулярный комплекс додецилпиридиний хлорида (ДДПХ) $C_{12}H_{25}NC_5H_5Cl$ и полиэтиленгликоля ПЭГ-115. Додецилпиридиний хлорид относится к соединениям со средней поверхностной активностью и достаточно высокой ККМ, поэтому при добавлении к нему НПАВ наблюдали значительный синергический эффект коллоидно-химических свойств. При изучении влияния добавок необходима информация о коллоидно-химических свойствах додецилпиридиний хлорида при различных значениях рН.

Для оценки эффективности добавок ПЭГ-115 к растворам N-додецилпиридиний хлорида были исследованы коллоидно-химические свойства указанного комплекса ПАВ при различных значениях рН (1,5; 10,5). Согласно полученным результатам, как в кислых, так и щелочных растворах, в сравнении с нейтральными, наблюдается снижение значений поверхностного натяжения, более низкие значения ККМ (2-3 раз), но проявляют более высокую (2-5 раз) поверхностную активность, что согласуется с закономерностями полученными другими авторами. Наблюдаемый эффект более выражен для комплексов концентрация ДДПХ в которых превышает ККМ.

Полученные результаты по исследованию синергизма комплексов, состоящих из ДДПХ и ПЭГ-115 использовали для эффективной стабилизации гидрофобных дисперсий порошка серы.

УДК 544.72

Взорова Ольга Юрьевна

ВЫСОКОДИСПЕРСНЫЕ СИСТЕМЫ, КАК МЕТОДЫ ОЧИСТКИ ВОДЫ

Руководитель: Н.В. Веролайнен

Тверской государственной университет, г. Тверь
кафедра органической и биоорганической химии

В настоящее время актуальным является решение проблемы очистки водных сред от масляных и других загрязнений. До сих пор промышленные сточные воды не очищают от масел и загрязнений гидрофобной природы, а разбавляют большим количеством воды с добавками поверхностно-активных веществ и отправляют на очистные сооружения. Одним из перспективных методов очистки сточных вод от масляных загрязнений является метод ультрафильтрации с использованием мембранного фильтра. Использование такого фильтра возможно в случае перевода масляных загрязнений в устойчивые эмульсии. Устойчивые эмульсии могут быть получены при использовании эмульгаторов поверхностно-активных веществ различных классов в зависимости от метода их стабилизации.

В настоящей работе в качестве модели исследовали систему, содержащую вакуумное масло и водные растворы оксиэтилированного спирта ОП-10. Для нахождения температуры инверсии фаз (ТИФ) прямые эмульсии масла в водных растворах эмульгатора с концентрациями 25-50% подвергали нагреву в термостате с шагом в 2 °С. Для нахождения температуры инверсии фаз измеряли электропроводность кондуктометрическим методом. Температуру инверсии фаз подтверждали с помощью определения эквивалентной электропроводности эмульсий масла в водных растворах ОП-10. Обращение фаз проводили с использованием красителя Судан III. Переход прямых эмульсий в обратные изучали с помощью метода электронной спектроскопии.

На основании найденных значений ТИФ строили графики зависимости эквивалентной электропроводности от времени 25-50% эмульсий вакуумного масла в растворе ОП-10. Графики зависимости показывают, что скачки значений соответствуют температурам, при которых, произошла инверсия фаз, т.е. переход эмульсии масло в воде, в эмульсию вода в масле. Найденные значения ТИФ системы вакуумное масло – раствор ОП-10 25-% эмульсии составляет 28 °С, а для эмульсии с концентрацией 50-% составляет 48 °С.

Найденные в работе температуры инверсии фаз системы вакуумное масло– растворы ОП-10 могут быть использованы для очистки от гидрофобных загрязнений сточных вод на предприятиях металлургической и машиностроительной промышленности. А сам метод обращения фаз при температуре инверсии фаз можно рекомендовать при очистке от масляных загрязнений на мембранных фильтрах.

УДК 543.83

Викторов Илья Сергеевич

АНАЛИЗ СОДЕРЖАНИЯ РЕДУЦИРУЮЩИХ САХАРОВ В СУФЛЕЙНОЙ И ИРИСНОЙ МАССАХ

Руководитель: М.А. Феофанова

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

На предприятии ООО «Сладкий Орешек» осуществляется выпуск сахаросодержащей продукции в виде конфет из сбивных суфлейных масс. В связи с этим, становится необходимым регулярный контроль содержания редуцирующих сахаров в готовой продукции. Для анализа редуцирующих сахаров используются методы физико-химического анализа: глюкозооксидазный, перманганатный, феррицианидный и йодометрический методы.

Нами освоен анализ сбивных глазированных конфет «Райские облака» и конфет с комбинированными конфетными массами «Moda» на содержание редуцирующих сахаров феррицианидным методом:

Массу навески изделия берут из расчёта, чтобы предполагаемое количество редуцирующих сахаров в ней не превышало 0,016 г. В коническую колбу вместимостью 100 см³ вносят 25 см³ щелочного раствора феррицианида, 10 см³ дистиллированной воды. Вносят в колбу навеску и нагревают до кипения в течение 3-4 мин. Далее устанавливают соотношение между раствором феррицианида и стандартным раствором глюкозы по той же методике, но без навески исследуемого вещества.

Массовую долю редуцирующих сахаров в процентах вычисляют по формуле:

$$\omega_{\text{ред.сах.}} = \frac{0,0016 \cdot (V - V_1) \cdot 100 \cdot K}{m}$$

где V - объем стандартного раствора глюкозы, пошедший на титрование 25 см³ щелочного раствора феррицианида, см³;

V_1 - объем стандартного раствора глюкозы, пошедший на дотитрование исследуемого раствора, см³;

m - масса навески изделия, г;

K - поправочный коэффициент, значение которого зависит от массовой доли редуцирующих сахаров в исследуемом изделии по отношению к общему сахару.

В ходе анализа готовой продукции установлено, что она отвечает санитарно-гигиеническим нормам.

УДК 681.5

Востров Никита Владимирович

РАЗРАБОТКА СИСТЕМ ХОЛОДНОЙ ЭКСТРУЗИИ РАЗЛИЧНЫХ ЖИДКИХ СРЕД В АДДИТИВНОМ ПРОИЗВОДСТВЕ

Руководители: Д.В. Вишневецкий, Д.В. Аверкин

Тверской государственной университет, г. Тверь

Кафедра физики конденсированного состояния, кафедра физической химии

Технология FFF (Fused Filament Fabrication) является самой доступной и открытой технологий аддитивного производства с точки зрения модифицируемости и адаптивности. Базовый принцип и преимущество технологии заключается в экструдировании материала на рабочую поверхность слой за слоем, что позволяет печатать объекты со сложным дизайном. Целью данной работы является модернизация аппаратной части 3D-принтера технологии FFF для печати растворами низкомолекулярных и высокомолекулярных соединений с различной энергией поверхностного натяжения методом холодной экструзии. Исследование имеет практическое применение в области печати криогелей для инкапсуляции различных активных веществ и печати жидких пищевых материалов.

В данной работе проводились испытания систем на пищевом тесте, что позволяет быстро и в широком диапазоне варьировать такие параметры жидкой среды, как вязкость и угол смачивания относительно адгезии рабочей поверхности принтера. Авторами работы были рассмотрены холодные экструзионные системы, основанные на работе пневматического поршня и на работе гидродинамического напора жидкости при разнице давлений перед и после редуцирующего клапана.

По результатам предварительных испытаний установлено, что схемы экструзии на основе работы пневматического поршня являются универсальными, так как редуцирующая система позволяет настроить необходимое давление экструзии раствора, и, как следствие, определить качество печати в зависимости от скорости нанесения жидкого слоя на поверхность, толщины слоя и времени его застывания. Для печати растворов с вязкостью, равной вязкости воды, подходит система на основе гидродинамического напора жидкости, так как давления жидкости при атмосферном давлении достаточно для преодоления энергии поверхностного натяжения на выходе из экструзионного сопла. Дополнительными возможностями регулировки в обоих методах являются варьирование сечения экструзионных сопел от 0.8мм до 1.4мм.

УДК 541.62: 544.18

Ганичева Анастасия Александровна

ОПТИМИЗАЦИЯ ГЕОМЕТРИИ И РАСЧЕТ ЭНЕРГИИ ТРАНС- И ЦИС- ИЗОМЕРОВ ПРОИЗВОДНЫХ АЗОБЕНЗОЛА

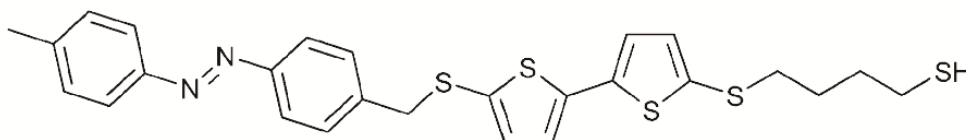
Руководитель: А.С. Павлов

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра физической химии

В последнее время интерес к органическим полупроводникам неуклонно возрастает. Это связано, в значительной степени, с успехами в практическом использовании органических полупроводников, полученных из электропроводящих полимеров и олигомеров. Использование олигомерных материалов позволяет получать более однородные по структуре и чистые материалы для пленочных фотоэлементов и источников света. В настоящее время возлагаются большие надежды на использование в качестве органических полупроводников олиготиофенов и их производных. Молекулы олиготиофенов обладают рядом таких преимуществ, как высокая подвижность заряда; способностью интенсивно эмитировать свет, за счёт приложенного напряжения.

Одним из интересных соединений данного класса является производное олиготиофена и азобензола, которое при облучении УФ светом с длиной волны 366 нм переходит в цис- изомер, а при облучении светом с длиной волны 440 нм наблюдается обратный переход в транс- форму [1]. Переход азобензола из транс- формы в цис- для мономолекулярного слоя приводит к резкому уменьшению электропроводности монослоя.



Оптимизация геометрии производилась в программе Gaussian с использованием метода DFT в базе B3LYP 6-311 G++(5d,7f).

В рамках квантовой теории атомов в молекуле [2], проведено исследование строения электронной плотности гош- и транс- конформеров производных азобензола и олиготиофена. Рассчитаны разность энергий конформеров, дипольные моменты и распределение парциальных зарядов на атомах. Показано, что переход в цис- форму приводит к уменьшению электронной плотности на тиофеновых циклах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Karpe S., Ocafrain M., Smaali K., Lenfant S., Vuillaume D., Blanchard P., Roncali. // J. Chemical Communications 2010, V. 46, (21), p. 3657– 3659.
 2. Бейдер Р. Атомы в молекулах. Квантовая теория. М.: Мир. 2001. 528 с.
- УДК 661.185.3 + 541.6 + 504.06

Горкина Татьяна Евгеньевна

ПОЛИАМФОЛИТ НА ОСНОВЕ ПОЛИАКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ

Руководители: Т.А. Суставова, В.А. Липин

Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна Высшая школа технологии и энергетики, г. Санкт-Петербург
Кафедра физической и коллоидной химии

Полимеры амфотерного типа содержат в своей структуре положительно и отрицательно заряженные функциональные группы, что существенно отличает их от полиэлектролитов и позволяет использовать в широком диапазоне значений рН [1]. Традиционные методы синтеза полиамфолитов включают в себя синтез исходных мономеров, использование слабого основания и слабой кислоты, инициаторов, а сам процесс получения конечного продукта занимает более 10 часов [2]

Для упрощения технологии получения полиамфолитов ставилась задача использования для синтеза сильного органического основания и слабой поликислоты без применения инициатора.

В результате выполненной работы были получены полиамфолиты на основе полиакриловой кислоты и алифатических диаминов по технологии, исключающей синтез исходных мономеров и применение инициатора. Функциональных групп алифатических диаминов обладают высокой активностью, что позволяет исключить использование инициаторов.

Методом ИК-спектроскопии был проведен качественный анализ полученных полиамфолитов. Исследование вязкости водных растворов полиамфолитов и в присутствии сильного электролита показали, что макромолекулы полимеров находятся в развернутом конформационном состоянии в широком диапазоне значений рН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Горкина Т.Е., Иркова А.С., Суставова Т.А., Липин В.А. Конформационное состояние макромолекулы амфотерного флокулянта // Сборник материалов V Всероссийской студенческой конференции с международным участием, посвященной Международному году Периодической таблицы химических элементов, РГПУ им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, 2019. С. 28
2. Henry K. Agbovi, Lee D. Wilson Design of amphoteric chitosan flocculants for phosphate and turbidity removal in wastewater // Carbohydrate Polymers, Volume 189, 2018, Pages 360-370.

УДК 541.134

Грачев Егор Максимович

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТЕНЦИОМЕТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ИОНСЕЛЕКТИВНОГО ЭЛЕКТРОДА С ОТКЛИКОМ НА N,N-ДИМЕТИЛИМИДДИКАРБОИМИДИАМИД

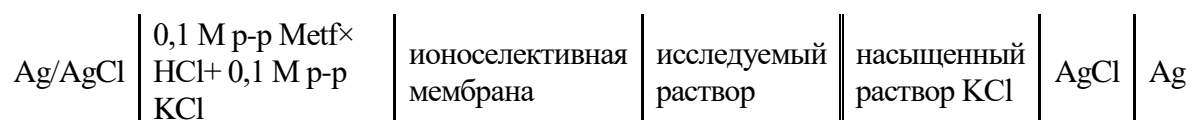
Руководитель: Г.И. Мантров

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

Потенциометрические методы, в частности, с использованием ионоселективных электродов (ИСЭ) выгодно отличаются простотой и экспрессностью анализа, однако применение этого метода для определения метформина (N,N-Диметилимиддикарбоимиддиамид) не описано в литературе, поэтому целью настоящей работы явилось создание ИСЭ для определения последнего, изучение его потенциометрических характеристик и разработка методики ионометрического определения N,N-Диметилимиддикарбоимиддиамид (в виде гидрохлорида) в готовых лекарственных формах.

В работе использовали N,N-Диметилимиддикарбоимиддиамид (в виде гидрохлорида) фармакопейной чистоты, фосфорно-молибденовую (ФМК) и фосфорновольфрамовую (ФВК) кислоты ч.д.а., диоктилфталат (ДОФ) ч.д.а., поливинилхлорид (ПВХ) марки С-70 х.ч. Электродноактивные вещества (ЭАВ) получали добавлением к раствору метформина растворов гетерополикислот (ФВК и ФМК) до полного выпадения осадка.

Пластифицированные мембраны имели следующий состав (в масс. %): ПВХ-35, ДОФ-60, ЭАВ-5. ИСЭ перед применением вымачивали в 0,05 М растворе никотиновой кислоты. Для определения электродных характеристик использовали электрохимическую ячейку:



Изготовленные электроды обладали хорошими потенциометрическими характеристиками. Интервал линейности электродной функции находится в промежутке 1-4 рС, крутизна электродной функции близка к теоретическому значению, время отклика составляло 5-10 с. Показано, что потенциал ИСЭ не изменяется в интервале рН 4 - 6, что делает этот интервал наиболее подходящим для определения метформина. Определение N,N-Диметилимиддикарбоимид-диамида (в виде гидрохлорида) в готовых лекарственных формах показало работоспособность созданного ИСЭ.

УДК 544.478+665.666.5

Гусева Полина Андреевна

КАТАЛИЗАТОРЫ ДЕОКСИГЕНИРОВАНИЯ СОЕДИНЕНИЙ БИО-НЕФТИ В КОМПЛЕКСНОМ СВЕРХКРИТИЧЕСКОМ РАСТВОРИТЕЛЕ

Руководитель: А.А. Степачёва

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

Быстрый пиролиз считается одним из наиболее перспективных методов, позволяющих эффективно превращать лигноцеллюлозную биомассу в жидкость, называемую био-нефтью. Однако сложный состав био-нефти приводит к тому, что продукт быстрого пиролиза является непригодным для непосредственного использования в качестве топлива. Поскольку био-нефть представлена, в основном, фенольными соединениями, образующимися при деполимеризации лигнина, высокое содержание кислорода и ее высокая кислотность приводят к таким недостаткам, как низкая стабильность при хранении, низкая теплотворная способность, высокая вязкость и низкая смазывающая способность. Вследствие этого, био-нефть должна быть модернизирована за счет уменьшения содержания кислородных соединений.

Модернизация био-нефти может осуществляться с помощью крекинга на цеолитах, либо гидродеоксигенированием/гидрированием в присутствии катализаторов на основе переходных и благородных металлов. Существует множество работ, посвященных гидродеоксигенированию как самой био-нефти, так и ее модельных соединений. Практически все исследования проводятся в атмосфере водорода в присутствии C_{10} - C_{14} углеводородов в качестве растворителя. Последние тенденции в области деоксигенирования сосредоточены на проведении процесса без использования водорода. Для этих методов используются сверхкритические жидкости.

В данной работе изучен процесс конверсии модельных соединений био-нефти (гваякола и анизол) в среде сверхкритического комплексного растворителя (н-гексан : изопропиловый спирт). Полимерные катализаторы, синтезированные гидротермальным осаждением благородных и переходных металлов в полимерной матрице гиперсвязанного полистирола, использовались для увеличения выхода углеводородов. Было найдено, что использование 5%-Pd-HPS или 5%-Co-HPS и 5%-Ru-HPS или 5%-Ni-HPS обеспечивает образование ароматических и циклических соединений соответственно.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 19-08-00318).

УДК 544.2

Данилова Анастасия Борисовна
КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРИБЛОК-СОПОЛИМЕРОВ

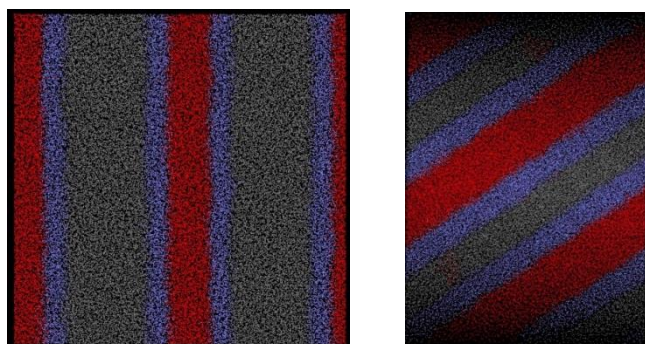
Руководитель: А.С. Павлов

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Блок-сополимерные материалы уже более 50 лет используются в промышленности, однако недавно стала обсуждаться возможность их применения в области нанотехнологий. Однако в настоящее время интерес вызывают не только свойства и механические характеристики полимеров. Большое значение приобретают процессы самоорганизации, возникающие в условиях далеких от равновесных. Контролируемое использование самоорганизации в материаловедении открывает широкие перспективы и привлекает внимание ученых. Как известно, в расплавах и концентрированных растворах блок-сополимеров в результате равновесной самоорганизации возможно образование структур с упорядоченными областями от нано- до микро-размера. Для диблок-сополимеров фазовое поведение хорошо изучено, построена диаграмма Лейблера с использованием среднеполевых методов.

Для триблок-сополимеров построение аналогичной диаграммы вызывает трудности, в связи с необходимостью учета большого количества параметров. Такие диаграммы предложены, однако всесторонней проверки правильности предлагаемых морфологий нет.

В данной работе методом диссипативной динамики частиц (ДДЧ) сделана попытка моделирования ламеллярной фазы в триблок-сополимерах типа А-В-С, при различных соотношениях длин блоков и энергий взаимодействия. В работе рассматриваются триблок-сополимеры, имеющие разные (несовместимые) блоки. В широких диапазонах длин блоков возникают ламеллярные фазы, показанные на рисунке, а – А16-В8-С8 и б – А8- В12- С12. При дальнейшем уменьшении длины одного из блоков образуется структура цилиндр на ламелях. Предсказываемая лестничная структура (ламель в ламели) в наших расчетах не наблюдается.



а

б

Рисунок. Ламеллярные структуры триблок-сополимеров

УДК 538.956

Деканова Анастасия Вячеславовна

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЛЕГИРОВАННОЙ КЕРАМИКИ НИОБАТА ЛИТИЯ

Руководитель: Е.В. Барабанова

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра прикладной физики

В исследовательской работе было проведено сравнение диэлектрических свойств чистой (LiNbO_3) и легированной Ti и Mg керамики ниобата лития ($\text{LiNbO}_3:\text{Mg}$ и $\text{LiNbO}_3:\text{Ti}$).

Для синтеза керамики ниобата лития использовали карбонат лития Li_2CO_3 и пентаоксид ниобия Nb_2O_5 . Смесь тщательно перемешивалась и синтезировалась при температуре 700°C . Далее смесь повторно измельчалась и спекалась при $T=1100^\circ\text{C}$. Часть спеченного материала измельчалась и тщательно смешивалась с оксидом магния MgO в весовом отношении $\text{LiNbO}_3:\text{MgO}=9:1$. Аналогично была смешана часть порошкообразного LiNbO_3 и оксида титана TiO_2 в весовом отношении $\text{LiNbO}_3:\text{TiO}_2=9:1$. Полученные смеси спрессовывались в форме диска диаметром 10 мм и спекались при температуре $T=1100^\circ\text{C}$. На все образцы были нанесены электроды при помощи серебряной пасты.

Для каждого образца проводились измерения емкости и тангенса угла диэлектрических потерь в диапазоне от 25 Гц до 1 МГц при комнатной температуре. По полученным данным построили частотные зависимости $\varepsilon'(\log\omega)$ и $\varepsilon''(\log\omega)$. Как видно на рисунке 1, у всех образцов диэлектрическая проницаемость уменьшается с ростом частоты. Причем особенно интенсивно на низких частотах. Легирование Ti уменьшает комплексную диэлектрическую проницаемость. Напротив, у образца $\text{LiNbO}_3:\text{Mg}$ очень высокие значения мнимой части диэлектрической проницаемости. Это связано с большой проводимостью образца.

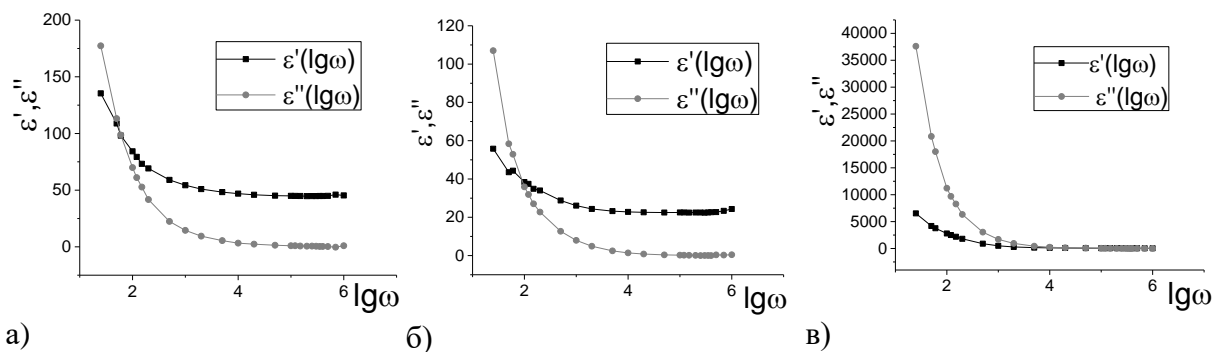


Рисунок 1. Частотные зависимости действительной и мнимой части комплексной диэлектрической проницаемости: а - LiNbO_3 , б - $\text{LiNbO}_3:\text{Ti}$, в - $\text{LiNbO}_3:\text{Mg}$.

УДК 537.632

Деревцова Евгения Вячеславовна

ДОМЕННАЯ СТРУКТУРА СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА

Руководитель: А.И. Иванова

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра прикладной физики

Сплавы Гейслера Ni_2MnX ($X = Al, Ga, In, Sn, Sb$), в которых наблюдается необычное сочетание ферромагнитных свойств и мартенситного превращение (МП) из высокотемпературной фазы (аустенит) в низкотемпературную фазу (мартенсит), являются объектом интенсивных фундаментальных и прикладных исследований.

В работе представлены результаты визуализации магнитных доменов массивных и ленточных сплавов Гейслера различного химического состава, магнитооптическими, электронно-микроскопическими и атомно-силовыми методами. Выявление магнитных доменов в сплавах с памятью формы связано с определенными трудностями: невысокие значения керровских констант, значительная оптическая анизотропия сплавов, возникновение мартенситного рельефа в результате фазового перехода ограничивает информативность методов прямых магнитооптических наблюдений доменной структуры [1]. Одной из методик визуализации "сложных" доменов является сочетание электронной микроскопии и метода порошковых осадков. На рисунке 1 представлены изображения полосовых доменов, ширина которых варьируется и находится в пределах 10-20 мкм (а), а также замыкающих клиновидных доменов, расположенных вдоль двойниковой границы мартенсита (б) (рис. 1).

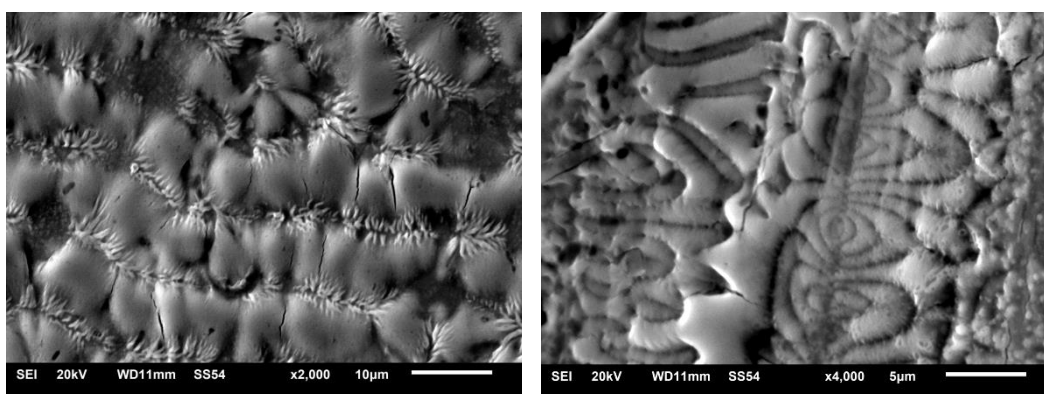


Рисунок 1 – Доменная структура сплава $Ni_{2,14}Mn_{0,81}Fe_{0,05}Ga$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Гречишкин Р.М., Иванова А.И., Барабанова Е.В. Магнитные свойства и доменная структура сплавов Гейслера: учеб пособие. Тверь: Твер.гос.ун-т. 2016. 75 с.
УДК 661.715.7: 544.473-039.61

Дзюба Мария Александровна

ИССЛЕДОВАНИЕ ЦЕОЛИТНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ В РЕАКЦИИ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ ТРАНСФОРМАЦИИ МЕТАНОЛА В УГЛЕВОДОРОДЫ

Руководитель: Н. В. Лакина

Тверской Государственный Технический Университет, г. Тверь
Кафедра биотехнологии химии и стандартизации

На сегодняшний день основным источником углеводородов является нефть. Однако ее мировые запасы весьма неравномерно распределены по различным регионам планеты и не столь велики, как ресурсы твердого и газообразного органического сырья, а также биоресурсы. Именно поэтому, весьма актуальным является поиск новых способов получения углеводородов из альтернативных источников, таких как уголь, метан и биовозобновляемое сырье [1-2]. Одним из таких способов является каталитическая трансформация метанола в углеводороды.

В представленной работе исследована эффективность цеолитных катализаторов, полученных путем проведения модификации цеолита металлами, исходный образец H-ZSM-5 кальцинировался при 550°C на воздухе и помещался в эксикатор для охлаждения. В дальнейшем высушенный образец обрабатывался 250 мл раствора NH_4NO_3 с концентрацией 0.1 моль/л, сушился при 105°C и кальцинировался при 550°C для перевода цеолита в H форму. После чего образец суспендировался в 250 растворе соли $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2$ на шейкере. В дальнейшем образец отфильтровывался и отмывался дистиллированной водой на фильтре и высушивался при 700°C. Таким образом были синтезированы образцы Zn(1.5 мас.%) -ZSM-5, Zn(3 мас.%) -ZSM-5, Zn(5 мас.%) -ZSM-5 с содержанием цинка 1.5, 3, 5 мас.%. Критериями эффективности полученных катализаторов служил выход получаемых в ходе процесса углеводородов.

При анализе полученных экспериментальных данных видно существенное увеличение алифатических углеводородов и уменьшение количества образующихся углеводородов ароматического ряда в составе реакционной смеси для модифицированных цинком катализаторов. Образец Zn(1.5 мас.%) -ZSM-5, содержащий оптимальное количество цинка в 1.5 мас.% характеризуется наибольшим содержанием алифатических углеводородов в реакционной среде.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Dry M. E. The Fischer-Tropsch process: 1950-2000 // Catalysis Today. – 2002. – Т. 71, № 3. – С. 227-241.
2. Kvisle S., Fuglerud T., Kolboe S., Olsbye U., Lillerud K., Vora B. Methanol to hydrocarbons. // Handbook of heterogeneous catalysis, electronic version. / Knözinger H. и др. – Weinheim: Wiley-VCH, 2008. – С. 2950–2965.
УДК 615.322

Дорошенко Иван Дмитриевич

ИЗУЧЕНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ОБРАЗЦОВ МАТЬ-И-МАЧЕХИ СПЕКТРАЛЬНЫМИ МЕТОДАМИ

Руководитель: С.Д. Хижняк

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Почти половина всех фармакологических препаратов производится на основе лекарственных растений, к которым относится мать-и-мачеха. В Тверской области можно встретить почти 100 видов лекарственных растений, однако их сбор может быть произведен в местах с негативным антропогенным воздействием. Анализ химического состава растений очень важен для оценки качества лекарственного сырья, а также для оценки состояния окружающей среды.

Цель данной работы – исследование химического состава листьев мать-и-мачехи из разных мест сбора методами Фурье-ИК и УФ спектроскопии. Растения были собраны в пяти районах города Твери (Пролетарский, СНТ Светлый, пл. Гагарина, Парк победы и Южный), а также в месте, удаленном от промышленных загрязнений, - фоновой зоне (СНТ Рябинки), 6 - 8 июня 2019 года. Для проведения спектрального анализа листья растений были высушены и измельчены. Для регистрации ИК спектров на спектрометре «Vertex 70» фирмы «Bruker» были изготовлены таблетки с бромидом калия по стандартной методике. Спиртовые и водные экстракты образцов были исследованы на спектрометре «Evolution Array» фирмы «Thermo Scientific».

Установлено, что в ИК спектрах образцов листьев мать-и-мачехи основные различия проявляются в области деформационных колебаний amino- карбоксильных, гидроксильных групп. В УФ спектрах водных экстрактов обнаружены полосы поглощения с максимумами ~240, ~285, ~330 нм, которые соответствуют фенольным соединениям – простым фенолам, оксибензойным кислотам. Следовательно, методы спектроскопии могут быть использованы для изучения изменений химического состава лекарственных растений под воздействием различных антропогенных факторов.

Данная работа выполнена на оборудовании ЦКП ТвГУ

УДК 661.185.3

Дубов Максим Олегович

ПОЛУЧЕНИЕ И СВОЙСТВА ЦВИТТЕР-ИОННЫХ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ НА ОСНОВЕ N,N- ДИЭТИЛЭТАНОЛАМИНА

Руководитель: Н.В. Веролайнен

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра органической и биорганической химии

Амфотерные поверхностно-активные вещества (ПАВ), в частности цвиттер-ионные ПАВ отличаются мягким воздействием на кожные покровы, обладают высокой биоразлагаемостью, а также антимикробным действием [1]. Цвиттер-ионные ПАВ применяют в различных синергических смесях для повышения эффективности и улучшения их свойств, например пенообразующей способности анионных поверхностно-активных веществ. Однако ввиду высокой стоимости производства их применение в различных областях крайне ограничено [2].

Целью данной работы является получение и изучение свойств цвиттер-ионных поверхностно-активных веществ на основе N,N-диэтилэтанолamina, что значительно сокращает материальные затраты на их производство и увеличивает способность к биоразложению.

Синтез осуществляли в две стадии. Этерификацию амина проводили декановой и октановой кислотами при температуре 150°C. Полученные эфиры очищали путем вакуумной перегонки при давлении в 5 мм рт. ст. На второй стадии процесса проводили нуклеофильное присоединение полученного эфира к акриловой кислоте при комнатной температуре.

Строение цвиттер-ионных ПАВ было подтверждено качественными реакциями на катион аммония и данными ИК-спектроскопии. ИК-спектры N-октаноилоксиэтил-N,N-диэтиламмонийпропионата и N-деканоилоксиэтил-N,N-диэтиламмонийпропионата содержат полосу валентных колебаний карбоксилат аниона равную 1561 см⁻¹.

Для полученных соединений были измерены удельная электропроводность, показатель преломления, поверхностное натяжение, определена пенообразующая способность их водных растворов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Файнгольд С.И., Кууск А.Э., Кийк Х.Э. Химия анионных и амфолитных азотсодержащий поверхностно-активных веществ / Файнгольд С.И.; под. ред. Файнгольда С.И. – Таллин: «Валгус», 1984 – 289 с.
2. Холмберг К., Йенссон Б., Кронберг Б., Линдман Б. Поверхностно-активные вещества и полимеры в водных растворах/ Холмберг К.; под ред. Ямпольской Г.П. – М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2015. – 530 с.

УДК 538.9

Дунаева Галина Григорьевна

ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ТРАНСФОРМАЦИИ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ СОЕДИНЕНИЯ Mn_5Ge_3

Руководитель: А.Ю. Карпенков

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра физики конденсированного состояния

Магнитная доменная структура является индивидуальной характеристикой магнитного материала и позволяет получить информацию о его локальных магнитных свойствах [1, 2]. Целью данной работы являлось исследование трансформации доменной структуры (ДС) соединения Mn_5Ge_3 в зависимости от температуры.

Mn_5Ge_3 представляет собой ферромагнитное интерметаллическое соединение, характеризующееся температурой Кюри (T_c) вблизи комнатной, при этом ось легкого намагничивания ориентирована вдоль оси c гексагональной кристаллической структуры.

Образец представлял собой поликристалл, на основе которого изготавливался шлиф. Эксперимент проводился с помощью установки на базе металлографического микроскопа Neophot-30, с использованием температурной приставки, состоящей из системы элементов Пельтье. Трансформация доменной структуры фиксировалась с помощью цифровой камеры Levenhuk M800 PLUS. Для получения изображений доменов использовался метод полярного эффекта Керра. Обработка изображений ДС и построение температурных зависимостей относительной намагниченности производилось в специализированной компьютерной программе. В ходе исследования были получены две температурные зависимости спонтанной намагниченности двумя независимыми методами: с помощью метода вибрационного магнитометра и анализа изображений трансформации ДС соединения Mn_5Ge_3 . При достижении температуры 294 К контраст полностью пропадает, что соответствует достижению температуры магнитного упорядочения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Пастушенков Ю.Г. Магнитная доменная структура. Количественный анализ микромагнитных параметров: Монография. Тверь: Тверской государственной университет, 2007. 151 с.
2. Hubert, A. The Analysis of Magnetic Microstructures / A. Hubert, R. Schafer // Springer. 1998. 720 p.

УДК 541.128/.128.5+ 544.41:544.342-145

Еремченкова Наталья Эдуардовна

ИССЛЕДОВАНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ 3%-Pt/MN270 В ЖИДКОФАЗНЫХ ПРОЦЕССАХ ГИДРИРОВАНИЯ АРОМАТИЧЕСКИХ СУБСТРАТОВ

Руководители: Л.Ж. Никошвили, А.В. Быков

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

Реакции гидрирования ароматических соединений находят широкое применение в химической промышленности. Продукты восстановления применяют для получения растворителей, синтетических смол, поверхностно-активных веществ, моторных топлив, технических смазок, красителей, моющих веществ, средств защиты растений.

Гидрирование аренов обычно осуществляется на гетерогенных катализаторах VIII группы (Rh, Ru, Pt, Ni, Pd, Co, Pd). Использование таких катализаторов в промышленном масштабе позволяет сократить стадии производства, увеличить выход продукта и повысить экологическую безопасность существующих производств.

Классические носители для гетерогенных катализаторов – неорганические матрицы: SiO₂, Al₂O₃ и TiO₂. Из наноструктурированных неорганических матриц большое значение имеют наноуглеродные материалы (нанотрубки, нановолокна, мезопористые сажи и др.) и цеолиты. В настоящее время внимание исследователей привлекает новый тип полимерных носителей – сверхсшитый полистирол (СПС), обладающий огромной внутренней поверхностью (до 1500 м²/г), способный набухать в органических растворителях. Таким образом, исследования в области поиска новых стабильных каталитических систем с целью их дальнейшего использования в реакциях гидрирования ароматических соединений на сегодняшний день актуальны, а применение новых структурированных носителей дает возможность оптимизировать состав катализаторов и регулировать дисперсность активного металла.

В настоящем исследовании было проведено тестирование Pt-содержащей каталитической системы на основе СПС (3%-Pt/MN270) в повторных каталитических циклах жидкофазного гидрирования нафталина в периодическом режиме. Было обнаружено, что от цикла к циклу активность каталитической системы 3%-Pt/MN270 возрастает, а селективность по тетралину постепенно снижается. При этом полимерная матрица СПС в ходе повторного тестирования остается стабильной.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-08-00435).

УДК 621.376.3

Жигунов Дмитрий Владиславович

РЕАЛИЗАЦИЯ МОДУЛЯ БПФ НА VHDL. ЧАСТЬ 2

Руководитель: А.А.Репин

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

В программе Intel Quartus Prime на языке VHDL реализованы следующие компоненты для вычисления БПФ: бабочка БПФ, блок умножителей, модуль памяти, состоящий из 2-х блоков и два модуля, изменяющие последовательность адресов на входе и выходе вычислительного элемента. Разработан блок, управляющий всеми вычислениями БПФ, выбором памяти и подачей данных. Блок управления получает сигналы синхронного сброса и начала вычислений, при этом стартовый сигнал подается только после загрузки всех входных отсчетов. Результаты вычислений подаются на АЦП через SPI интерфейс, где параллельный поток данных формируется в подаваемые последовательно пакеты.

Для проекта использовалась ПЛИС семейства Altera Cyclone IV. Микросхемы этой серии являются относительно недорогими устройствами, которые прекрасно справляются с небольшими некоммерческими проектами.

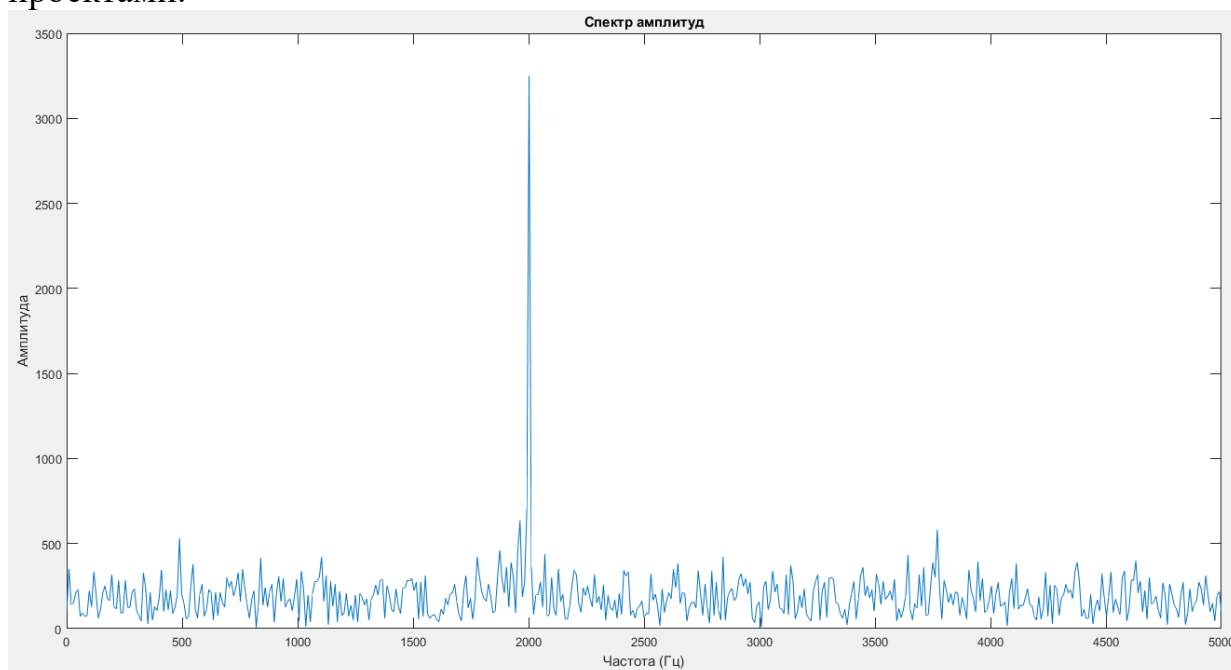


Рисунок –Результат работы устройства в виде графика в программе MATLAB. График представляет из себя амплитудный спектр: по оси абсцисс откладываются частоты, а по оси ординат – амплитуду.

УДК 678.6

Жохов Илья Сергеевич

СИНТЕЗ СОПОЛИАМИДНЫХ ФИБРИДОВ-6ПТ МЕТОДОМ ГАЗОЖИДКОСТНОЙ ПОЛИКОНДЕНСАЦИИ

Руководитель: Е.И. Лагусева

Тверской государственной технической университет, г. Тверь
Кафедра химии и технологии полимеров

Способом газожидкостной поликонденсации (интербисополиконденсацией) [1] получены сополиамиды-6ПТ на основе гексаметилендиамина и пиперазина, взятых в жидкой фазе, и терефталоилхлорида – мономера газовой фазы.

Таблица. Синтез сополиамидов-6ПТ в реакторе-фибридаторе с двухступенчатой реакционной камерой

$W_{г.}=32$ м/с; $C_{ХА}^{г.ф.}=1,0$ моль/м³; $n_{ДА}/n_{ХА}=1,5:1$; $T_{г.ф.}=200$ °С; $T_{ж.ф.}=98$ °С; $P_{изб.}=0,05$ МПа

Номер опыта	$C_{ж.ф.}^{сомономеров}$, кмоль/м ³		$\eta_{прив.} \cdot 10^2$, м ³ /кг	Выход, %	СП, °Ш-Р	$S_{уд.}$, м ² /г	$G_{ГХПК}$, г/кг ХА
	Гексаметилендиамин	Пиперазин					
1	0,01	0,09	8,0	67,6	25	34,2	39,5
2	0,02	0,08	8,4	71,6	19	20,0	35
3	0,03	0,07	9,4	72,5	14	19,0	19,5
4	0,04	0,06	10,0	74,3	6	17,0	80
5	0,05	0,05	9,2	76,7	9	16,0	25,2
6	0,06	0,04	9,0	91,7	12	16,0	70
7	0,07	0,03	8,8	89,2	21	22,8	50
8	0,08	0,02	8,6	92,3	31	34,0	60
9	0,09	0,01	8,2	91,4	54	34,0	50

Примечание: $W_{г.}$ – линейная скорость газовой фазы, $C_{ХА}^{г.ф.}$ – концентрация терефталоилхлорида в газовой фазе, $n_{ДА}/n_{ХА}$ – мольное соотношение мономеров жидкой и газовой фаз; $T_{г.ф.}$ – температура газовой фазы; $T_{ж.ф.}$ – температура жидкой фазы; $P_{изб.}$ – давление в реакторе; $C_{ж.ф.}^{сомономеров}$ – концентрация сомономеров жидкой фазы, $\eta_{прив.}$ – приведённая вязкость, СП – степень помола, $S_{уд.}$ – удельная поверхность, $G_{ГХПК}$ – концентрация гексахлорпараксилола.

Молекулярная масса, морфология и физико-механические показатели синтезируемых сополиамидов-6ПТ удовлетворительны [2], проблемным остается пониженный выход полимера, особенно гомополиамида-ПТ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Интербисополиконденсация в производстве сополиамидных фибридов методом реакционного формования и полиарилатов / В.А. Никифоров и др. // Известия вузов. Химия и хим. технология, 2006, т. 49, вып. 4. С. 65-70.
2. Особенности макрокинетики синтеза полипиперазинтерефталамидов газожидкостной поликонденсацией / А.А. Бондарь и др. // Хим. термодинамика и кинетика: сб. науч. тр. VIII Междунар. науч. конф., 2018. С. 79-80.

УДК 58.01/07

Забенкова Софья Владимировна

ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ НЕКОТОРЫХ СОЛЕЙ МЕТАЛЛОВ НА БОРЩЕВИК СОСНОВСКОГО

Руководитель: А.Ф. Мейсунова

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра ботаники

Борщевик Сосновского способен накапливать металлы в десятки и сотни раз превышающих их содержание в окружающей среде [1]. Высокие концентрации ТМ оказывают токсическое действие на физиологические процессы, что может быть полезным при разработке эффективных способов борьбы с этим инвазионным видом. Цель работы – оценка влияния некоторых солей металлов на растение борщевик Сосновского.

Объектом исследования – пробы растения борщевика Сосновского, который произрастал на территории г. Твери и его окрестностей. В течение летнего сезона 2019 г. осуществляли еженедельный полив растений отдельно растворами металлов: 0,75 % медным купоросом (CuSO_4), 0,25% гексацианоферратом ($\text{K}_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]$), 0,075% перманганатом калия (KMnO_4), 0,1% сульфатом магния (MgSO_4). Обработали 16 растений. Спустя 3 месяца растения доставили в лабораторию ЦКП ТвГУ для АЭС-ИСП-анализа по стандартной методике [2].

С помощью АЭС-ИСП-анализа в растениях, обработанных растворами металлов по сравнению с контролем обнаружили изменения. После полива CuSO_4 в растении увеличилось содержание меди, а также молибдена ($r=0,9$) и ванадия ($r=0,9$), в то же время уменьшилось содержание мышьяка ($r=-0,9$) и магния ($r=-0,9$). В результате воздействия $\text{K}_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]$ в растениях увеличилось содержание железа и уменьшилось содержание сурьмы ($r=-0,9$). Под влиянием KMnO_4 – увеличилось содержание марганца и калия, а также натрия ($r=0,9$) и магния ($r=0,9$), но уменьшились концентрации цинка ($r=-0,9$), V ($r=-0,9$). После полива MgSO_4 – увеличились содержания магния, а также хрома ($r=0,9$) и натрия ($r=0,9$), уменьшились концентрации мышьяка ($r=-0,9$) и лития ($r=-0,9$).

Таким образом, после полива разными растворами металлов в растениях борщевика Сосновского увеличивается содержания металлов, входящих в состав раствора и меняются концентрации металлов, имеющих сильные прямые и обратные корреляционные связи с накапливаемым основным металлом. Целесообразно дальнейшее изучение влияния металлов на физиологические процессы растения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Товстик Е.В., Липатников А. Е., Зивенко М.В., Ашихмина Т.Я. Исследование накопления тяжелых металлов растениями (*Heracleum sosnowskyi* Manden) // Вятский государственный университет. 2018. С. 175.
2. Мейсунова А.Ф., Иванова С.А. Техногенное загрязнение почв тяжелыми металлами в г. Вышний Волочек // Вестн. ТвГУ. Сер. Биология и экология. 2018. №4. С. 203-219.

УДК 544.147.3

Завилейская Виктория Алексеевна

**СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЕ В НИЗКОКОНЦЕНТРИРОВАННЫХ
ВОДНЫХ СИСТЕМАХ НА ОСНОВЕ АМИНОКИСЛОТЫ N-
АЦЕТИЛ-L-ЦИСТЕИНА И АЦЕТАТА СЕРЕБРА**

Руководители: Д.В. Аверкин, Д.В. Вишневецкий

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Самоорганизация в растворах супрамолекулярных систем на основе низкомолекулярных гелеобразователей, таких как аминокислоты и их производные, вызывает повышенный интерес благодаря большим возможностям их применения в медицине, фармакологии и т.д. Особо актуальны исследования с целью сохранения антисептических свойств растворов наночастиц серебра в отношении патогенных микроорганизмов и уменьшении их общей токсичности. Коллективом кафедры физической химии были исследованы растворы L-цистеина с ацетатом и нитратом серебра, однако для более точного ответа на вклад сопряженных амино- и карбоксильных групп аминокислоты L-цистеина в образовании агрегатов, авторами было проведено исследование самоорганизации в растворах ацетата серебра и аминокислоты N-ацетил-L-цистеина (НАЦац), где амин-группа заблокирована.

Установлено, что система НАЦац способна к самоорганизации при концентрациях N-ацетил-L-цистеина - 0,1-1 мМ и объемных соотношениях аминокислота/соль серебра - 1/1-1/1,4. При регистрации электронных спектров в УФ-видимом диапазоне установлено, что всем системам характерно поглощение при 265 нм. и 320 нм. Метод электрофоретического светорассеяния регистрирует наличие агрегатов с поверхностным зарядом от -40 до -60 мВ в зависимости от концентрации компонентов и мольного соотношения аминокислоты и ацетата серебра. Методом динамического светорассеяния установлено, что гидродинамический диаметр частиц лежит в диапазоне от 40 нм до 1000 нм и индексом полидисперсности от 0,8 до 1. Авторами выдвигается гипотеза, что самоорганизация в данных системах происходит путем образования хелатных комплексов ионов серебра и N-ацетил-L-цистеина и их дальнейшее взаимодействие между собой через ацетат-анионы и недиссоциированные молекулы ацетата серебра. Исследование будет продолжено.

*Работа выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования
Тверского государственного университета.*

УДК 537.226.4

Завьялов Андрей Игоревич

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ОТКЛИК СЕНСОРНЫХ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПЛЕНОЧНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ СОПОЛИМЕРА ВИНИЛИДЕНФТОРИДА С ТРИФТОРЭТИЛЕНОМ И УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Руководитель: И.Л. Кислова

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра физики конденсированного состояния

Настоящая работа поставлена с целью получения информации о диэлектрическом отклике пьезоэлектрических плёночных структур на основе сополимера винилиденфторида с трифторэтиленом и углеродных нанотрубок.

Исследования проведены на образцах полукристаллического полимера поливинилиденфторида (PVDF) и сополимера на его основе с добавлением трифторэтилена (P(VDF-TrFE)), принадлежащих к классу электроактивных полимерных веществ.

Проведено исследование вольт-амперных характеристик (ВАХ), на образцах P(VDF-TrFE) и P(VDF-TrFE)+УНТ с различными весовыми процентами углеродных нанотрубок. Установлено, что для пленок, не содержащих включения из углеродных нанотрубок, зависимость силы тока от величины приложенного поля является линейной. В образцах, содержащих УНТ, вольтамперные характеристики не являются линейными и наблюдается асимметрия в зависимости силы тока от напряжения.

Рассчитанные значения электропроводности представлены в таблице.

Концентрация, %	Электропроводность, Ом ⁻¹ ·м ⁻¹
0% неполяризованный	$4,5 \cdot 10^{-11}$
0% поляризованный	$2 \cdot 10^{-11}$
0,5% неполяризованный	$1 \cdot 10^{-8}$
0,5% поляризованный	$0,8 \cdot 10^{-9}$
1% неполяризованный	$1,3 \cdot 10^{-5}$
2% неполяризованный	$1,25 \cdot 10^{-5}$

Диаграммы Коула-Коула, построенные для этих образцов, представляют собой ярко выраженные полуокружности с центрами ниже оси Ох, что говорит о временах релаксации не дебаевского типа, т.е. говорит о наличии спектра времен релаксации.

Увеличение диэлектрической проницаемости и тангенса угла диэлектрических потерь в пленках P(VDF-TrFE) при наличии включений УНТ от 1% включительно, связано с вкладом в диэлектрический отклик проводимости композитных материалов.

УДК 537.226.4

Завьялова Светлана Дмитриевна

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 и процессах переключения ниобийсодержащих кристаллов титаната бария (BaTiO_3).

Исследования проведены на образцах монокристаллов титаната бария, выращенных методом Ремейки в калий-фторовом расплаве и содержащих 0,1 мол.%, 0,3 мол.% и 0,9 мол.% примесей.

Процессы переключения образцов исследованы с помощью схемы Соьера-Тауэра на частоте 50 Гц. Доменная структура кристаллов выявлена поляризационно-оптическим методом в отраженном свете с использованием микроскопа Neophot-30.

Установлено, что для ниобийсодержащих кристаллов BaTiO_3 петли диэлектрического гистерезиса практически не содержат искажений. По оси ординат петли гистерезиса смещены относительно нулевого уровня, что соответствует униполярному состоянию образцов. Для исследованных кристаллов наибольшие величины эффективной диэлектрической проницаемости составляют - (3,7; 2,4; 2,1) $\cdot 10^4$; переключаемой поляризации - (11; 11; 9,4) $\cdot 10^{-2}$ Кл \cdot м $^{-2}$, коэрцитивных полей - (64; 170; 170) $\cdot 10^3$ В \cdot м $^{-1}$, тангенса угла диэлектрических потерь - (0,23; 0,22; 0,17), коэффициента униполярности - (0,3; 0,3; 0,2); для перечисленных выше концентраций ниобия соответственно.

Полевые зависимости переключаемой поляризации для кристаллов $\text{BaTiO}_3:\text{Nb}^{5+}$ резко возрастают в интервале полей (2,2 – 5,5) $\cdot 10^4$ В \cdot м $^{-1}$; (4,5 – 11,6) $\cdot 10^4$ В \cdot м $^{-1}$; (2,4 – 8,7) $\cdot 10^4$ В \cdot м $^{-1}$; и выходят на насыщение в полях порядка (9; 35; 10) $\cdot 10^4$ В \cdot м $^{-1}$ для указанных концентраций соответственно.

Исследования доменной структуры кристаллов $\text{BaTiO}_3:\text{Nb}^{5+}$ показали, что в исходном состоянии при $T=20$ °С образец состоял из *a*-доменов и *c*-доменов. При легировании кристаллов титаната бария ниобием ионы Nb^{5+} замещают ионы Ti^{4+} , изменяя ионный состав решетки и оказывая существенное влияние на процессы его переключения и кинетику доменной структуры. Известно, что если радиус примесного иона (Ta^{5+} , Nb^{5+}) больше замещаемого (Ti^{4+}), то возникают двумерные механические напряжения, растягивающие пластину BaTiO_3 , которые приводят в основном к ее *a*-доменизации.

УДК 54.057

Зайкова Алеся Геннадьевна

ПОЛУЧЕНИЕ ДИПЕРФТОРГЕПТИЛОВОГО ЭФИРА ЭНДИКОВОЙ КИСЛОТЫ ДЛЯ МЕТАТЕЗИСНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ С РАСКРЫТИЕМ ЦИКЛА

Руководитель: В.Г. Бондалетов, А.А. Мананкова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск

Реакция Дильса-Альдера имеет большое значение в органической химии и позволяет синтезировать уникальные мономеры для метатеэической полимеризации. Одним из таких примеров являются норборнены, обладающими следующими свойствами: химическая стойкость, низкая диэлектрическая проницаемость, высокая термостойкость и стойкость к УФ-облучению [1-2].

Целью данной работы является получение мономера диперфторгептилового эфира эндиковой кислоты по реакции Дильса-Альдера. Мономер 3 получен при взаимодействии диперфторгептилового эфира малеиновой кислоты 1 и дициклопентадиена 2 (рис.1). Однако параллельно с получением продукта 3 образуется продукт 4, за счет конденсации циклопентадиена к веществу 3. Синтез проводили в ампулах в течение 24 ч при температуре 185 °С.

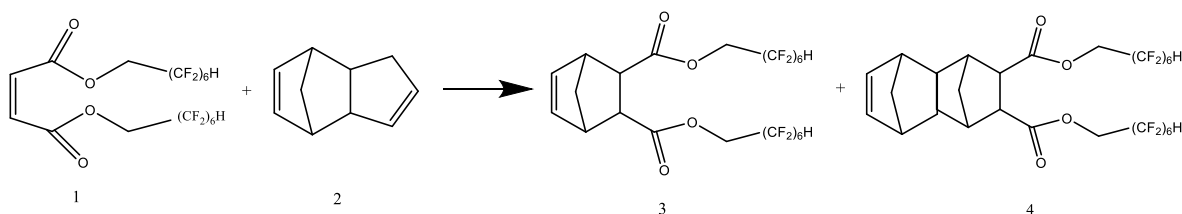


Рисунок 1 – Синтез диперфторгептилового эфира эндиковой кислоты

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Коновалов А.И. Реакционная способность аддендов в реакции диенового синтеза // Успехи химии, 1983. – Т. 11. – С.1852-1878.
2. Qian Feng, Dajun Chen, Danyang Feng, Libin Jiao, Zhigang Peng, Lixia Pei Synthesis of poly(norbornene-co-styrene) copolymers containing high styrene incorporation using bis(β-ketoamino) copper catalysts // J Polym Res, 2014.– Vol.21.– P.1–7.

УДК 544.144

Зиганшин Александр Витальевич

ОСОБЕННОСТИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ В КРАУН-ЭФИРАХ И ИХ ТИОАНАЛОГАХ

Руководители: Н.П. Русакова, В.В. Туровцев

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии, кафедра общей физики

Методом B3LYP [1] получено распределение электронной плотности ($\rho(r)$) для 12-краун-4 ($C_8H_{16}O_4$), его тиоаналогов, ($C_8H_{16}O_3S_1$ (1-тио-12-краун-4), $C_8H_{16}O_2S_2$ (1,4-дитио-12-краун-4), $C_8H_{16}O_1S_3$ (1,4,7-трיתיо-12-краун-4), $C_8H_{16}S_4$ (1,4,7,10-тетратио-12-краун-4)). 15-краун-5 ($C_{10}H_{20}O_5$) и его тиоаналогов ($C_{10}H_{20}O_4S_1$ (1-тио-15-краун-5), $C_{10}H_{20}O_3S_2$ (1,4-дитио-15-краун-5), $C_{10}H_{20}O_2S_3$ (1,4,7-трיתיо-15-краун-5), $C_{10}H_{20}O_1S_4$ (1,4,7,10-тетратио-15-краун-5), $C_{10}H_{20}S_5$ (1,4,7,10,13-пентатио-15-краун-5)). Для молекул вычислены характеристики распределения $\rho(r)$ в критических точках связи (3; -1), цикла (3; +1) и клетки (3; +3) с помощью программы AIMALL в рамках квантовой теории атомов в молекулах.

Слабые внутримолекулярные взаимодействия (ВМСВ), соответствующие водородным связям, найдены в девяти рассмотренных структурах. Выделено 5 типов ВМСВ отличающихся составом атомов (Ω): $O^{\cdots}H$, $S^{\cdots}H$, $H^{\cdots}H$, $O^{\cdots}O$, $O^{\cdots}S$. Квантовохимическое рассмотрение показало, что ВМСВ отсутствует только в $C_{10}H_{20}O_5$ и $C_{10}H_{20}O_4S_1$. В остальных структурах отмечены ВМСВ, приводящие к образованию дополнительных циклов. Так ВМСВ типа $O^{\cdots}O$ в $C_8H_{16}O_4$ участвует в замыкании двух циклических элементов по 7 Ω . Тогда как в $C_8H_{16}O_3S_1$ отмечено пять циклов: на 4 Ω , 7 Ω , 6 Ω , 3 Ω и 6 Ω , что связано с присутствием в структуре сразу нескольких ВМСВ $O^{\cdots}H$, $O^{\cdots}S$, $H^{\cdots}H$. Взаимодействие $O^{\cdots}H$ в $C_8H_{16}O_2S_2$ дает два циклических элемента на 7 Ω и 5 Ω , тогда как в $C_8H_{16}O_1S_3$ связи $O^{\cdots}H$, $H^{\cdots}S$ принимают участие в формировании четырех кольцевых фрагментов на 7 Ω , 5 Ω , 6 Ω и 6 Ω . В $C_8H_{16}S_4$ получено шесть циклов - на 7 Ω , 7 Ω , 5 Ω , 5 Ω , 6 Ω и 6 Ω . В $C_{10}H_{20}O_3S_2$ их два: на 13 Ω и 6 Ω , в $C_{10}H_{20}O_2S_3$ - шесть: на 5 Ω , 6 Ω , 5 Ω , 4 Ω , 7 Ω и 7 Ω ; в $C_{10}H_{20}O_1S_4$ - три: на 6 Ω , 13 Ω и 6 Ω ; в $C_{10}H_{20}S_5$ - четыре: на 6 Ω , 6 Ω , 6 Ω и 7 Ω .

Распределение электронной плотности показало наличие клетки в $C_8H_{16}S_4$ из 14 атомов, а в $C_{10}H_{20}O_2S_3$ из 8 атомов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., Котомкин А.В. Электронное строение радикалов эфиров сульфокислоты Известия ВУЗов. Серия: Химия и химическая технология. 2019. Т. 62. № 10. С. 96-102.

УДК 678.6

Зуев Иван Александрович

МОРФОЛОГИЯ ЖИРНОАРОМАТИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРОВ, СИНТЕЗИРОВАННЫХ РЕАКЦИОННЫМ ФОРМОВАНИЕМ

Руководитель: Е.И. Лагусева

Тверской государственной технической университет, г. Тверь
Кафедра химии и технологии полимеров

Реакционное формование жирноароматических фибридов методом газожидкостной поликонденсации (ГЖПК) позволяет получать гомо- и сополиамидные фибриды, различающихся как по химическому составу, так и по морфологии [1]. На свойства и поведение полиамидов, в особенности полиамидных фибридов, в условиях переработки и эксплуатации, в отдельных случаях, значительное влияние оказывает их морфология.

В процессе реакционного формования придание полимерному материалу требуемой формы происходит непосредственно в ходе синтеза. Параллельно с химическими процессами полиамидирования и нейтрализации низкомолекулярного продукта в реакционной камере идут физические процессы формования заданной морфологии [2]. Возможность фибридообразования определяется в основном двумя факторами: устройством реакционной камеры и химическим строением используемых мономеров газовой фазы.

Структура получаемых полиамидов зависит от строения мономеров (изофталоилхлорида (ХАИК) и терефталоилхлорида (ХАТК): относительно большое значение дипольного момента у остатка ХАИК в полигексаметиленизофталамиде (ПА-6И) и малое значение у остатков ХАТК в полигексаметилентерефталамиде (ПА-6Т). В условиях ГЖПК образуются как фибриды (например, ПА-6Т и полипиперазинтерефталамид (ПА-ПТ)), так и газонаполненные полимеры (например, ПА-6И и полипиперазинизофталамид (ПА-ПИ)), что можно объяснить присутствием в ПА-6И, ПА-ПИ меж- и внутримолекулярных водородных связей, а для ПА-6Т и ПА-ПТ – только межмолекулярных. Это подтверждается микроскопическими и электронно-микроскопическими исследованиями указанных полимеров.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Реакционные системы газожидкостного полиамидирования в высокотурбулизованном гидродинамическом режиме / В.А. Никифоров и др. // Вестник Тверского гос. ун-та. Серия: Химия, 2016, С.195-206
 2. Макрокинетика синтеза политерефталамидов способом газожидкостной поликонденсации / Е.И. Лагусева и др. / Вестник Новгородского гос. ун-та им. Я. Мудрого. Серия Технические науки, № 5(103), 2017. – С. 78–84.
- УДК 543.611

Зуева Алёна Сергеевна

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ АНАЛЬГИНА РАЗНЫХ ПРОИЗВОДИТЕЛЕЙ

Руководитель: Н.В. Баранова

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

Одной из важнейших проблем современного российского здравоохранения является контроль качества лекарственных препаратов. Несоответствие заявленной и фактической дозировки активного вещества в выпускаемых формах, а также фальсифицированные препараты могут повлечь за собой серьёзные последствия при лечении пациентов.

В качестве объекта исследования был выбран препарат аналгин трёх различных производителей (ЗАО «МЕДИСОРБ», АО «ФП «Оболенское», ЗАО «ПФК Обновление») и баралгин («Сафони Индия Лимитед»). Оба препарата содержат метамизол натрия в качестве активного вещества.

Количественное определение метамизола натрия проводили методами йодометрического и йодатометрического титрования [1]. Результаты исследования приведены в таблице 1.

Таблица 1

Результаты количественного определения аналгина

Метод анализа	Масса метамизола натрия в исследуемом образце, мг			
	ЗАО «МЕДИСОРБ»	АО «ФП «Оболенское»	ЗАО «ПФК Обновление»	Сафони Индия Лимитед, Индия
Йодометрическое титрование	495,00	490,21	492,54	494,78
Йодатометрическое титрование	495,42	490,48	492,48	496,79

В результате проведенного анализа разных лекарственных препаратов, содержащий аналгин, можно сделать вывод о соответствии заявленного и фактического количества активного вещества в одной таблетке от разных производителей, что подтверждает подлинность этих препаратов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Государственная фармакопея XIV. Метамизол натрия. – М: МЗ РФ, 2018. – С.4333.
УДК 691.175.746

Исаев Иван Денисович

УТИЛИЗАЦИЯ И ПЕРЕРАБОТКА ПЕНОПОЛИСТИРОЛА В ШКОЛЬНЫХ ЛАБОРАТОРНЫХ УСЛОВИЯХ

Руководитель: Д. С. Исаев

МОУ «Средняя общеобразовательная школа № 43» г. Тверь

Среди наиболее удобных способов утилизации и переработки пенополистирола (ППС) в школьных лабораторных условиях были выделены растворение ППС в органических растворителях и уменьшение объема ППС под действием температуры. В ходе эксперимента наблюдалось растворение ППС в растворителях «646» (1), «Сольвент» (2), «Диэтиловый эфир» (3), «Ацетон» (4). Растворители «Бензин», «Керосин», «Этанол», «Уайт-спирит» ППС не растворяют. Продукты растворения ППС в растворителях использовали в качестве «полистирольного клея». Значения средних коэффициентов склеивания (СКС) различных поверхностей представлены в таблице.

Таблица 1. Средние коэффициенты склеивания «полистирольного клея»

	Кирпич	Металл	Мрамор	Керамика	Стекло	Картон	Дерево	Бумага	СКС
1	2,1	1,4	2,9	1,8	1,3	2,3	2,3	2,3	2,1
2	1,0	1,1	1,3	1,1	1,0	1,4	1,3	1,4	1,2
3	1,8	1,0	2,1	1,1	1,3	1,5	1,8	2,5	1,6
4	2,3	1,4	2,6	2,1	1,4	2,4	2,6	2,3	2,1

Наилучшей склеивающей способностью обладает образец на основе растворителя (4), наиболее удобный для покрытия поверхностей – образец на основе растворителя (2). Объем ППС при его термической обработке в среднем уменьшался в 21 раз (оптимальные условия – воздействие 20 минут при 160⁰С). Полученные материалы использовали в качестве компонентов цементирующей смеси (состав: кирпичная крошка, крошка из термически обработанного ППС, раствор ППС в растворителе (4); соотношение компонентов 1:1:2) и для реставрации лабораторного подноса. Покрытие выдерживает воздействие концентрированных растворов кислот и щелочей, сильных окислителей, растворов пероксида водорода и аммиака, а также механическое воздействие и температуру до 120⁰С.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Артеменко А.И. Применение органических соединений / А.И. Артеменко. – М.: Дрофа, 2005. – 95 с.
2. Грандберг И.И. Органическая химия: учебник для бакалавров. – 8-е изд. – М.: Издательство Юрайт, 2012. – 608 с.

УДК 544

Исаева Дарья Алексеевна

ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ 2,2,2,-ТРИФТОРЭТАНОЛА И ЭТАНОЛА МЕТОДАМИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Руководитель: А. С. Павлов

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

В последнее время для проведения синтезов стали использовать довольно экзотические соединения в качестве растворителей. Это и ионные жидкости, и апротонные растворители с высокой диэлектрической проницаемостью, и фторпроизводные алифатических углеводородов. Весьма интересными растворителями являются 2,2,2—трифторэтанол и гексафторизопропанол, они смешиваются с водой и обладают кислотными свойствами. 2,2,2—трифторэтанол является более сильной кислотой Бренстеда, чем уксусная кислота, что позволяет использовать эти растворители как катализаторы.

Еще одной особенностью фторированных спиртов является их отношение к белкам: этанол в больших концентрациях вызывает денатурацию белка, а фторированные спирты способствуют образованию более плотных глобул, что используется при изучении строения белков и в ферментативном катализе [1]. К настоящему времени нет однозначного объяснения этого явления.

Одной из задач исследования является изучить особенности водных растворов 2,2,2—трифторэтанолола и сравнить с водными растворами этанола. Расчеты выполняются с использованием молекулярной динамики в программе LAMMPS с параметрами валентно-силового поля PCFF.

На первом этапе моделирования с применением программы GAUSSIAN в базисе B3LYP/6-311++G(d,p) была оптимизирована структура, были рассчитаны заряды на атомах и дипольные моменты молекул этанола и 2,2,2—трифторэтанолола.

Сравнение показало, что 2,2,2—трифторэтанолол ($\text{CF}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$), в отличие от этанола, имеет способность образовывать кластеры в водных растворах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Danilo Roccatano, Giorgio Colombo, Marco Fioroni and Alan E. Mark/ Mechanism by Which 2,2,2-Trifluoroethanol/Water Mixtures Stabilize Secondary-Structure Formation in Peptides: A Molecular Dynamics Study // Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2002. V. 99, No. 19. P. 12179-12184

УДК 541.6

Калюжная Лиана Арслановна

ТЕОРИЯ ГРАФОВ В ИССЛЕДОВАНИИ КОРРЕЛЯЦИЙ «СТРУКТУРА – ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ» ТИОСПИРТОВ

Руководитель: М.Г. Виноградова

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Поиск закономерностей между свойствами молекул и их строением относится к проблеме связи «структура-свойство», которая давно привлекает внимание химиков.

Целью настоящей работы является – установление количественных корреляций «структура-энтальпия образования» в тиоспиртах.

В работе использовались методы теории графов, статистического анализа, линейной алгебры, в частности, матричного исчисления [1;2] и т.д.

Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

1. Дана оценка состояния численных данных по энтальпии образования тиоспиртов.
2. Исследованы зависимости вида $P=f(ТИ)$. Выявлены уравнения, отвечающие наиболее тесной корреляционной связи между энтальпией образования тиоспиртов и топологическими индексами.
3. Выполнены численные расчёты энтальпии образования в тиоспиртах, согласующиеся с экспериментом. Получены новые, ранее неизвестные, данные.
4. Построены и проанализированы графические зависимости вида “Энтальпия образования – ТИ”, “Энтальпия образования - номер изомера” и “ТИ - номер изомера”. Найдено, что энтальпия образования хорошо коррелирует с индексом W . С увеличением числа изомеров корреляции между энтальпией образования и ТИ усложняются. Это необходимо учитывать при аналитическом изучении зависимостей “Энтальпия образования – ТИ”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Виноградова М.Г., Белова А.А. Энтальпия образования тиоспиртов. Численные расчёты и основные закономерности. // Вестник Тверского государственного университета. Серия «Химия»- 2016.- № 4.-С. 82-87.
2. Виноградова М.Г. Графические зависимости в изучении корреляций структура – свойство тиоспиртов // Вестник Тверского государственного университета. Серия «Химия»- 2017.- № 4. -С.73-78.

УДК 544.654.2

Камышева Ксения Андреевна

ОКСАЛАТНО-СУЛЬФАТНЫЕ И ФТОРИД-ХЛОРИДНЫЕ ЭЛЕКТРОЛИТЫ ДЛЯ ЭЛЕКТРООСАЖДЕНИЯ СПЛАВОВ ОЛОВО-КОБАЛЬТ

Руководители: Р.Ф. Шеханов, С.Н. Гридчин

Ивановский государственный химико-технологический университет
Кафедра технологии электрохимических производств,
Кафедра аналитической химии

В настоящей работе исследованы процессы электроосаждения олова, кобальта и их сплавов из оксалатно-сульфатных и фторид-хлоридных электролитов. Поляризационные кривые снимали с помощью потенциостата Р-30J «Элинс». Покрытия осаждали с помощью лабораторного источника тока MPS-3005L-3 Matrix на образцы из стали 08кп и меди. Анализ структуры покрытий проводили методом атомно-силовой микроскопии на приборе Solver 47 Pro. Структуру и состав сплавов изучали с помощью сканирующего электронного микроскопа Tescan Vega 3 SBH. Суммарный коррозионный ток исследуемых двухэлектродных систем определяли по методу Розенфельда. Исследуемые электролиты характеризуются высокой поляризуемостью в рабочем интервале плотностей тока от 0.5 до 3.0 А/дм², которая наряду с высокой поляризацией, способствует образованию мелкокристаллических осадков. Введение в состав электролита оксалата аммония значительно повышает равномерность осаждаемых сплавов олово-кобальт и позволяет получить покрытия с лучшими декоративными и механическими свойствами, чем при использовании традиционно используемых безоксалатных электролитов. Использование растворов оксалата аммония также приводит к увеличению микротвердости и коррозионной устойчивости осаждаемых покрытий за счёт значительного снижения количества пор в структуре электролитического сплава. На основании результатов настоящего исследования разработан электролит для нанесения гальванических покрытий Sn-Co на стальные и медные изделия [1].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Шеханов Р.Ф., Гридчин С.Н., Балмасов А.В., Камышева К.А. Патент РФ № 2694095. Электролит для электроосаждения олово-кобальтовых покрытий. Опубл. 09.07.2019, Бюл. № 19.

УДК 542.6

Капустина Светлана Сергеевна

ЭКОЛОГИЧЕСКИ-БЕЗОПАСНЫЕ НЕЗАМЕРЗАЮЩИЕ СТЕКЛООМЫВАЮЩИЕ ЖИДКОСТИ

Руководитель: Н.В. Веролайн

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра органической и биоорганической химии

С развитием современных технологий у владельцев автомобилей появляется все больше вариантов выбора незамерзающих жидкостей. Однако, проблемы качества, надежности и безопасности использования таких жидкостей все еще остаются нерешенными.

В настоящее время в качестве средств, для очистки стекол используют стеклоомыватели на водно-спиртовой основе (этанол, изопропанол) с добавками поверхностно-активных веществ, антикоррозионных присадок, солубилизаторов и комплексонов, способствующих растворению веществ в водно-спиртовой среде.

Прогрессивным направлением является создание современных не спиртовых экологически-безопасных незамерзающих жидкостей. В качестве незамерзающих компонентов в настоящей работе использовали метиловый эфир пропиленгликоля, а также водный раствор диметилсульфоксида. Эфир пропиленгликоля имеет низкую температуру замерзания (около -95°C), вязкость при 20°C равна 1,85 сСТ (у изопропилового спирта 2,65 сСТ), по токсическим свойствам относится к 3 классу опасности, показатели предельно допустимой концентрации в воздухе 369 мг/м^3 (изопропиловый спирт 10 мг/м^3). Диметилсульфоксид при содержании от 35-50 масс. % достигает рабочий диапазон температур от -20 до -50°C , нетоксичен и биоразлагаем.

В качестве поверхностно-активных веществ в работе были подобраны синергические смеси сульфонол–неонол АФ 9-12 в соответствии с параметром взаимодействия смешанных бинарных систем [1].

Для экспериментальных новых незамерзающих жидкостей определяли температуру замерзания, показатели моющей способности, коррозионное воздействие на облегченную сталь в различных средах, воздействие на резины по известным методикам, приведенным в ГОСТах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Ланге К.Р., Зайченко Л.П. Поверхностно-активные вещества: синтез, свойства, анализ, применение. - СПб.: Профессия, 2005. - 137-141 с.
2. Вережников В.Н., Гермашева И.И., Крысин М.Ю. Коллоидная химия поверхностно-активных веществ. – М.: Лань, 2015. - 299 с

УДК 543.062

Карчевский Артём Валентинович

КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИНДОМЕТАЦИНА В ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВАХ

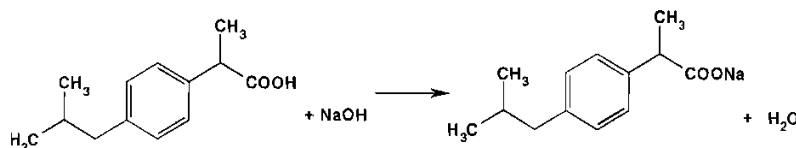
Руководитель: Н.В. Баранова

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

Обеспечение качества лекарственных средств является одной из важнейших и актуальных проблем здравоохранения России. Дозировка активного вещества в выпускаемых формах должна строго соответствовать заявленному количеству в инструкции по применению. Применение фальсифицированной фармацевтической продукции может приводить к осложнениям заболеваний, быть причиной патологических процессов, а также повлечь смерть человека.

В качестве объекта исследования был выбран препарат индометацин различных производителей.

Количественное определение индометацина выполняли алкалометрическим методом. После растворения в предварительно нейтрализованном этаноле титровали 0,1М раствором гидроксидом натрия (индикатор фенолфталеин):



Количество активного вещества в одной таблетке получено из расчета, что на 1 мл 0,1М раствора NaOH приходится 0,03578 г индометацина [1]. Экспериментальное значение составляет 0,025795 г.

В результате проведенного титриметрического анализа разных образцов индометацина можно сделать вывод, что количество активного вещества в одной таблетке соответствует заявленному в инструкции и препарат является подлинным.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Арзамасцев А. П., Дорофеев В. Л. и др. Выявление фальсифицированных лекарственных средств с использованием современных аналитических методов. // Химико-фармацевтический журнал. – 2004. – № 3 – С. 48-51.

УДК 661.1

Ковальчук Ксения Михайловна

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ РАЗЛИЧНЫХ ФАКТОРОВ НА СТАБИЛЬНОСТЬ СУСПЕНЗИИ МЕНТОЛА

Руководитель: Н.В. Веролайн

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра органической и биоорганической химии

В настоящее время суспензии находят широкое применение в различных технологиях производства фармацевтической и косметической продукции. Они составляют основу паст, кремов, а также являются жидкой лекарственной формой приема медикаментов. В связи с неустойчивостью дисперсной системы проводятся исследования по улучшению стабильности суспензий путем внедрения в систему различных стабилизаторов. В качестве стабилизирующих реагентов чаще используют неионогенные поверхностно-активные вещества (НПАВ), низкомолекулярные электролиты и высокомолекулярные соединения.

Известно, что НПАВ обеспечивают стерическую стабилизацию водных дисперсных систем благодаря тому, что полиэксиэтиленовые цепи адсорбированного НПАВ направлены в водный раствор [1].

В качестве модели для исследования в работе был выбран ментол. Для составления синергических смесей использовали сорбитан, твин-80 и синтанол ДС-20. Для всех НПАВ была определена температура помутнения и проведена очистка от полиэтиленгликолей. Стабилизирующее действие коллоидных ПАВ определяется их способностью адсорбироваться на межфазной поверхности, образуя адсорбционные пленки [2]. В связи с этим было исследовано влияние каждого стабилизатора на агрегативную устойчивость суспензии. Для этого в работе была проведена оценка качестваготавливаемой суспензии с помощью исследования таких факторов, как однородность частиц дисперсной фазы, высота отстоявшегося слоя, ресуспендируемость и седиментативная устойчивость. Таким образом, было установлено, что лучшим стабилизирующим действием обладает твин-80.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Холмберг К., Йенссон Б., Кронберг Б., Линдман Б. Поверхностно-активные вещества и полимеры в водных растворах/ Холмберг К.; под ред. Ямпольской Г.П. – М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2015. – 530 с.
2. Сумм Б. Д. Основы коллоидной химии/ Б.Д. Сумм. – М.: Академия, 2007. – 240 с.

УДК 538.9

Косолапов Никита Александрович

АНАЛИЗ МИКРОСТРУКТУРЫ СПЕЧЕННЫХ КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ПОРОШКОВ СПЛАВОВ, СОДЕРЖАЩИХ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫЕ И 3-D ПЕРЕХОДНЫЕ МЕТАЛЛЫ

Руководитель: О.Б. Дегтева

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физики конденсированного состояния

Проведены исследования микроструктуры, доменной структуры и процессов перемагничивания спеченных гетерогенных композиций, сформированных на основе порошков сплавов $Sm(CoCu)_6$ с добавлением железа и меди, и сплавов $Sm_2Co_{17} + Sm(CoCu)_6$ с разными механизмами перемагничивания.

Исходные сплавы синтезировались методом индукционной плавки в атмосфере аргона и в дальнейшем размолоты в центробежно-планетарной мельнице до размеров частиц 1-10 мкм. Порошковые брикеты формировали методом влажного прессования с взаимно перпендикулярными направлениями приложенного давления и ориентирующего магнитного поля 15кЭ. Температуры спекания, отжига и длительность термических обработок подбирались для каждого композита индивидуально исходя из относительного содержания составляющих. Удовлетворительные результаты были получены на образцах, которые спекались в течение 1 часа при температуре 1100°C для композитов $Sm_2Co_{17} + Sm(CoCu)_6$, и температурах 1078°C и 1060°C для композитов $Sm(CoCu)_6$ с добавлением железа и меди.

Образцы на основе порошков сплавов $Sm_2Co_{17} + Sm(CoCu)_6$, содержали 40, 50, 70 весовых % первого компонента.

Исследование микроструктуры образцов и количественный микроанализ их фазового состава проведены на растровом электронном микроскопе JEOL JSM-6610LV в режиме высокого вакуума. Анализ микроструктуры и рентгеновских спектров для образцов $Sm(CoCu)_6$ с добавлением железа и меди, при разных температурах спекания показывают наличие трех фаз: $Fe_{16}Co_{75}Cu_4$, $Sm_2(CoCu)_{15}$ и фазы Sm_2O_3 , обогащенной кислородом. Для образцов $Sm_2Co_{17} + Sm(CoCu)_6$ разного состава также обнаружено наличие трех фаз. Установлено, что после спекания порошковых брикетов композиций $Sm_2Co_{17} + Sm(CoCu)_6$ без дополнительных термообработок достигается высококоэрцитивное состояние с значениями H_C порядка 3-9 кЭ. Проведен анализ взаимосвязи особенностей структурного и фазового состава образцов с значениями коэрцитивной силы.

УДК 530.145

Котомкин Алексей Викторович

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ФТОРАЛЛИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ

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

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра общей физики

Целью данной работы является исследование индуктивного влияния атомов фтора во фтораллильных радикалах.

Равновесная геометрия и распределение электронной плотности фторсодержащих аллильных радикалов (Таблица) были получены в программе GAUSSIAN 03 методом B3LYP/6-311++G(3df,3pd) [1]. Заряды q , энергии E объемы V и спиновые плотности σ «топологических» атомов (Ω) были вычислены в рамках «квантовой теории атомов в молекулах» QTAIM [2] в программе AIMALL [3] и суммированы в параметры функциональных групп $q(R)$, $E(R)$, $V(R)$ и $\sigma(R)$.

Сравнение величин $q(R)$ позволило выделить в исследованных радикалах нуклеофильные и электрофильные фрагменты (Таблица). Анализ распределения $\sigma(R)$ показал делокализацию неспаренного электрона по радикальному центру, а, следовательно, невозможность однозначного отнесения свободной валентности какому-либо атому радикального центра в изученных соединениях.

Таблица. Заряды групп $q(R)$ фтораллильных радикалов, в а.е.

	CH ₂	CHF	CF ₂	CH	CF	CF ₂	CHF	CH ₂
CHF≈CH≈CH ₂		-0,083		0,075				0,008
CH ₂ ≈CF≈CH ₂	0,084				-0,167			0,084
CF ₂ ≈CH≈CH ₂			-0,182	0,143				0,040
CFH≈CF≈CH ₂		0,009			-0,127			0,118
CFH≈CH≈CHF		-0,042		0,109			-0,067	
CFH≈CF≈CFH		0,019			-0,038		0,019	
CHF≈CH≈CF ₂		-0,030		0,190		-0,159		
CH ₂ ≈CF≈CF ₂	0,124				-0,045	-0,078		
CF ₂ ≈CH≈CF ₂			-0,122	0,244		-0,122		
CFH≈CF≈CF ₂		0,048			0,023	-0,070		
CF ₂ ≈CF≈CF ₂			-0,035		0,069	-0,035		

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 03 (Revision E 0.1 SMP). Gaussian Inc., Pittsburgh PA, 2007.
2. Бейдер Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория. М.: Мир, 2001. 532 с.
3. AIMAll (Version 11.09.18, Professional), Todd A. Keith, 2010 (<http://aim.tkgristmill.com>).

УДК 541.6

Крылов Анатолий Анатольевич

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ pH СРЕДЫ НА ГЕОМЕТРИЮ ПЛЕНКИ ПОЛИ- α -НАФТИЛАМИНА

Руководитель: В.Г. Алексеев

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

Поли- α -нафтиламин (ПНА) - новый полимерный полупроводник, аналогичный по структуре хорошо известному полианилину (ПАНи). Ранее нами было показано, что пленка ПАНи может изменять свои геометрические размеры в результате изменения степени окисленности хинондииминных фрагментов структуры под действием электрического тока, что может быть объяснено изменением конформации макромолекул ПАНи. В настоящей работе исследованы pH сенсорные свойства пленок ПНА.

ПНА был синтезирован методом циклической вольтамперометрии (ЦВА) на платиновой подложке, покрытой тонкой пленкой ПАНи для активации поверхности платины. Синтез ПНА был осуществлен из 0,5М этанольного раствора α -нафтиламина, содержащего 2М H_2SO_4 . Диапазон потенциала составлял от -200 до +700 мВ, скорость сканирования потенциала - 50 мВ/с. В случае использования более высокого значения потенциала происходит окисления α -нафтиламина до нафтохинона. В процессе синтеза отчетливо видно растущие анодный и катодный пик.

Для исследования влияния электрического тока на геометрию пленки ПНА её помещали в водные растворы H_2SO_4 в качестве рабочего электрода. Значение pH среды определяли с помощью иономера с комбинированным электродом в диапазоне от 1 до 3,5 (рис. 1). Наблюдение за поведением пленки осуществляли при помощи микроскопа с измерительной шкалой, совмещенного с веб камерой.

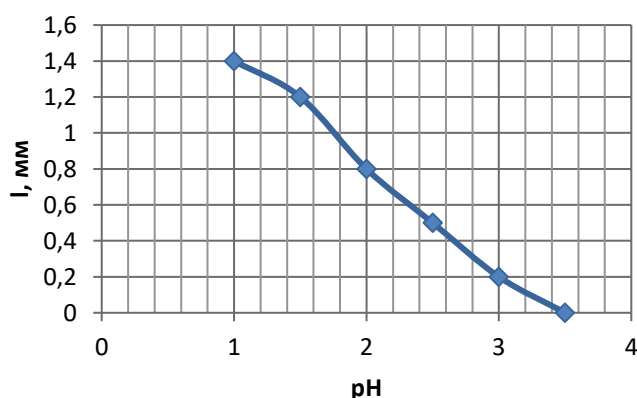


Рис. 1 Зависимость отклонения пленки ПНА от pH

Было установлено, что изменение потенциала пленки приводит к изгибанию и распрямлению пленки ПНА. Более высокие значения pH не давали результатов.

УДК 544.169:544.132

Крылова Мария Евгеньевна

ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНОСТЬ ГРУПП И ИНДУКТИВНЫЙ ЭФФЕКТ В МЕТИЛОКТИЛКЕТОНЕ И ЕГО СЕРОСОДЕРЖАЩИХ АНАЛОГАХ

Руководитель: Н.П. Русакова

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Квантовохимические вычисления интегральных характеристик распределения электронной плотности позволяют оценить индуктивный эффект (*I*-эффект) в соединении, а также собрать для молекулы качественную шкалу групповых электроотрицательностей ($\chi(R)$), основываясь на соотношении их зарядов. Целью работы стало определение электронных свойств групп (зарядов $q(R)$ и объемов $V(R)$) в метилоктилкетоне ($\text{H}_3\text{C}-\text{C}(\text{O})-\text{C}_8\text{H}_{17}$), метилоктилтиокетоне ($\text{H}_3\text{C}-\text{C}(\text{S})-\text{C}_8\text{H}_{17}$), метилоктилсульфоксиде ($\text{H}_3\text{C}-\text{S}(\text{O})-\text{C}_8\text{H}_{17}$) и построение для них общей качественной шкалы $\chi(R)$. Оптимизация молекул $\text{H}_3\text{C}-\text{C}(\text{O})-\text{C}_8\text{H}_{17}$, $\text{H}_3\text{C}-\text{C}(\text{S})-\text{C}_8\text{H}_{17}$, $\text{H}_3\text{C}-\text{S}(\text{O})-\text{C}_8\text{H}_{17}$ проведена методом B3LYP 6-311++G(3df,3pd) в программе GAUSSIAN 03. Заряды и объемы атомов вычислены в рамках квантовой теории атомов в молекулах с использованием пакета AIMALL и затем суммированы в параметры групп $q(R)$ и $V(R)$.

Таблица: Групповые заряды ($q(R)$) и объемы ($V(R)$) $\text{C}_8\text{H}_{17}-R-\text{CH}_3$, где $R=\text{C}(\text{O}), \text{C}(\text{S}), \text{S}(\text{O})$

<i>R</i>	CH ₃	CH ₂	CH ₂	CH ₂	CH ₂	CH ₂	CH ₂	CH ₂	<i>R</i>	CH ₃
$q(R)$, в а.е.										
CO	-0,014	0,014	0,001	-0,002	0,007	-0,005	0,060	0,014	-0,134	0,054
CS	-0,014	0,015	0,003	-0,001	0,009	-0,004	0,051	0,053	-0,200	0,089
SO	-0,013	0,015	0,001	0,001	0,011	0,008	0,061	-0,065	-0,008	-0,015
$V(R)$, в Å ³										
CO	33,12	23,67	23,51	23,51	23,46	23,60	22,79	23,44	26,96	32,51
CS	33,11	23,66	23,49	23,51	23,42	23,50	22,82	23,00	45,58	32,10
SO	33,10	23,66	23,50	23,51	23,41	23,49	22,87	23,43	39,15	32,44

Анализ зарядов групп CH₃, CH₂, C(O), C(S) и S(O) в $\text{H}_3\text{C}-R-\text{C}_8\text{H}_{17}$, где $R = \text{C}(\text{O}), \text{C}(\text{S})$ и $\text{S}(\text{O})$, (табл.) позволил описать группы CH₃, C(O), C(S) и S(O), как проявляющие *I*-эффект и стягивающие на себя электронную плотность ($\rho(r)$) с ближайших CH₂. Индуктивный эффект CH₃, C(O), C(S) и S(O) проявляется в изменении $q(R)$ и $V(R)$ ближайших четырех групп CH₂ по сравнению с невозмущенными CH₂ (табл.). Сопоставление $q(R)$ (табл.) позволило получить индивидуальные качественные шкалы $\chi(R)$ для рассматриваемых соединений и провести сборку общей шкалы $\chi(R)$:

$$\chi(\text{CH}_2) < \chi(\text{S}(\text{O})) < \chi(\text{CH}_3) < \chi(\text{C}(\text{O})) < \chi(\text{C}(\text{S})).$$

УДК 543.421/.424

Крюков Тимофей Владимирович

ИССЛЕДОВАНИЕ ТВЕРДЫХ КОМПЛЕКСОВ ЦЕРИЯ И ПРАЗЕОДИМА С ЦЕФАЗОЛИНОМ МЕТОДОМ ИК- СПЕКТРОСКОПИИ

Руководитель: М.А. Феофанова

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

Взаимодействием водных растворов хлорида церия и празеодима и натриевой соли цефазолина (NaCzl) были получены и выделены в твердом виде комплексы цефазолина. Полученные соединения исследованы методом ИК-спектроскопии.

Цефазолин – антибиотик цефалоспориновой группы относящийся к первому поколению, так же он является антибиотиком кислотного типа и содержит одну карбоксильную группу [1]. В медицине используется в виде натриевой соли NaCzl [2].

Для проведения эксперимента использовали натриевые соли цефазолина (NaCzl) производства компании «Деко» г. Москва. Комплексы были получены в виде осадков в результате взаимодействия в нейтральном водном растворе хлоридов церия и празеодима и натриевой соли цефазолина в мольном соотношении 1:3, затем были высушены на воздухе при комнатной температуре.

Таблица 1: Данные ИК-спектроскопии

Образец	Отнесение колебаний	
	$\nu(\text{C}=\text{O})$ β -лактам	$\nu(\text{C}=\text{O})$ Амид
NaCzl	1762	1668
CeCzl	1759	1697
PrCzl	1760	1680

Исследование полученных образцов методом ИК-спектроскопии показало, что в процессе получения комплексов химическая структура антибиотиков не претерпела изменений, так как ИК-спектры комплексов и соответствующей натриевой соли схожи между собой. При этом отмечается смещение полос поглощения валентных колебаний $\text{-C}=\text{O}$ бета-лактамной и амидной $\text{-C}=\text{O}$, что можно расценивать как координацию этих групп с трехвалентными ионами этих металлов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Алексеев В.Г. // Хим.-фарм. журн. 2010. Т.44, № 1. С. 16–26.
2. Машковский М.Д. Лекарственные средства. 16-е изд., перераб., испр. и доп. М.: Новая волна, 2012. 1216 с.

УДК 543.422.3-74+544.18

Кузнецова Анна Александровна

КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ИК СПЕКТРА ЦЕФУРОКСИМА

Руководитель: В.Г. Алексеев

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

Цефуроксим – цефалоспориновый антибиотик второго поколения, в медицине применяется в виде натриевой соли (NaCfur). В экспериментальном спектре NaCfur проявляются четыре близко расположенные интенсивные полосы поглощения валентных колебаний $\nu(\text{C}=\text{O})$ в составе амидной, бета-лактамной, карбаматной и карбоксилатной групп, однако литературных данных об отнесении полос найти не удалось.

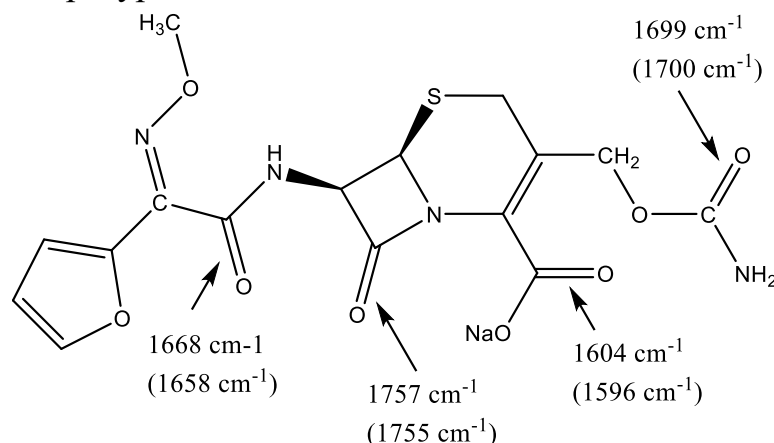


Рис. 1. Структурная формула цефуроксима с указанием экспериментальных значений волновых чисел полос поглощения. Теоретически рассчитанные значения указаны в скобках.

Отнесение полос поглощения проведено на основе результатов расчёта ИК спектра NaCfur методом DFT/BLYP/6-31G*+ в программе Spartan (Wavefunction, Inc). Выбор методики проведён на основе расчёта ИК спектров ацетат-аниона, 2-пирролидона, N-метилацетамида и метилкарбамата, которые можно рассматривать как структурные фрагменты молекулы цефуроксима. Сравнительные расчёты, выполненные методом DFT/6-31G*+ с использованием функционалов BP, BLYP, B3LYP, EDF1, EDF2, M06 и ω B97x-D, показали, что выбор функционала оказывает существенное влияние на результаты. Наименьшее смещение теоретически рассчитанных значений волновых чисел относительно экспериментальных обеспечивает использование функционала BLYP. Экспериментальный ИК спектр NaCfur записан на приборе Bruker Equinox 55 для образца в виде таблетки с KBr.

УДК 66.094.3.098

Кузнецова Любовь Сергеевна

ИЗУЧЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ БИЭНЗИМНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ ГЛЮКООКСИДАЗЫ И ПЕРОКСИДАЗЫ

Руководитель: Н.В. Лакина

Тверской государственной технической университет, г. Тверь,
Кафедра Биотехнологии, химии и стандартизации

Обзор зарубежных источников показал, что для повышения эффективности работы различных биосенсоров и электродов топливных элементов наиболее часто применяют иммобилизованные биэнзимы. Биэнзимы представляют собой окислительно-восстановительные ферменты на основе глюкозооксидазы (GOx) и пероксидазы хрена (HRP).

В настоящей работе представлено исследование каталитической активности биэнзимных катализаторов, на основе полимерных матриц: поливинилпирролидона (ПВП), ацетилцеллюлозы (АЦТ), полиакрилонитрила (ПАН).

Полученные данные представлены на рисунке 1.

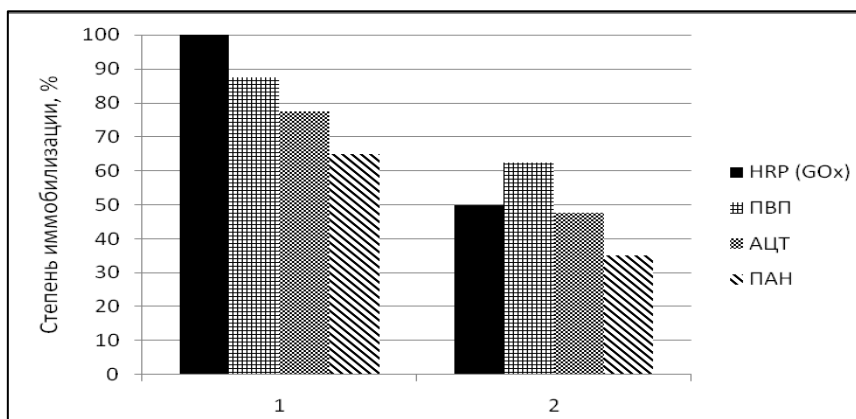


Рисунок 1 - Зависимость количества иммобилизованного фермента от вида полимерной матрицы, где: 1) HRP; 2) GOx

Наибольшая степень иммобилизации ферментов наблюдалась у биэнзимной каталитической системы на основе поливинилпирролидона. Для дальнейшего исследования были проведены электрохимические эксперименты.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №19-08-00186.

УДК 547.821.3

Кузьмина Виктория Александровна

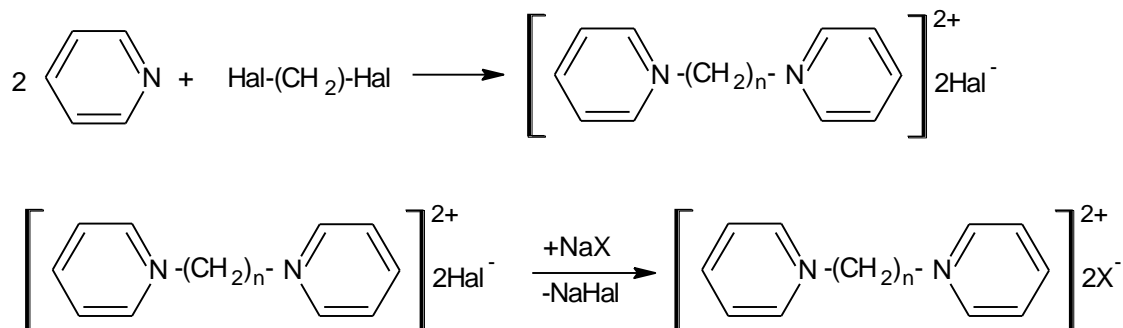
СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ БИС-ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ ПИРИДИНИЯ

Руководитель: О.Е. Журавлев

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра органической химии

Ионные жидкости (ИЖ) – это низкотемпературные расплавы органических солей с температурой плавления ниже комнатной, которые состоят из органических катионов и неорганических или органических анионов.

В данной работе в качестве объектов исследования были синтезированы бис-четвертичные соли пиридиния с различной длиной алкильной цепи (схема), и на их основе были получены ионные жидкости с анионами (BF_4^- , PF_6^- , $\text{N}(\text{CN})_2^-$). Исходные бис-четвертичные соли пиридиния были получены в ходе реакций кватернизации пиридина дигалогенпроизводными. Ионные жидкости получали по реакции метатезиса из бис-четвертичных солей пиридиния и соответствующих неорганических реагентов в водном растворе при постоянном перемешивании (схема):



где $n=2-4$; Hal: Cl, Br; X^- : BF_4^- , PF_6^- , $\text{N}(\text{CN})_2^-$.

Полученные соединения представляют собой твердые вещества белого или желтого цвета. Для всех соединений определены основные физико-химические константы. Состав и структура полученных ионных жидкостей были подтверждены данными ИК-спектроскопии. Важнейшим вопросом химии ионных жидкостей является их состояние в растворах. ИЖ могут полностью или частично диссоциировать на ионы. Для изучения поведения ИЖ нами проведено кондуктометрическое исследование растворов ИЖ. В качестве растворителя был выбран ацетонитрил. Для всех ионных жидкостей были получены зависимости эквивалентной электропроводности от концентрации в диапазоне $10^{-2}-10^{-4}$ моль/л.

УДК 57.084.2

Кулагин Андрей Михайлович

РЕГИСТРАЦИЯ ПРОЛЁТА РУКОКРЫЛЫХ С ПОМОЩЬЮ ЛАЗЕРНЫХ СЕТЕЙ

Руководитель: Ю.А. Малышкин

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

Роение (swarming) является важным этапом в жизни рукокрылых и связано с выбором мест гибернации и размножения. В связи с малой изученностью данной группы млекопитающих, этот период их жизни представляет большой интерес для изучения. Классическим методом изучения является преграждение паутиными сетями входов в места зимовок, с целью отлова(1)(2). Эти методы достаточно неэффективны так как рукокрылые могут видеть сеть, и это является вмешательством в естественные пути перемещения. Все это может вносить искажение в результаты исследований.

В виду выше перечисленных недостатков возникла необходимость в создании бесконтактного метода регистрации пролёта рукокрылых.

В результате анализа проблемы было решено использовать две лазерные сетки, изготовленные под размер входа в убежище (пещеру) 900 x 600мм с ячейкой 40 x 40мм, исходя из размеров рукокрылых, зимующих в Тверской области, и особенностей динамики полёта. Скорость опроса сетей должна составлять не менее 50мс, из учёта максимальной скорости полёта рукокрылых, при расстоянии между сетями 1м. Блок управления сетями реализован на CPLD Altera MAX II и снабжен часами реального времени для регистрации времени пролёта. Информация о пролёте через сеть записывается на внешнюю EEPROM подключенного по интерфейсу I²C. Направление полёта определяется по последовательности срабатывания сетей, а защита от случайного срабатывания, при пролёте насекомых, реализована алгоритмически.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Dispersion and habitat use by *Myotis daubentonii* and *Myotis nattereri* during the swarming season: implications for conservation // *Animal Conservation*(2003) 6, 283–290.
2. Bat swarming in the eastern Palaearctic (Eastern Siberia) // *Acta Chiropterologica*, 20(2): 427–438, 2018

УДК 577.127.4

Куракин Георгий Фёдорович

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СВЯЗЫВАНИЯ ФЛАВОНОИДОВ И ИЗОВАЛЬТРАТА С АДЕНОЗИНОВЫМИ РЕЦЕПТОРАМИ

Руководители: Н.П. Лопина, Г.Е. Бордина

Тверской государственной медицинской университет, г. Тверь
Кафедра химии

Аденозиновые рецепторы – это перспективные фармакологические мишени. Большинство действующих на них лекарств разрабатывается на основе ксантинового скаффолда. Флавоноиды и изовальтрат также могут выступать антагонистами аденозиновых рецепторов. Однако, структурных моделей их связывания нет. Целью нашей работы стало построение таких моделей методами биоинформатики. Использовался метод гибкого докинга.

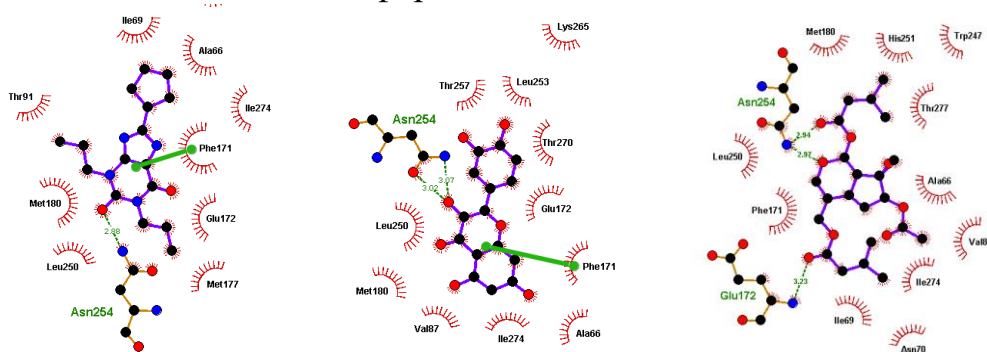


Рисунок. Связывание DPCPX (слева), кверцетина (в середине) и изовальтрата (справа) с рецептором A₁. Источник: [1].

В полученных моделях флавоноиды образовывали взаимодействия, аналогичные таковым у ксантиновых антагонистов. Изовальтрат связывался аналогичным образом, несмотря на неароматичность ядра молекулы.

Полученные модели могут быть использованы в дизайне новых лекарственных средств. Работа полностью изложена в статьях [1, 2, 3].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Куракин Г. Ф. Аденозиновые рецепторы: история великого обмана // Природа. – 2020. – №1. – С. 3-15.
2. Куракин Г. Ф., Лопина Н. П., Бордина Г. Е. Компьютерное моделирование взаимодействия флавоноидов с аденозиновыми рецепторами // Вопр. биол., мед. и фарм. химии. – 2019. – Т. 22. – №. 1. – С. 42-47.
3. Куракин Г. Ф., Лопина Н. П., Бордина Г. Е. Компьютерное моделирование взаимодействия изовальтрата с аденозиновым рецептором A₁ // Вопр. биол., мед. и фарм. химии. – 2019. – Т. 22. – №. 9. – С. 16-23.

УДК 544.144

Куручкин Георгий Александрович

СРАВНЕНИЕ ГРУППОВЫХ ЗАРЯДОВ БЕНЗОЛА И ЕГО СЕРОСОДЕРЖАЩИХ АНАЛОГОВ

Руководители: Н. П. Русакова, Ю.Д. Орлов

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии, кафедра общей физики

Геометрия молекул бензола (C_6H_6) и его моно- (C_5SH_6), ди- ($C_4S_2H_6$) и трисеросодержащих ($C_3S_3H_6$) (рис.) оптимизирована методом ВЗЛУР программой Gaussian03. Заряды на атомах получены в рамках квантовой теории атомов в молекулах численным интегрированием с помощью пакета AIMALL, суммированы в заряды групп - $q(R)$ и сведены в таблицу.

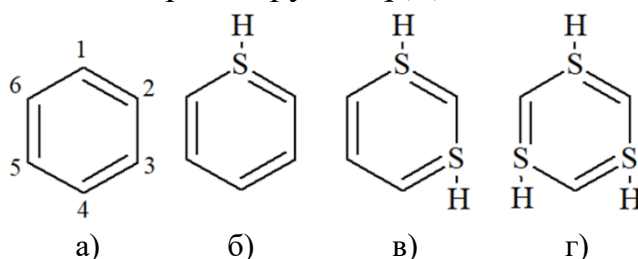


Рисунок: Исследуемые молекулы: а) C_6H_6 , б) C_5SH_6 , в) $C_4S_2H_6$, г) $C_3S_3H_6$

Заряды групп СН в бензоле равны нулю (табл.), хотя атомные параметры углерода и водорода различны ($q(C) = 0,004$ а.е. и $q(H) = -0,004$ а.е.). Присутствие серы в цикле приводит к перераспределению электронной плотности ($\rho(r)$) и соответственно изменению $q(SH)$ ароматических колец. В изучаемых структурах сера выступает донором $\rho(r)$ для соседних атомов углерода и С, находящихся в *para*-положении. Это сказывается на зарядах соответствующих групп СН (табл.). Наличие более одного атома S приводит к увеличению оттока $\rho(r)$ с S в бассейны СН, что приводит к повышению $q(SH)$ в $C_4S_2H_6$ на 0,037 а.е. по сравнению с $q(SH)$ в C_5SH_6 , а в $C_3S_3H_6$ это изменение достигает 0,101 а.е. по отношению к $q(SH)$ в C_5SH_6 .

Таблица: Сравнение зарядов групп $q(R)$ бензола и его серосодержащих аналогов

группа	C_6H_6	C_5SH_6	$C_4S_2H_6$	$C_3S_3H_6$
		SH	SH	SH
1 СН	0,000	0,355	0,392	0,456
2 СН	0,000	-0,187	-0,364	-0,444
3 СН	0,000	0,032	0,392	0,401
4 СН	0,000	-0,044	-0,234	-0,369
5 СН	0,000	0,032	0,047	0,401
6 СН	0,000	-0,187	-0,234	-0,445

Кучурова Алена Константиновна

ОБРАЗОВАНИЕ ГИДРОГЕЛЕЙ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ ПГМГ-ГХ, L-ЦИСТЕИНА И АЦЕТАТА СЕРЕБРА

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

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Полигексаметиленгуандин гидрохлорид (ПГМГ-ГХ) является катионным полиэлектролитом, который обладает уникальным сочетанием физико-химических и биоцидных свойств. Благодаря этим свойствам исследуемые гидрогели на основе ПГМГ-ГХ могут обладать широким спектром свойств: антибактериальными, противогрибковыми, цитостатическими. Целью работы является изучение механизма в цистеин-серебряном растворе при добавлении ПГМГ-ГХ. Процессы самоорганизации в системах исследованы с помощью методов УФ и ИК спектроскопии, рН-метрии, сканирующей электронной микроскопии.

Авторами работы было обнаружено, что в ЦСР происходит формирование супрамолекулярных цепочек, о чем свидетельствует появление через некоторое время в электронном спектре образца полос поглощения с максимумами 314 и 394 нм, происходит образование цистеин-серебряного раствора (ЦСР) [1]. При добавлении ПГМГ-ГХ также образуются супрамолекулярные гидрогели, о чем свидетельствуют аналогичные изменения в электронных спектрах растворов. Так, при добавлении ПГМГ-ГХ в ЦСР исчезают обе полосы поглощения с максимумами 314 нм и 394 нм и появляется новая полоса поглощения с максимумом 354 нм. Так, УФ полосы поглощения 314 и 394 нм отвечают за формирование супрамолекулярных цепочек (--Ag-S(Cys)--Ag-S(Cys)--)_n и пространственной гель-сетки, а полоса 354 нм, возможно, за образование фрагментов супрамолекулярных цепей комплексов с ПГМГ-ГХ. Уставлено, что гидрогели имеют антибактериальные свойства.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. А.Н. Адамян, Д.В. Аверкин, С.Д. Хижняк, М.М. Овчинников, П.М. Пахомов, Вестник Тверского государственного университета. Серия: Химия. 2016. 89 с.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-33-00146 мол_а) на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.

УДК 628.473.45

Лебедева Ирина Евгеньевна

БИОКОНВЕРСИЯ ЛИГНОЦЕЛЛЮЛОЗНОГО СЫРЬЯ

Руководитель: Е.В. Ожимкова

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

Биоконверсия или биотрансформация - процесс, в котором органические материалы трансформируются из одной формы в другую, чему способствуют микроорганизмы, такие как бактерии и грибы. Одним из способов биоконверсии является компостирование.

Компостирование - это контролируемое аэробное биологическое разложение органического вещества в стабильный гумусоподобный продукт, называемый компостом [1].

В процессе компостирования обычно выделяют четыре фазы: латентная фаза, фаза роста, термофильная фаза и фаза созревания. Наиболее важными параметрами для компостирования являются: влажность (рекомендуемые значения 50-65 %), соотношение С / N (25-35), концентрация кислорода, уровень pH (6.5-8.0), температура [1]. Наиболее часто используемое сырье для компостирования - пищевые отходы, листья, солома и т.д.

Полученные компосты представляют собой полезную органическую добавку и / или органический субстрат. Компосты могут быть использованы для повышения уровня питательных и органических веществ в почвах, и, следовательно, урожайности растений, а также для подавления болезней, вызванных почвенными патогенами [2].

В работе исследован процесс компостирования лигноцеллюлозных отходов переработки льна – важной культуры сельскохозяйственного значения для Тверской области. В качестве растительного сырья для получения компостов использовали костру и коробочки льна. Для интенсификации процесса биоконверсии на лигноцеллюлозное сырье предварительно воздействовали низкочастотным ультразвуком, в контрольных опытах использовали сырье без ультразвуковой обработки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Speight, J. Biological transformations / J. Speight // Elsevier. - 2018. - № 2. – С. 269-306.
2. Onwosi, C. Composting technology in waste stabilization: on the methods, challenges and future prospects / C. Onwosi, V. Igbokwe // Elsevier. - 2017. - № 3. – С. 140-157.

УДК 547.854.4

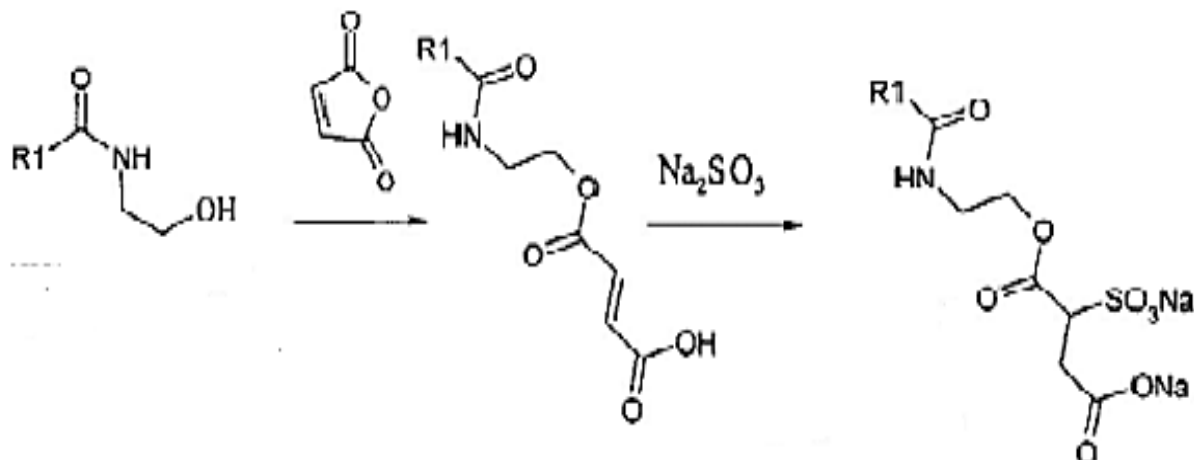
Левицкая Юлия Валерьевна

СИНТЕЗ АЛКИЛСУЛЬФОСУКЦИНАТОВ НА ОСНОВЕ МАЛЕИНОВОГО АНГИДРИДА

Руководитель: С.А. Темникова

Тверской государственный университет г.Тверь
Кафедра органической химии

Алкилсульфосукцинаты – класс анионных поверхностно-активных веществ (АПАВ), являются хорошими смачивателями, пенообразователями, пеногасителями, эмульгаторами и деэмульгаторами, которые применяются в текстильной, металлообрабатывающей, нефтяной промышленности; для изготовления различных косметических и моющих средств, производства лакокрасочных материалов и латекса. В настоящей работе были синтезированы и исследованы алкилсульфосукцинаты с общей формулой: $RCONHCH_2CH_2OCOC(H)(SO_3Na)CH_2COONa$, где $R = C_{11}H_{23}, C_{13}H_{27}, C_{17}H_{35}$, на основе малеинового ангидрида и моноэтаноламидов жирных кислот, полученных взаимодействием высших жирных кислот с моноэтаноламином. Общая схема реакции:



Достоинствами полученных соединений являются: доступность исходных веществ, высокие выходы продукта, нетоксичность, биоразлагаемость, большое разнообразие сфер применения. Строение синтезированных соединений подтверждено данными ИК-спектроскопии. Исследованы коллоидно-химические свойства водных растворов полученных веществ.

УДК 541.64:546.57

Левчукова Валентина Александровна

УСИЛЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ L-ЦИСТЕИН/AgNO₃/ПВС СУПРАМОЛЕКУЛЯРНОЙ СИСТЕМЫ

Руководитель: Д.В. Вишневецкий

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Гели на основе L-цистеина, нитрата серебра и поливинилового спирта (ММ = 50 и 100 кДа, степень гидролиза более 99%) были получены следующим способом. На первой стадии, готовился цистеин-серебряный водный раствор (ЦСР) [1]. Далее, к созревшему в течение 24 ч. ЦСР добавлялся ПВС разных концентраций (0.002, 0.01, 0.02, 0.1, 0.25, 0.5, 0.75, 1, 1.25, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 4.0 % масс. в конечной смеси). К полученной смеси добавлялся сульфат натрия (0.0001 % масс. в конечной смеси) в качестве инициатора гелеобразования. Часть гелей была высушена при 25 °С с получением тонких пленок. Другая была заморожена при -18 °С, после 24 ч. разморожена. Полученные водно-гелевые массы были отцентрифугированы (6 тыс. об/мин, 30 мин.), вода декантирована. Полученные криогели нанесены на подложку и высушены при 25 °С. В итоге получены пленки.

Методом УФ и ДСР анализа установлено, что вода, декантированная после стадии центрифугирования, не содержит L-цистеин/AgNO₃ супрамолекулярной системы. Методом УФ и ИК-спектроскопии показано, что L-цистеин/AgNO₃ супрамолекулярная система сохраняет свою нативную структуру в полученных пленках. Методом СЭМ исследована морфология пленок. Показано, что на образование макропористых структур и размеры пор оказывает влияние концентрация и молекулярная масса ПВС, что также независимо подтверждается данными ИК-спектроскопии. Методом элементного анализа установлено, что содержание серебра и серы в объеме пленок отличается от их содержания на поверхности, что подтверждает стабильность супрамолекулярной системы в матрице ПВС.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ, Совета по грантам Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых (СП-80.2019.4) на оборудовании ЦКП ТвГУ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Khizhnyak S.D., Komarov P.V., Ovchinnikov M.M., Zherenkova L.V., Pakhomov P.M. Mechanism of gelation in low-concentration aqueous solutions of silver nitrate with L-cysteine and its derivatives // Soft Matter. - 2017. - V.30. - №13. - P.5168-5184.

УДК 577.1:543.422.27

Лимонова Наталья Николаевна

ФОРМИРОВАНИЕ НАНОАГРЕГАТОВ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ГЛИЦИНА, НИТРАТА СЕРЕБРА И ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА

Руководители: К.А. Шухина, С.Д. Хижняк

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Самосборка биомолекул как механизм создания новых супрамолекулярных ансамблей вызывает повышенный интерес, поскольку возникающие при этом структурные ансамбли, могут найти разнообразное применение. Известно*, что аминокислоты проявляют способность к самосборке с образованием ассоциатов за счет слабых нековалентных взаимодействий – водородной связи, взаимодействий Ван-дер-Ваальса, электростатического взаимодействия. Цель данной работы – изучение процессов самоорганизации в водных растворах аминокислоты глицин (Gly), нитрата серебра (AgNO_3) и поливинилового спирта (ПВС).

Объектами исследования были модельные системы с различным содержанием исходных компонентов, приготовленные из водных растворов Gly (0,01 М), AgNO_3 (0,01 М) и ПВС (1 %). Процесс образования наноагрегатов в образцах с переменным составом изучали с помощью метода динамического светорассеяния (ДСР) на приборе “Zetasizer NanoZS” в конфигурации обратного рассеяния при различных температурах.

Результаты, полученные методом ДСР, для различных водных растворов: Gly, Gly- AgNO_3 , Gly-ПВС, Gly- AgNO_3 -ПВС – свидетельствуют о формировании ассоциатов, размеры которых зависят от композиционного состава образцов и концентрации компонентов. Установлено, что добавление в исследуемую систему (Gly, Gly- AgNO_3) раствора полимера приводит к заметному уменьшению размеров агрегатов и к увеличению их стабильности во времени. Таким образом, изучение модельных систем на основе простейших аминокислот, солей металлов и полимеров методом ДСР позволит интерпретировать иерархию процессов самосборки.

* Perween S, Chandanshive B, Kotamarthi HC, Khushalani D. Single amino acid based self-assembled structure // Soft Matter, 2013 9:10141–10145. doi:[10.1039/C3SM51054A](https://doi.org/10.1039/C3SM51054A).

Работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии ЦКП ТвГУ.

УДК 678.842

Литвинов Михаил Юрьевич

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ПОЛИФЕНИЛСИЛСЕСКВИОКСАН- ПОЛИДИОРГАНОСИЛОКСАНОВЫХ БЛОК-СОПОЛИМЕРОВ

Руководитель: И.И. Осовская

Санкт-Петербургский государственный университет
промышленных технологий и дизайна
Высшая школа технологии и энергетики, г. Санкт-Петербург

Одним из перспективных направлений получения термостойких композиционных материалов является синтез блок-сополимеров с микрогетерофазной структурой, содержащих жесткие фенилсилсесквиоксанные и гибкие диорганосилоксанные блоки. Синтез и исследование структуры таких полимеров встречается со значительными трудностями, связанными с воспроизводимостью, фазовой совместимостью компонентов и взаимодействием между фазами.

Исходя из вышесказанного была проведена работа по исследованию особенностей формирования структуры полифенилсилсесквиоксан-полидиорганосилоксановых (ПФССО-ПДОС) блок-сополимеров.

Образцы блок-сополимера получали гидролитической соконденсацией фенилтрихлорсилана и α,ω -дихлоролигодиметилсилоксана при соотношении реагентов 24,5-49:1 [1].

Молекулярную структуру полученных образцов определяли методом двух-детекторной ГПХ на хроматографе марки «Waters», оснащенный двумя детекторами: рефрактометрическим (Waters 2414) и УФ детектором (Waters 2487).

Анализ экспериментальных данных кривых ММР показывает преимущественную мультимодальность хроматографического распределения, что более отчетливо видно по мере увеличения содержания фенилтрихлорсилана в исходной смеси. Не исключено, что причиной подобного характера ММР служит полидисперсность макромолекул блок-сополимера по молекулярной массе и по составу.

Согласно полученным данным, изучается влияние условий синтеза на молекулярную структуру и морфологию ПФССО-ПДОС блок-сополимеров.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Способ получения полифенилсилсесквиоксанполидиорганосилоксановых блоксополимеров: пат. 2142478 Рос. Федерация: МПК C08G 77/06.

УДК 543.241.5

Лобзова Валентина Александровна

КИСЛОТНОЕ ТИТРОВАНИЕ, КАК МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ КАЗЕИНА В МОЛОКЕ

Руководители: Н.В. Баранова

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра аналитической химии

Анализ проводился по следующей методике: В коническую колбу вносили 80 мл дистиллированной воды, 20 мл исследуемого молока и по каплям, до выпадения казеина крупными хлопьями, раствор 0,05 н. раствора серной кислоты. После осаждения, раствор пропускали через обеззолинный фильтр для удаления хлопьев казеина. В полученный раствор добавляли несколько капель 1% раствора фенолфталеина с последующим титрование 0,1 н. гидроксидом натрия до появления розового окрашивания. По данной формуле производится пересчет пошедшего на титрование раствора на все молоко [1]:

$$X_1 = \frac{v(100 + v_1)}{100}$$

где v_1 – количество H_2SO_4 , пошедшего для выделения казеина; v – количество $NaOH$, пошедшего на титрование.

Параллельно во вторую колбу также приливали 80 мл воды, 20 мл исследуемого молока и тот же объем 0,05 н. раствора серной кислоты, что и в первую колбу. Без пропускания через фильтр, добавляли раствор 1% фенолфталеина и также проводили титрование. Содержание казеина в молоке проводили по следующей формуле [1]:

$$X = \frac{(X_2 - X_1) \cdot 0,1131 \cdot 100}{20} = (X_2 - X_1) \cdot 0,5655\%$$

В качестве исследуемых образцов бралось несколько торговых марок молока различного производителя: «Домик в деревне», «Простоквашино», «Тема» и «Агуша».

Таблица.: Результаты кислотного титрования

Производитель	Содержание казеина от общей массы, %
Простоквашино	2,84
Домик в деревне	3,45
Агуша	3,22
Тема	2,87

Исходя из полученных данных, все исследуемые образцы содержат необходимое количество казеина.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Горбатов К.К. Химия и физика молока и молочных продуктов. СПб.: ГИОРД. 2012.

УДК 621.7.08

Луцай Александр Валерьевич

**ПОВЫШЕНИЕ ТОЧНОСТИ МЕХАНИЧЕСКИХ ПЕРЕМЕЩЕНИЙ
НА СТАНКАХ С ЧИСЛОВЫМ ПРОГРАММНЫМ УПРАВЛЕНИЕМ
ПРИ ПОМОЩИ ОБРАТНОЙ СВЯЗИ С ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ
КАМЕРОЙ-МИКРОСКОПОМ И ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
АЛГОРИТМОВ КОМПЬЮТЕРНОГО ЗРЕНИЯ
И МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ**

Руководитель: Репин А. А.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

Многие станки для обработки материалов с числовым программным управлением могут работать намного эффективнее благодаря использованию современных математических моделей физических процессов [1].

В продаже существуют недорогие высокоскоростные камеры-микроскопы с частотой 200 кадров в секунду и выше. При использовании современных алгоритмов обработки изображений [2] можно следить за перемещениями станка по разным осям в реальном времени.

Для данного проекта была разработана и создана печатная плата на основе микроконтроллера STM32 и драйвера шаговых двигателей L6470. Плата подключается к ПК по интерфейсу USB. Для ПК было разработано ПО, анализирующее изображение, получаемое с камеры-микроскопа, при помощи алгоритмов компьютерного зрения, данные получаемые с платы-контроллера, а так же данные, вычисляемые при помощи адаптивной математической модели. В итоге удалось добиться задержки между вычислениями и выполнением команды меньше чем 1 мс. Такая обратная связь позволяет значительно повысить скорость обработки, эффективность и точность.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Sato R. Mathematical Model of a CNC Rotary Table Driven by a Worm Gear // International Journal of Intelligent Mechatronics and Robotics. Kobe Japan: IGI Global, 2012. pp: 27-40.
2. Szeliski, R., 2010. Computer Vision: Algorithms and Applications (Texts in Computer Science) 2011th Edition. New York: Springer London Dordrecht Heidelberg, pp: 87-180.

УДК 54.057

Макарова Наталья Александровна

МАГНИТНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ, КАК ЭФФЕКТИВНЫЙ НОСИТЕЛЬ ДЛЯ ИММОБИЛИЗАЦИИ ФЕРМЕНТОВ

Руководители: О. В. Гребенникова, А. М. Сульман

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

В последние годы магнитные наночастицы находят частое применение в синтезе ферментных биокатализаторов. Отличительной чертой таких носителей является простота отделения каталитических систем из реакционной смеси. Пероксидаза корня хрена (HRP) в настоящее время является одним из самых изученных ферментов и широко применяется в различных отраслях промышленности. Поэтому создание эффективных и селективных биокаталитических систем на основе HRP является актуальной проблемой. В данной работе исследовались биокатализаторы на основе HRP, иммобилизованной на магнитные наночастицы Fe_3O_4 . Последние были синтезированы методом соосаждения. Далее полученный носитель обрабатывался двумя разными способами. В первом случае для обработки магнитных наночастиц использовали 3-аминопропилтриэтоксисилан (АПТС). Модифицированный Fe_3O_4 активировали с помощью глутарового альдегида (ГА). Затем на подготовленный носитель была ковалентно иммобилизована HRP. Другой биокатализатор был синтезирован с использованием тетраэтоксисилана (ТЭОС). В этом случае полученную смесь наночастиц изначально обрабатывали ТЭОС. Затем носитель модифицировали и активировали с помощью АПТС, ГА и HRP. В первом и втором случаях биокатализаторы обозначались как $Fe_3O_4/АПТС/ГА/HRP$ и $Fe_3O_4/SiO_2/АПТС/ГА/HRP$, соответственно. Активность синтезированных

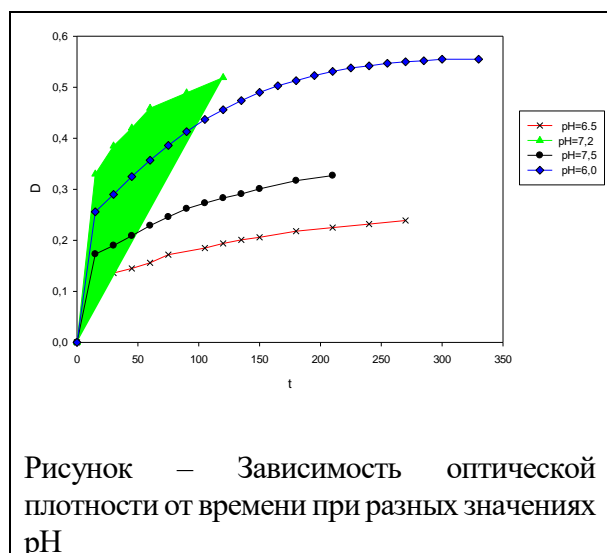


Рисунок — Зависимость оптической плотности от времени при разных значениях pH

биокатализаторов изучалась спектрофотометрически. В качестве окисляемого субстрата был выбран 2,2'-азино-бис(3-этилбензотиазолин-6-сульфонат) аммония (АБТС), который при окислении пероксида водорода в присутствии HRP дает голубое окрашивание. Из всех синтезированных биокатализаторов наибольшую активность проявил $Fe_3O_4/SiO_2/АПТС/ГА/HRP$, поэтому с ним выполнялись эксперименты по определению оптимальных условий. На рис. представлена кинетическая зависимость окисления АБТС в присутствии $Fe_3O_4/SiO_2/АПТС/ГА/HRP$ при различных значениях pH. Из рис. видно, что оптимальным pH является 7.2. При данном значении биокатализатор $Fe_3O_4/SiO_2/АПТС/ГА/HRP$ показал лучшие результаты по окислению АБТС. Синтезированные биокатализаторы могут с успехом применяться в процессах окисления фенольных соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ 19-79-00134.

УДК 544.77.051

Малышев Максим Дмитриевич

МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЦИСТЕИН- СЕРЕБРЯНОГО РАСТВОРА

Руководитель: Комаров П.В.

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Интерес к изучению супрамолекулярных гидрогелей (СГГ) объясняется их широким распространением в повседневной жизни и активным применением в различных технологических процессах. СГГ представляют собой системы, образованные за счет межмолекулярных связей. Они способны менять и восстанавливать свою структуру в результате внешнего воздействия - механических нагрузок и температуры.

Цистеин-серебряный раствор (ЦСР) является перспективной основой для получения СГГ в качестве биомедицинских приложений. Уникальность этой системы заключается в том, что она желируется при относительно низком содержании дисперсной фазы (~0.01%). Выполненные экспериментальные исследования показывают, что гелеобразование в ЦСР является многоуровневым процессом, в котором можно выделить три последовательных этапа. На I этапе образуются заряженные кластеры меркаптида серебра (МС) с различными радиусами инерции, из которых на II этапе (в ходе созревания ЦСР) формируются крупномасштабные агрегаты (1-600 нм). Процесс гелеобразования (III этап) инициируется при добавлении различных солей металлов.

В докладе обсуждаются общие принципы построения многомасштабной компьютерной модели с целью детального изучения закономерностей процессов гелеобразования в ЦСР. В ходе разработки модели в рамках квантово-механических расчетов были выявлены особенности структуры формирующихся кластеров МС. Затем с помощью атомистического моделирования удалось явно пронаблюдать формирование как самих кластеров МС, так и крупномасштабных агрегатов на их основе. Полученная информация была использована для параметризации мезоскопической модели ЦСР. Построенная крупномасштабная модель позволяет учитывать влияние солей металлов на структурообразование в системе.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-33-00146 мол_а) с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова».

УДК 547.821.3

Малякова Алина Александровна

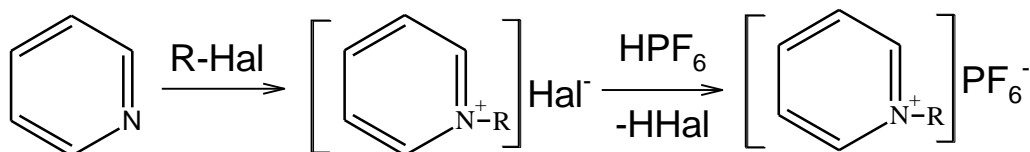
СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ N-АЛКИЛПИРИДИНИЯ

Руководитель: О.Е. Журавлёв

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра органической химии

Ионные жидкости (ИЖ) представляют собой класс солей, являющихся жидкостями с низкими температурами плавления (ниже 100°C). В современной химии ионные жидкости весьма широко используются в качестве растворителей, катализаторов, электролитов для аккумуляторных батарей. Большой интерес представляет изучение влияния структуры органического катиона и природы аниона в составе ионной жидкости на их термические свойства.

Нами были синтезированы ИЖ с гексафторфосфат-анионом [PF₆]⁻ и катионом N-алкилпиридиния с различной длиной алкильных заместителей (CH₃, C₄H₉, C₈H₁₇, C₁₀H₂₁). Прекурсорами для получения гексафторфосфатов по реакции метатезиса выступали галогениды N-алкилпиридиния, которые в свою очередь были получены по реакции нуклеофильного замещения между пиридином и алкилгалогенидами. Схемы реакций представлены ниже. Синтезированные соединения представляют собой жидкости или низкоплавкие твердые вещества белого или кремового цветов. Хорошо растворимы в полярных органических растворителях (спирт, ацетон, ацетонитрил), плохо растворимы в воде. Все синтезированные соединения охарактеризованы данными ИК-спектроскопии. Определены основные физико-химические константы.



где R: CH₃, C₄H₉, C₈H₁₇, C₁₀H₂₁.

Hal: I, Cl, Br.

Для оценки термической стабильности ионных жидкостей было изучено их поведение в температурном интервале 25-500 °С в воздушной атмосфере.

УДК 541.64:539.2

Маркова Алена Игоревна

ОЦЕНКА МОРФОЛОГИИ ГРУБОДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

Руководитель: П.М. Пахомов

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра физической химии

Суспензии представляют собой дисперсные системы, состоящие из частиц твёрдого тела (дисперсной фазы), распределённых в жидкой дисперсионной среде. Важнейшей задачей технолога при изготовлении суспензий является максимальное диспергирование частиц и их однородность, для контроля этих характеристик часто используются дорогостоящие приборы, требующие сложной и длительной процедуры обработки результатов. Нами предлагается простой, доступный и эффективный спектроскопический метод, позволяющий характеризовать такие важные параметры рассеивающих «мутных» сред, как размер частиц, их распределение по размерам и др.

Цель настоящей работы заключается в выяснении возможностей разработанного спектроскопического метода в ИК области спектра для оценки морфологии суспензий.

В качестве образцов исследования были выбраны суспензии, дисперсной средой в которых является вазелиновое масло и глицерин, а в качестве наполнителя (твёрдой фазы) Al_2O_3 , TiO_2 и слюда, покрытая тонким слоем TiO_2 и Fe_2O_3 . Основным методом оценки морфологии суспензий являлась ИК спектроскопия. Для контроля спектроскопических данных использовали методы оптической микроскопии.

Установлено, что суспензии являются сильно рассеивающими средами за счет большой разницы показателей преломления между дисперсной фазой и дисперсной средой. Показано, что с ростом концентрации дисперсной фазы происходит агрегация твердых частиц наполнителя в суспензии. Обнаружено, что суспензии, наполненные Al_2O_3 , имеют недостаточно выраженный эффект рассеяния при изменении концентрации наполнителя, и предположено, что наполнитель агрегирует в настолько крупные частицы, которые выходят за рабочий ИК диапазон, что и было подтверждено методом оптической микроскопии, которая демонстрирует формирование сетчатой структуры из частиц Al_2O_3 .

Данные полученные спектроскопическим методом показали хорошую корреляцию с визуальными методами, полученными на одних и тех же образцах, что говорит о правильности развиваемого метода.

УДК 66.095.63

Маркова Мария Евгеньевна

ДОПИРОВАННЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ СИНТЕЗА ФИШЕРА-ТРОПША

Руководитель: Э.М. Сульман

Тверской государственный университет, г. Тверь
Региональный технологический центр

Последние десятилетия интерес исследователей сосредоточен на разработке методов получения альтернативных источников энергии. Большой интерес представляет ряд процессов, получивших название синтез Фишера-Тропша (СФТ), основанных на взаимодействии монооксида углерода и водорода, приводящем к образованию углеводородов и их производных.

Наиболее активными в СФТ являются металлы с 3d- и 4f-электронной конфигурацией, а также их бинарные соединения (оксиды, нитриды, карбиды) [1]. Ru, Ni, Fe и Co обладают наибольшей каталитической активностью при гидрировании CO. Для повышения активности и стабильности могут быть использованы различные промоторы в качестве добавок к катализаторам СФТ. Можно выделить два типа промоторов: структурные (ZrO₂, MgO, Al₂O₃, TiO₂ и др.) и энергетические (Li, Ca, La, Pt, Pd и т. д.) [1, 2].

Выбор надлежащего носителя для катализатора является еще одним способом повышения активности катализаторов СФТ. Сверхсшитые полимеры характеризуются высокой площадью поверхности, высокой пористостью, низкой плотностью и повышенной адсорбционной способностью.

В настоящей работе в качестве перспективного носителя предложен сверхсшитый полистирол для катализаторов СФТ. Основываясь на литературных данных, в качестве первичных металл-катализаторов Ni, Co и Fe. Для повышения активности и увеличения выхода углеводородов бензинового и дизельного ряда в качестве катализатора-промотора был выбран Ru. Для синтеза катализатора был использован метод гидротермального осаждения, поскольку он позволяет получить высокую дисперсию металла и равномерное распределение частиц металла.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Jahangiri, H.; Bennett, J.; Mahjoubi, P.; Wilson, K.; Gu, S. // Catal. Sci. Technol., 2014, 4, 2210-2229.
2. Martínez, A.; López, C.; Márquez, F.; Díaz, I. // J. Catal. 2003, 220, 486–499.

УДК 544.144:544.169:544.134

Матус Яна Александровна

СВЯЗЕВЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ ЗАМЕЩЕННЫХ БЕНЗОЛА

Руководители: Н.П. Русакова, В.В. Туровцев

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии, кафедра общей физики

Аминокислоты и их производные - это одни из самых важных объектов исследования в органической химии. На настоящее время существует множество способов их получения, и разрабатываются новые методики. Так в химических превращениях, целью которых являются ароматические L-аминокислоты фенилаланин и тирозин, в некоторых случаях предлагается использовать замещенные бензола. Оценить влияние заместителя на перераспределение электронной плотности (ЭП) по структуре кольца можно с помощью подходов квантовой химии. В работе представлено сравнение электронных характеристик в критических точках связевых путей (КТ (3;-1)) для бензола (C_6H_6), фенола (C_6H_5-OH), толуола ($C_6H_5-CH_3$) и бензойной кислоты (C_6H_5-COOH) (Рис.). Квантово-химические расчёты выполнены методом B3LYP 6-311++G(3df,3pd), параметры распределения электронной плотности в КТ (3;-1) получены с помощью программы AIMALL [1].

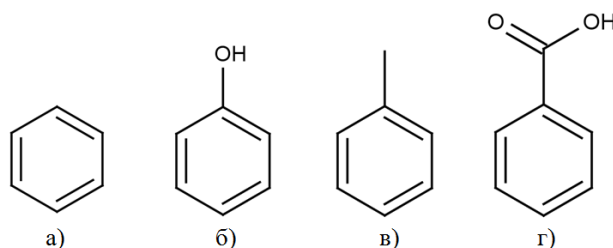


Рисунок: Молекулы а) C_6H_6 б) C_6H_5-OH в) $C_6H_5-CH_3$ г) C_6H_5-COOH .

Наличие заместителя сильно влияет на распределение ЭП в бассейнах соседних атомов ароматического кольца и незначительно сказывается на их связевых параметрах КТ. Однако в КТ (3;-1) на удаленных связях цикла величины $\rho_b(r)$, асимметричность распределения ЭП в направлениях ($\lambda_1 < \lambda_2$), перпендикулярных связевому пути, а также длина связевых путей С-С сохраняются в пределах расчетной погрешности. Ближе к заместителю $\rho_b(r)$ и $\lambda_1 < \lambda_2$ несколько меняются, и чем больше электроотрицательность заместителя, тем сильнее он влияет на изменение $\rho_b(r)$ и $\lambda_1 < \lambda_2$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Русакова Н.П., Завьялова А.Г., Туровцев В.В., Третьяков С.А., Федина Ю.А., Орлов Ю.Д. Электроотрицательность групп замещенных бензолов и метилового красного. Вестник ТвГУ. Серия: Химия. 2019. № 4 (38). С. 14-25.

УДК 678.048

Михайлова Полина Дмитриевна

ПЕРСПЕКТИВЫ ПОЛУЧЕНИЯ АНТИОКСИДАНТОВ ИЗ ОТХОДОВ ЗАГОТОВКИ БОБОВЫХ КУЛЬТУР

Руководитель: Е.В. Ожимкова

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

В настоящее время благодаря биотехнологическим методам переработки отходов сельского хозяйства и пищевых производств получают большое количество биологически активных соединений, в том числе, антиоксидантов, противомикробных или других биологически активных веществ. Особое внимание уделяется извлечению антиоксидантов из вторичных ресурсов сельскохозяйственных производств.

В представленной работе исследована возможность использования доступного растительного сырья для получения таких востребованных биологически активных веществ, как антиоксиданты. Для извлечения целевых компонентов в качестве растительного сырья использовались створки бобовых культур. Определение антиоксидантной активности проводилось в соответствии с методикой, описанной в работе Ниловой Л.П. [1]. Для проведения эксперимента на аналитических весах взвешивали точную навеску (до четвертого знака) воздушно-сухого исследуемого растительного сырья. Затем навеску количественно переносили в колбу и смешивали с соответствующим гидромодулю количеством экстрагента (дистиллированной водой). Смесь оставляли на 24 ч и 48 ч для экстракции при температуре $23 \pm 1^\circ\text{C}$ и отсутствии прямых солнечных лучей.

Анализируя полученные результаты, были определены следующие условия получения экстрактов с наибольшей антиоксидантной активностью: продолжительность 24 часа, гидромодуль 1:15. При указанных условиях экстракции антиоксидантная активность экстрактов, полученных из створок бобов, составила: 0,63 мг/мл (в пересчете на кверцетин), а для экстрактов, полученных из створок гороха – 0,33 мг/мл (в пересчете на кверцетин).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Определение антиоксидантной активности порошков из растительного сырья перманганатным методом / Л. Нилова, А. Вытовтов, Е. Камбулова, М. Кайгородцева // Потребительский рынок Евразии: современное состояние, теория и практика в условиях Евразийского экономического союза и ВТО: Сборник статей III Междунар. науч.-практ. конф. (Екатеринбург, 30-31 марта 2015 г.). – Екатеринбург, 2015. – С. 118-122.
УДК 544.4

Михайлов Степан Петрович

ВОССТАНОВИТЕЛЬНОЕ АМИНИРОВАНИЕ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

Руководитель: Э.М. Сульман, А.М. Сульман

Тверской государственной технической университет, г. Тверь
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

В последние годы многие авторы уделяют большое внимание совершенствованию ресурсосберегающих технологий восстановительного аминирования для получения биологически активных веществ. Это связано с тем, что продуктом восстановительного аминирования глюкозы и метиламина является N-метилглюкамин, (МГА, торговое название меглумин), широко применяемый в медицинской химии для высокоэффективного повышения солюбилизации и стабилизации биологически активных соединений, используемых при сердечнососудистых заболеваниях, обладающих противоэпилептическим, болеутоляющим, антимикробным, антибактериальным, противоопухолевым и многими другими действиями [1]. Реакции соединения анилина и о-карбокснилина с различными сахарами и их тетраметильными производными была изучена в пиридине, этаноле, метаноле и 90% спирте. Результаты были почти такими же, как и для глюкозанилида. В настоящее время известно более 10 методов восстановительного аминирования, однако все из них характеризуются низким выходом целевого продукта и большим количеством побочных веществ, получаемых в ходе синтеза. Развитие методов синтеза наноструктурированных катализаторов позволит повысить эффективность процессов восстановительного аминирования[2].

Процесс можно улучшить, осуществляя его непрерывным способом и / или выбирая катализаторы, которые позволяют проводить процесс при более низком давлении.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований 19-38-90050, 18-08-00489.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Ribeiro Sampaio R.N., Lucas I.C., Costa Filho A.V. / The use of azythromycin and N-methyl glucamine for the treatment of cutaneous Leishmaniasis caused by Leishmania (Leishmania) amazonensis in C57BL6 mice. // Anais brasileiros de dermatologia.: - 2009. - 84 (2), - p.125-128
2. Волкова Т.Г., Волкова Т.Г., Ключев М.В., Майдаченко Г.Г., Усанова Н.Н / Жидкофазное каталитическое гидрирование оснований шиффа. // Известия ВУЗов. Серия Химия и химическая технология.: – 2010. – № 53(1) – с.14-17.

УДК 54.057

Михайлов Степан Петрович

ИММОБИЛИЗАЦИЯ ФЕРМЕНТОВ ДЛЯ СИНТЕЗА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Руководители: А.М. Сульман, О.В. Гребенникова

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

Для усовершенствования процессов синтеза биологически активных соединений необходимо создание фундаментальных научных основ кинетических закономерностей, механизмов процессов окисления ароматических соединений с использованием новых биокаталитических, в том числе магнитоотделяемых, систем. Использование ферментов как катализаторов в органическом синтезе имеет ряд преимуществ: (1) реакция протекает в мягких, в отношении температуры, давления, рН, условиях и не является энергоемкой; (2) процесс характеризуется высокой энантио-, регио- и хемоселективностью [1].

Преимуществами иммобилизованных ферментов по сравнению с их нативной формой являются увеличение стабильности фермента, повторное или длительное использование, регулирование скорости реакции, простота отделения от продуктов реакции, возможность остановки реакции в любое время, модуляция каталитических свойств фермента, предотвращение загрязнения продуктов реакции [2]. Перспективным направлением в катализе является иммобилизация ферментов на магнитных наночастицах, поскольку наночастицы обладают большой площадью поверхности и обеспечивают простоту отделения от реакционной смеси. Мы пользовались для иммобилизации пероксидазы HRP (фермент класса оксидоредуктаз КФ 1.11) использовались магнитные частицы, полученные методом соосаждения Fe⁺² и Fe⁺³ в щелочной среде. Иммобилизованный HRP показал улучшенную термостабильность по сравнению с нативной HRP.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ 19-79-00134 и РФФИ 18-38-00159.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. W.J. Mijs, C.R.H.I. de Jonge. Organic Syntheses by Oxidation with Metal Compounds. Springer Science & Business Media, 2013 г. 908 P.
2. Bonrath W., Eggersdorfer M., Netscher T. Catalysis Today. 2007. 121. P. 45.

УДК 662.756.3+544.478

Монжаренко Маргарита Александровна

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ ГИДРИРОВАНИЯ ЖИРНЫХ КИСЛОТ

Руководитель: А.А. Степачёва

Тверской государственной технической университет, г. Тверь
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Жирные спирты, благодаря своей амфифильности, которая достигается наличием неполярной липофильной углеводородной цепи и полярной гидрофильной гидроксильной группы, широко используются в качестве смазочных средств, при синтезе ПАВ, в косметической, фармацевтической, кожевенной, текстильной и металлургической промышленности [1, 2].

Основным промышленным методом получения жирных спиртов является окисление углеводородов нефти. Использование токсичных окислителей, а также ограниченные запасы сырья делают актуальными исследования, направленные на поиск альтернативных способов получения высших спиртов. Одним из таких способов является гидрирование карбоксильной группы таких молекул, как альдегиды, эфиры или жирные кислоты. Эти соединения входят в состав возобновляемых источников – растительных масел и жиров [2]. Поэтому выбор наиболее эффективного катализатора является важной задачей для получения высших алифатических спиртов из возобновляемого сырья.

В данной работе было проведено кинетическое исследование селективного восстановления карбоксильной группы стеариновой кислоты, выбранной в качестве модельного соединения, с целью получения стеарилового спирта. В качестве катализатора был выбран 1%Pd/MN-270 - палладий, нанесенный на полимерную матрицу сверхсшитого полистирола гидротермальным методом. Реакция проводилась при следующих условиях: температура – 100-200 °С, парциальное давление водорода – 1.0-4.0 МПа, концентрация стеариновой кислоты в гексане – 0.2 моль/л, масса катализатора – 0.05 г. На основе данных, полученных при изучении кинетики процесса гидрирования, была рассчитана начальная скорость процесса, удельная скорость расходования стеариновой кислоты при 30% конверсии субстрата и энергия активации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Manyar H.G., Paun C., Pilus R., Rooney D.W., Thompson J.M., Hardacre Ch. // Chem. Commun. 2010. Vol. 46. P. 6279–6281.
2. Maki P., Hajek J., Salmi T., Murzin D. // Appl. Catal A: General. 2005. Vol. 292. P. 1-49.

УДК 544.47

Мушинский Лев Сергеевич

ИЗУЧЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ОСОБЕННОСТЕЙ СИНТЕЗА АНИЛИНА НА NI-СОДЕРЖАЩЕМ СВЕРХСШИТОМ ПОЛИСТИРОЛЕ

Руководитель: В.Ю. Долуда

Тверской государственной технической университет, г. Тверь
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Анилин является важным продуктом органического синтеза, широко используемым в производстве добавок к резине, красителей, присадок к моторным топливам и маслам, а также фармацевтических препаратов [1]. В настоящее время мировое производство анилина достигло 8 млн. т/год при этом к 2027г году планируется рост производства до 10 млн. т/год [1].

На основании изученных данных можно сделать вывод о необходимости модернизации технологии синтеза анилина (Рисунок 1), которая требует улучшения катализатора, подбора параметров реакции для получения лучших значений селективности и конверсии и изучения кинетических особенностей получения анилина.

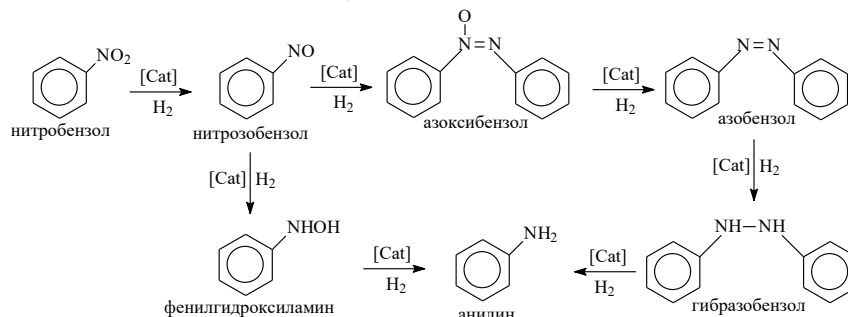


Рисунок 1. Каталитическое гидрирование нитробензола

Эксперимент проводили следующим образом: колбу с навесками катализатора, нитробензола и метилового спирта продували 3 раза 100 мл азота под давлением от 1 до 7 МПа, затем нагревали в атмосфере азота и 3 раза продували водородом. Гидрирование нитробензола в среде метилового спирта осуществлялось в следующих условиях: масса катализатора от 0,1 г. до 0,4 г., время реакции 60 минут, температура от 90 до 160 °С, частота вращения мешалки 1100 об/мин.

Анализ продуктов проводили методом газовой хроматографии с использованием газового хроматографа Кристаллюкс-4000М.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Jagannath B. Lamture Aniline and its analogs / Notion Press, Inc. -2018, ISBN-13: 978-1642492576, ISBN-10: 1642492574, 392 p

УДК 537.611.

Никитин Максим Сергеевич

МАГНИТНАЯ ДОМЕННАЯ СТРУКТУРА ОРТОРОМБИЧЕСКИХ ФЕРРОМАГНЕТИКОВ НА ОСНОВЕ Co

Руководитель: О.В. Жданова

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физики конденсированного состояния

Орторомбические сплавы на основе кобальта, такие как HfCo_7 , $\text{Zr}_2\text{Co}_{11}$, а также борид кобальта Co_3B имеют магнокристаллическую анизотропию (МКА) типа «легкая ось», высокие значения константы МКА ($K_1 \approx 10^6 - 10^7 \text{ Эрг/см}^3$) и температуры Кюри ($T_C \approx 750 - 800 \text{ К}$) [1–3]. Данные соединения могут быть рассмотрены в качестве кандидатов для создания постоянных магнитов без использования редкоземельных элементов.

В рамках данной работы были исследованы микроструктура и конфигурации доменной структуры сплавов HfCo_7 , $\text{Zr}_2\text{Co}_{11}$ и Co_3B . Сплавы были получены методом высокочастотной индукционной плавки в установке «Донец-1» в тиглях из алунда в атмосфере особо чистого аргона при давлении 1,1–1,2 атм. Фазовый и химический состав образцов исследовался с использованием растровой электронной микроскопии. Магнитная доменная структура выявлялась на произвольно ориентированных плоскостях поликристаллических образцов методами полярного эффекта Керра и Акулова-Биттера, а также методом МСМ.

Конфигурации доменной структуры сплавов $\text{Zr}_2\text{Co}_{11}$, HfCo_7 и Co_3B в целом характерны для соединений с МКА типа «легкая ось»: на базисных плоскостях визуализируется ветвление доменной структуры, а домены имеют вид «звездочек», на близких к призматической ориентации поверхностях наблюдения выявляется, характерная для данной ориентации полосовая и клиновидная доменная структура. Однако, доменная структура каждого из сплавов имеет ряд особенностей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Balasubramanian B., Das B., Skomski R., Zhang W.Y., Sellmyer D.J. Hf–Co and Zr–Co alloys for rare-earth-free permanent magnets // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2014. V. 26. 064204.
2. Fruchart, R. Moments magnetiques des borures ferromagnetiques de cobalt Co_3B , Co_2B et du borure de fer FeB / R. Fruchart // *Compt. rend. Acad. sci. colon.* – 1963. – V. 256. – № 15. – P. 3304–3305.
3. Ляхова М.Б., Жданова О.В., Семенова Е.М. Характеристики доменных границ орторомбических магнетиков // *Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения.* - 2015, т. 15, № 3. с. 129-132.

УДК 538.956

Оспельников Никита Михайлович

ВЛИЯНИЕ ИОНОВ ЖЕЛЕЗА НА ПРОВОДИМОСТЬ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ НИОБАТА НАТРИЯ

Руководитель: Е.В. Барабанова

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра прикладной физики

Структурой перовскита обладают многие сегнетоэлектрические материалы: BaTiO_3 , $\text{PbTi}_{1-x}\text{Zr}_x\text{O}_3$ (ЦТС) и т.д. Твердые растворы на основе ниобатов щелочных металлов являются перспективной заменой свинецсодержащей системы ЦТС. В связи с этим исследование материалов на основе ниобата натрия является актуальным.

В работе проведено исследование электрических свойств керамики ниобата натрия (NaNbO_3 – NN) и ее твердого раствора с железом ($\text{NaNb}_{0,9}\text{Fe}_{0,1}\text{O}_3$ – NNF). Данные вещества были получены из шихт следующего состава: 1 шихта – Na_2CO_3 , Nb_2O_5 ; 2 шихта – Na_2CO_3 , Nb_2O_5 , Fe_2O_3 , с последующим синтезом в печи при 700°C . Далее производилось повторное измельчение и спекание при 1100°C . Получившиеся образцы имели форму дисков, на которые при помощи серебряной пасты наносились электроды. Проводились измерения тангенса угла диэлектрических потерь и ёмкости образцов на фазочувствительном измерителе Вектор-175 при температурах 30 – 655°C и на частотах 10^{-1} – 10^6 Гц.

Измерения показали, что при добавлении железа точка Кюри смещается и наблюдается максимум диэлектрической проницаемости при температуре 620°C . У чистого NN согласно литературным данным максимум должен наблюдаться при 650°C . При замещении ионов ниобия ионами железа сильно увеличиваются диэлектрические потери. Это вызвано ростом проводимости до величины $4 \cdot 10^{-2}$ См/м, что является пороговым значением для проводимости ионных проводников (рис.1).

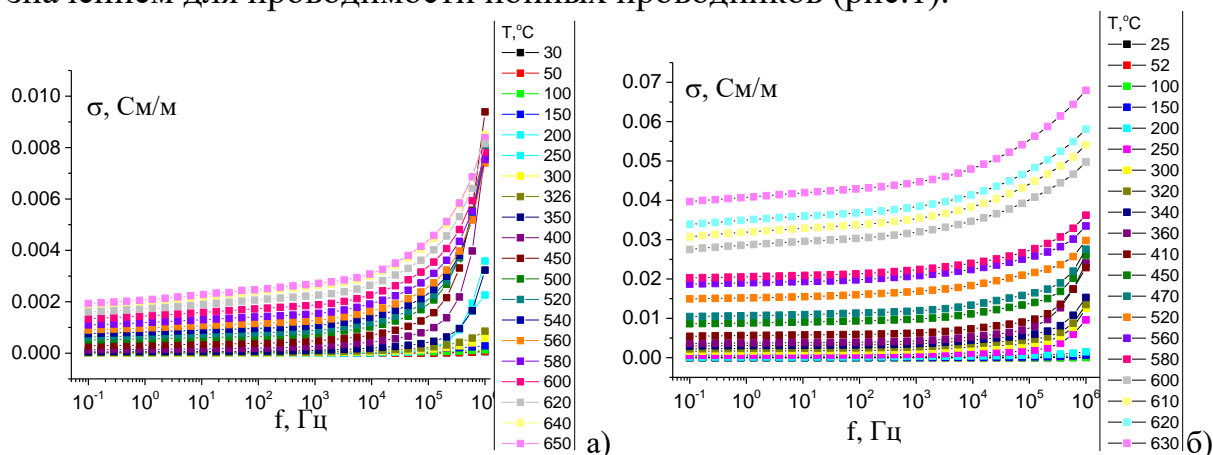


Рисунок 1. Частотная зависимость проводимости при различных температурах для NaNbO_3 (а) и $\text{NaNb}_{0,9}\text{Fe}_{0,1}\text{O}_3$ (б).

УДК 547.571

Петрова Евгения Николаевна

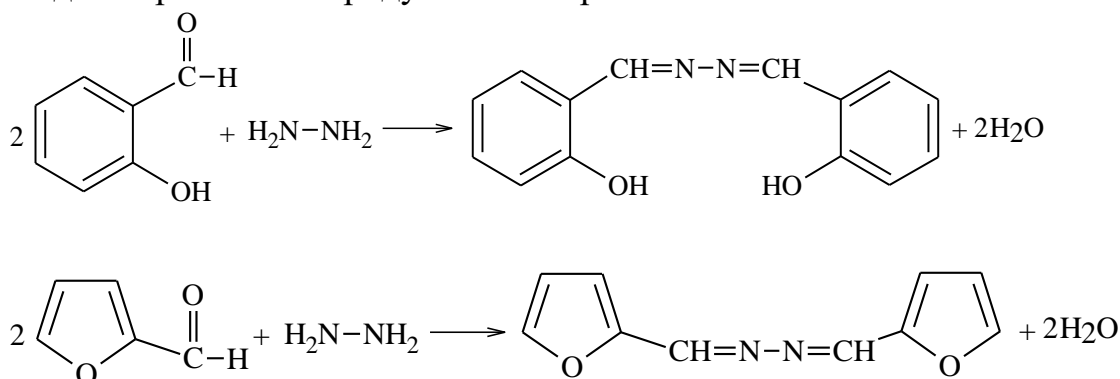
КОНДЕНСАЦИЯ АРОМАТИЧЕСКИХ АЛЬДЕГИДОВ С ГИДРАЗИНОМ

Руководитель: С.А. Темникова

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра органической химии

Азины – это класс органических веществ, являющиеся продуктами конденсации гидразина с избытком карбонильного соединения. Они являются потенциальными лигандами благодаря двум иминным группам, которые присутствуют в молекуле. Получили значительное внимание в медицине в качестве противоопухолевых, противовоспалительных и противомикробных веществ. По мере развития координационной химии они используются для идентификации геометрических характеристик различных комплексов, изомеризации комплекса и др.

В настоящей работе представлены результаты по синтезу салицилальдазина и азина фурфурола. На рисунке представлена схема конденсации ароматических альдегидов с N-нуклеофильным соединением. Происходит образование продуктов с сопряженной π -системой – азинов.



Полученные соединения представляют собой твердые вещества желтого цвета, обладающие оранжево-желтой флуоресценцией в УФ-свете. Определены основные физические константы для синтезированных соединений: растворимость, температура плавления. Структура полученных азинов была подтверждена методом ИК-спектроскопии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Wazir, J. Synthesis and characterization of salicylaldazine and its metal (II) complexes derived from metal (II) chlorides / J. Wazir. // International journal of engineering works. – 2014. – Т.3. – № 24. – С. 1-4.

УДК 661.783

Пономарчук Елизавета Евгеньевна

ВОЗМОЖНОСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ КАТАЛИЗАТОРОВ В РЕАКЦИИ СУЗУКИ

Руководитель: Л.Ж. Никошвили

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

Семейство катализируемых палладием реакций кросс-сочетания представляет одну из наиболее быстро развивающихся областей катализа. Реакция кросс-сочетания Сузуки является масштабируемой и экономически эффективной для использования в синтезе промежуточных продуктов получения различных фармацевтических препаратов.

В рамках данной работы на примере реакции кросс-сочетания 4-броманизола (4-БрАн) и фенилбороновой кислоты (ФБК) были исследованы каталитические свойства следующих биметаллических образцов на основе сверхсшитого полистирола марки MN100: Au-Pd/MN100, Cu-Pd/MN100, Zn-Pd/MN100 (содержание Pd 1%(масс.), содержание второго металла 2%(масс.)). Все катализаторы были также восстановлены в токе H_2 в течение 3 ч при 300°C.

В результате проведенных исследований было выявлено, что в случае невосстановленных катализаторов введение меди в состав Pd/MN100 приводит к повышению активности и селективности, хотя образец Cu-Pd/MN100 уступает по активности системе Au-Pd/MN100. Наименьшей активностью обладает образец Zn-Pd/MN100. После восстановления активность медь-содержащего образца снижается, однако селективность по продукту кросс-сочетания заметно возрастает, до 92% при 100% конверсии 4-БрАн. В случае Zn-содержащего образца после восстановления скорость конверсии 4-БрАн заметно возрастает, а селективность остается практически неизменной. Таким образом, с точки зрения повышения селективности перспективным направлением является введение меди в состав образцов.

Кроме того, для наиболее активного катализатора Au-Pd/MN100- H_2 было исследовано влияние содержания ФБК и NaOH, а также температуры процесса. Было обнаружено, что применение 1.5-кратного избытка ФБК по отношению к 4-БрАн в случае образца Au-Pd/MN100- H_2 оказывается достаточным, чтобы довести реакцию до 100% конверсии 4-БрАн за 15 мин, что выгодно отличает данный катализатор от монометаллического аналога Pd/MN100- H_2 .

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-08-00429).

УДК 53.097

Попов Александр Сергеевич

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЫ НОСИТЕЛЯ ЗАРЯДА ГЕРМАНИЯ n-ТИПА

Руководители: К.Н. Бойцова, А.А. Алексеев

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра прикладной физики

Полупроводники — это широкий класс веществ, обладающих электропроводимостью, которая занимает промежуточное положение между металлами и диэлектриками. Кристаллы германия обладают полупроводниковыми свойствами и широко используются во многих отраслях промышленности современного мира. Некоторые сплавы германия с другими химическими элементами — сверхпроводники. Несмотря на популярность данного материала, чаще всего он находит применение в оптике, в связи с чем его теплофизическим свойствам уделяют мало внимания.

В настоящей работе на примере пяти образцов германия (Ge) с проводимостью n-типа с различным удельным сопротивлением ($Ge_1 = 0,75 \text{ Ом*см}$, $Ge_2 = 1 \text{ Ом*см}$, $Ge_3 = 2 \text{ Ом*см}$, $Ge_4 = 2,5 \text{ Ом*см}$, $Ge_5 = 10 \text{ Ом*см}$) были проведены исследования зависимости действительной и мнимой составляющей импеданса от частоты подаваемого напряжения. При исследованиях использовались подложки из различных материалов. В первом случае была использована подложка из меди, во втором из стали. Были построены графики, представляющие сравнение зависимостей, составляющих импеданса от частоты образцов ($Ge_1, Ge_2, Ge_3, Ge_4, Ge_5$) при различных подложках.

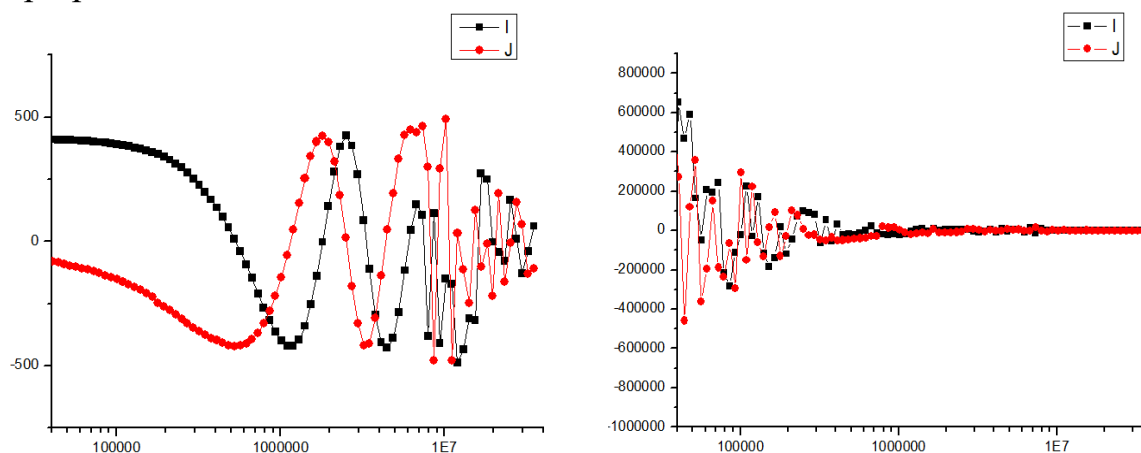


Рис. 1 – Графики зависимости действительной (I) и мнимой (J) части импеданса в кристалле германия **Ge1** от частоты подаваемого напряжения при использовании подложек из меди (слева) и стали (справа).

УДК 678.7, 504.5

Прокопович Анастасия Викторовна

ВРЕДНЫЕ ПРОМЫШЛЕННЫЕ ВЫБРОСЫ В ПРОИЗВОДСТВЕ ПОЛИЭТИЛЕНОВОЙ ПЛЕНКИ МЕТОДОМ РАЗДУВА

Руководитель: Е.А.Панкратов

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

Упаковка играет важную роль при выборе потребителем товара. В настоящее время предпочтение отдается полиэтиленовым пленкам, которые занимают почти половину объема переработки полимеров в мире.

Однако при производстве полиэтиленовой пленки необходимо учитывать контроль промышленных выбросов.

При переработке пленки при температурах, превышающих температуру плавления полиэтилена, возможно выделение оксида углерода, непредельных углеводородов, органических кислот, альдегидов. Предельно допустимые концентрации (ПДК) вредных паров и газов термоокислительной деструкции в воздухе рабочей зоны производственных помещений должны соответствовать требованиям и не должны превышать нормы, утвержденные органами здравоохранения. Поэтому на производстве предусмотрено использование коллективных средств защиты работающих, например, приточно-вытяжной вентиляции, что позволит обеспечить санитарно-гигиенические условия труда работающих.

Однако при этом происходит загрязнение вентиляционного воздуха вытяжных систем веществами различного класса опасности, что приводит к загрязнению окружающей среды [1].

Установлены нормативы предельно допустимых выбросов (ПДВ) в атмосферу, регламентированные Законом РФ «Об охране окружающей среды» [2].

В случаях превышения ПДК вредных веществ в воздухе рабочей зоны и в аварийной ситуации необходимо пользоваться средствами индивидуальной защиты органов дыхания.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Анализ выбросов производства изделий из пластмасс и разработка мероприятий по их снижению / Молодой исследователь Дона. – №2(5), 2017. – С. 66-69.
2. ГОСТ 17.2.3.02-2014. Правила установления допустимых выбросов загрязняющих веществ промышленными предприятиями.

УДК 661.1

Просьяник Юлия Андреевна

ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕНООБРАЗУЮЩИХ СВОЙСТВ СМЕСЕЙ СУЛЬФАНОЛА И ПОЛИЭТИЛЕНГОЛЯ

Руководитель: Н. В. Веролайнен

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра органической и биоорганической химии

Исследование смесей поверхностно-активных веществ (ПАВ) представляет значительный интерес, такие системы широко используются в текстильной промышленности, при изготовлении ячеистых бетонов и смесей для пожаротушения. В литературе приводится информация о пенообразующих свойствах отдельных веществ, в связи с этим большое значение приобретают исследования взаимного влияния различных поверхностно-активных веществ на физико-химические свойства их смесей [1].

Стабильные пены характеризуются пенообразующей способностью и устойчивостью. Мерой пенообразующей способности является объем пены сразу после ее образования, а мерой устойчивости – время жизни образовавшейся пены [2].

Сульфанол относится к синтетическим ПАВ анионного типа, является хорошим пенообразователем и используется в качестве синтетического моющего средства.

В данной работе были рассмотрены свойства смесей на основе сульфанола, полиэтиленгликоля-100 (ПЭГ-100) и полиэтиленгликоля-115 (ПЭГ-115). Для оценки воздействия ПЭГ-100 и ПЭГ-115 на раствор сульфанола были исследованы пенообразующие способности отдельных компонентов и смеси: их пеноустойчивость, кратность пены, а также поверхностное натяжение на границе с воздухом методом Ребиндера. Было установлено, что по сравнению со смесью, содержащей ПЭГ-115, смесь с ПЭГ-100 обладает более сильными пеногасящими свойствами: устойчивость пены уменьшилась в четыре раза.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Ланге К.Р. Поверхностно-активные вещества: синтез, свойства, анализ, применение / Ланге К.Р. – СПб.: Профессия, 2007. – 240 с.
2. Холмберг К., Йенссон Б., Кронберг Б., Линдман Б. Поверхностно-активные вещества и полимеры в водных растворах / Холмберг К.– М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2015. – 530 с.

УДК 542.973+544.473-039.63-386

Радин Александр Сергеевич

**РАЗРАБОТКА ГАЗОВОГО СЕНСОРА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ
ВОДОРОДА НА ОСНОВЕ ПОЛИПИРРОЛА,
МОДИФИЦИРОВАННОГО ГЕТЕРОПОЛИАНИОНОМ
ТИПА ДОУСОНА**

Руководитель: М.А. Феофанова

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

Оперативный контроль экологической обстановки и анализ реакционных сред в технологии микроэлектроники невозможны без развития средств автоматического контроля, в частности газоанализаторов. Одной из актуальных задач для газового анализа является селективное измерение концентрации водорода с высокой чувствительностью от нескольких ppm до объемных процентов с учетом того, что водород может находиться в смеси с другими газообразными веществами и парами воды.

Применяемые в современных газоанализаторах оперативного контроля электрохимические, полупроводниковые и термokatалитические газовые сенсоры во многом не удовлетворяют предъявляемым к ним требованиям по селективности, чувствительности, быстродействию и другим параметрам. Для решения поставленной задачи нами было разработано чувствительное покрытие на основе полипиррола, модифицированного вольфрамовым гетерополианионом типа Доусона, имеющим химическую формулу $[P^2W^{18}O^{62}]^{6-}$. Полипиррол – известный электропроводящий органический полимер, является многофункциональным материалом, перспективным, в том числе и для разработки резистометрических газовых сенсоров. Легирование полипиррола вольфрамовой гетерополикислотой типа Доусона позволяет увеличить его чувствительность и селективность по отношению к различным газообразным компонентам, в частности и к водороду. Также это позволяет химически стабилизировать гетерополисоединения в матрице полипиррола, что препятствует их вымыванию из полученного чувствительного покрытия, при проведении анализов в проточно-инжекционном режиме.

Разработанный на основе полученного чувствительного покрытия резистометрический газовый сенсор, обладает высокой чувствительностью по отношению к водороду – минимально определяемая концентрация 10 ppm и может быть использован в стационарных или переносных газоанализаторах с принудительной подачей пробы для измерения водорода в широком диапазоне концентраций.

УДК 537.634.2, 53.06

Ракунов Павел Андреевич

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ НАМАГНИЧИВАНИЯ НА МАГНИТОСТРИКЦИЮ СОЕДИНЕНИЯ $DyCo_2$

Руководитель: А.Ю. Карпенков

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физики конденсированного состояния

С недавнего времени определенные классы соединений, в которых наблюдаются фазовые переходы первого рода, вызывают большой интерес с точки зрения применения в качестве рабочих тел магнитных тепловых насосов, работающих при комнатных температурах. Особый интерес представляет соединения $La(Fe,Si)_{13}$, в которых наблюдаются гигантские изменения энтропии с большим выделением скрытого тепла. Изучение подобных систем оживило интерес к изучению соединений с зонным метамагнитным переходом (ЗМП).

Соединение $DyCo_2$ – зонный метамагнетик, представляющий особый интерес в низкотемпературных магнитокалорических применениях. Данное соединение характеризуется фазовым переходом первого рода, где наряду с магнитным переходом происходит кубически-тетрагональное искажение кристаллической решётки. Для использования в качестве рабочих тел тепловых насосов, необходимо знать свойства соединения в условиях, приближенных к реальному рабочему циклу, включающего процессы как

изотермического, так и адиабатического изменения поля. В работе проведены исследования магнитоупругих свойств соединения $DyCo_2$ в адиабатических и изотермических условиях изменения магнитного поля. На рис. 1 представлены температурные зависимости продольной и поперечной магнитострикции для соединения $DyCo_2$ полученные при изотермических (серые маркеры) и адиабатических (черные маркеры) условиях и $\mu_0 H = 1,85$. Анализ результатов показал, что максимальные значения продольной и поперечной магнитострикции, измеренной в различных условиях достигаются при температуре 142 К, что соответствует температуре перехода. Из анализа данных эксперимента видно, что магнитострикция в изотермических условиях на 20% выше, чем в адиабатических.

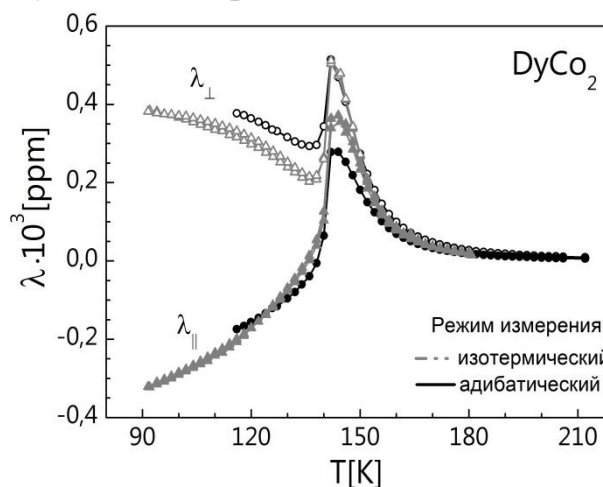


Рисунок 1. Температурные зависимости продольной и поперечной магнитострикции для соединения $DyCo_2$ в магнитном поле 1,85 Тл, измеренные в адиабатических и изотермических

УДК 547.821.2

Рассказова Наталья Юрьевна

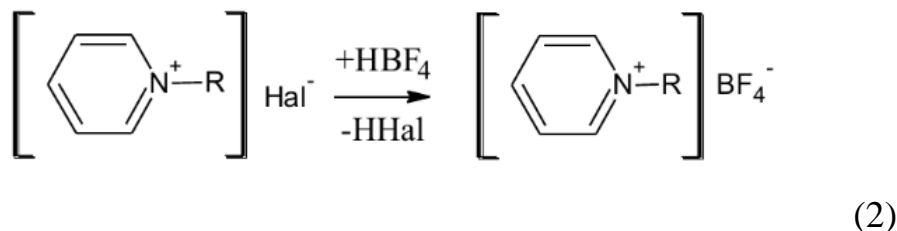
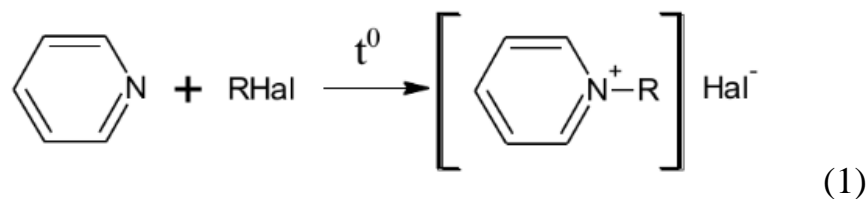
СИНТЕЗ И ТЕРМИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ ТЕТРАФТОРБОРАТОВ N-АЛКИЛПИРИДИНИЯ

Руководитель: О.Е. Журавлёв

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра органической химии

В настоящее время повышается востребованность использования ионных жидкостей в качестве растворителей в области «зеленой» химии. Они обладают уникальными физическими и химическими свойствами: нелетучесть, низкая температура плавления ($<100^{\circ}\text{C}$), давление паров близка к нулю, высокая электропроводность. Исследование ионных жидкостей является актуальной задачей, так как их свойства еще мало изучены, и нет четких закономерностей влияния их структуры на свойства.

В данной работе были получены четвертичные соли N-алкилпиридиния по реакции нуклеофильного замещения (схема 1). По реакции метатезиса (схема 2) получены тетрафторбораты N-алкилпиридиния, с различной длиной алкильных заместителей: C_1H_3 , C_4H_9 , C_8H_{17} , $\text{C}_{10}\text{H}_{21}$. Синтезированные соединения представляют собой жидкости или низкоплавкие твердые вещества белого или кремового цветов. Хорошо растворимы в полярных органических растворителях (спирт, ацетон, ацетонитрил), плохо растворимы в воде. Все синтезированные соединения охарактеризованы данными ИК-спектроскопии. Определены основные физико-химические константы.



Для оценки температурного интервала, в котором возможно использование полученных ионных жидкостей была изучена их термическая стабильность в воздушной атмосфере в температурном интервале $25\text{-}500^{\circ}\text{C}$. Установлено, что все тетрафторбораты стабильны до $200\text{-}250^{\circ}\text{C}$ и разлагаются с несколько стадий в интервале $230\text{-}350^{\circ}\text{C}$.

УДК 577.114

Рассказова Полина Михайловна

ЧАЙНЫЙ ГРИБ КАК ПРОДУЦЕНТ БАКТЕРИАЛЬНОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ

Руководитель: Л.Ж. Никошвили

Тверской государственной технической университет, г. Тверь
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Целлюлоза – основной биоразлагаемый полимер на Земле, она имеет огромное значение во всем мире. Существует растительная целлюлоза, ее добывают в основном из хлопка и древесины, и бактериальная целлюлоза (БЦ), ее синтезируют некоторые представители уксуснокислых бактерий [1]. Обе разновидности целлюлозы имеют одинаковую химическую формулу $(C_6H_{10}O_5)_n$, однако химические и физические свойства очень различны. БЦ является наиболее чистым полимером, так как в ней не содержатся такие вещества как гемицеллюлоза и лигнин, она обладает высокой кристалличностью и высокой влагоудерживающей способностью [2].

БЦ имеет широкий спектр применения. Она может использоваться в качестве альтернативы растительной целлюлозы в бумажной промышленности, в медицине в качестве материала для перевязки ран, в пищевой промышленности может использоваться как загуститель [3].

В данной работе в качестве продуцента БЦ рассмотрена культура *Medusomyces gisevii*, более известная как чайный гриб.

Этот организм представляет собой симбиоз уксуснокислых бактерий и дрожжей. Они производят два различных продукта: ферментированный напиток и бактериальную целлюлозу.

Для культивирования данного организма не требуется создания сложной питательной среды, процесс происходит при комнатной температуре, искусственное поддержание рН не требуется, так как чайный гриб способен к саморегуляции. Все вышеперечисленное делает процесс получения БЦ из чайного гриба экономически выгодным и простым [4].

В дальнейшем планируется использование полученной сухой БЦ в качестве основы для нанесения палладия и приготовление катализатора для реакции кросс-сочетания Сузуки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Lina Fu [et al.] / Carb. Pol. 2013. Vol. 92. P.1432.
2. Makoto Shoda [et al.] / Biotech. And Bioproc. Eng. 2005. Vol. 10. P. 1.
3. Shin-Ping Lin [et al.] / Rev. Paper. 2013. Vol. 20. P. 2191.
4. Гладышева Е.К. [и др.] / Вестник ВГУИТ. 2015. №3. С. 149

УДК 90.01.85

Рихмайер Артём Михайлович

ПРОГРАММНЫЙ МОДУЛЬ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ИТЕРАЦИОННОЙ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ

Руководитель: Белов А.Н.

Тверской Государственный Университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

В недавнее время все больше прикладных задач в физике, химии, биологии используют понятие динамических систем. Система является динамической, если для параметров, характеризующих ее состояние, задан так называемый оператор эволюции. По сути, оператор эволюции задает правило изменения параметров. В этом случае каждое последующее состояние полностью определяется предыдущим. Как правило, такое развитие происходит с течением времени.

Современный физический эксперимент невозможен без средств автоматизации. Для эффективного управления экспериментом часто бывает необходимо проводить анализ данных в режиме реального времени. Одна из таких задач – простейший анализ [2] развития динамической системы с помощью построения так называемой лестницы Ламерея – зависимости вида

$$x_{n+1} = f(x_n), \quad (1)$$

где x_n -параметр системы в n -м состоянии. Для реализации автоматизированного анализа в среде разработки LabView [1] был создан программный комплекс. Для поступающих данных в режиме реального времени строится зависимость вида (1). Вид диаграммы позволяет качественно оценить характер поведения динамической системы – например – наличие устойчивости в эволюции. В перспективах – создание программных модулей, позволяющих давать численную оценку сценариев эволюции на основе значений корреляционного интеграла.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. URL: www.labview.ru
2. Кузнецов С.П. Динамический хаос (курс лекций) М.: Издательство физико-математической литературы, 2006. – 356 с.

УДК 537.632

Ростова Татьяна Васильевна

ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ НА МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ВИСМУТСОДЕРЖАЩИХ МАГНИТНЫХ ПЛЕНОК ФЕРРИТ-ГРАНАТА

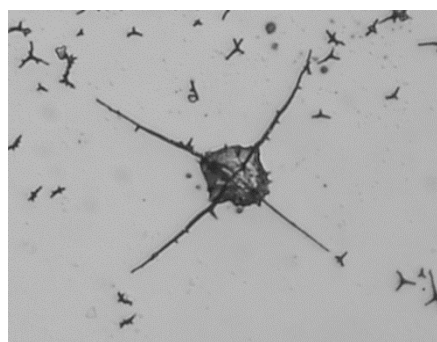
Руководитель: А. И. Иванова

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра прикладной физики

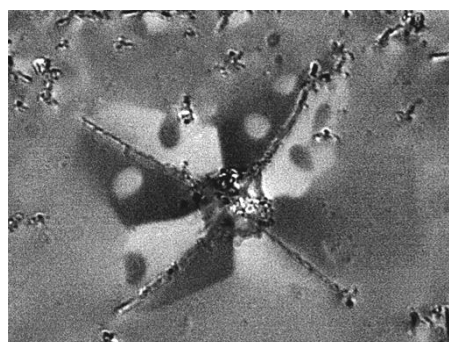
Эпитаксиальные структуры висмутсодержащих феррит-гранатов, выращиваемые на подложках из гадолиний-галлиевого граната обладают высокими магнитооптическими характеристиками и используются для изготовления различных устройств: оптические элементы для волоконно-оптических линий связи, магнитооптические модуляторы, быстродействующие пространственно временные модуляторы оптического диапазона, бесконтактные датчики магнитного поля.

В настоящей работе рассмотрено влияние дефектов, полученных путем микроиндентирования и склерометрии, а также под действием фемтосекундных линейно поляризованных лазерных импульсов на магнитные характеристики эпитаксиальных висмутсодержащих магнитных пленок феррит-граната (ЭМПФГ).

Получены результаты эволюции магнитной доменной структуры на дефектах в феррит-гранатовых пленках. Магнитооптическим методом полярного эффекта Керра наблюдали изменение конфигурации доменов при воздействии внешнего магнитного поля, нормального к плоскости пленки. Построены статические петли гистерезиса, демонстрирующие разность хода кривых размагничивания, обусловленную более высокими значениями коэрцитивной силы в дефектной области феррит-гранатовой пленки.



а



б

Рис.1 Оптическое изображение дефекта на феррит-гранатовой пленке (а); магнитные домены в области дефекта (эффект Керра) (б).

УДК 662.756.3+544.478

Рудь Дарья Викторовна

ПОЛУЧЕНИЕ УГЛЕВОДОРОДОВ ЖИРНОГО РЯДА РЕАКЦИЕЙ ДЕОКСИГЕНИРОВАНИЯ

Руководитель: А.А. Степачёва

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

Одной из основных задач исследований, проводимых в настоящее время, является разработка новых альтернативных источников энергии, что включает в себя поиск вариантов синтеза топлива из возобновляемых природных ресурсов. Такое топливо получило название биодизеля. Триглицериды, как основной компонент животного и растительного сырья, используются для получения кислот жирного ряда. Одним из способов переработки этих кислот, связанным с удалением кислорода карбоксильной группы, является процесс деоксигенирования. В результате образуются углеводороды жирного ряда, которые были отнесены к биодизел второго поколения (Грин-дизелю). По физико-химическим показателям Грин-дизель сходен с нефтяным дизельным топливом, но также обладает преимуществами классического биодизеля.

Однако при проведении процесса необходимы довольно жесткие условия. Применение катализаторов позволяет осуществить синтез при более низких показателях температуры и давления. Для подбора оптимальных параметров с применением катализаторов были проведены исследования с использованием катализатора на основе 1%Pd-СПС(Mn 270)

Эксперимент проводился со стеариновой кислотой в качестве исходного реагента в реакторе Parr Series 5000 Multiple Reactor в среде н-гексана при концентрации кислоты = 0,1 моль/л, массе катализатора = 0,05г, температуре 230 -300°C, давлении 0,2-2,0 МПа, и перемешивании 700 об/мин.

При анализе полученных данных были сделаны выводы о том, что оптимальной температурой является 255°C, так как с ростом температуры перестает действовать правило Вант-Гоффа, а при более низкой температуре наблюдаются побочные реакции. При анализе влияния изменения давления были выявлены следующие закономерности: при давлении выше 1.4 МПа скорость реакции постоянна, однако, при давлении выше 0.6 МПа снижается селективность процесса по н-гептадекану. При выбранных параметрах селективность процесса составляет 100% и полная конверсия достигается в течении 220 минут.

УДК 615.322

Русаков Максим Вячеславович

**ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ АНТРОПОГЕННЫХ ФАКТОРОВ
НА ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ БЕРЕЗЫ ПОВИСЛОЙ
СПЕКТРАЛЬНЫМИ МЕТОДАМИ**

Руководитель: С.Д. Хижняк

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Оценка и прогнозирование экологической безопасности окружающей среды становится приоритетным направлением развития в нашей стране. Благодаря многолетним биохимическим и морфологическим исследованиям было установлено, что береза повислая, хорошо приспособленная к условиям городской среды, подходит на роль биоиндикатора антропогенного воздействия.

Цель данной работы – изучение влияния антропогенных факторов на химический состав березы методами Фурье-ИК и УФ спектроскопии. Объектом исследования являлись листья березы, собранные 6 - 10 июня 2019 года в пяти районах города Твери – Пролетарский, СНТ Светлый, пл. Гагарина, Парк победы, Южный, а также фоновой зоне – в лесу на Сахаровском шоссе.

Для исследования образцы листьев березы были высушены и измельчены в вибрмельнице. Для регистрации ИК спектров образцов на спектрометре «Vertex 70» фирмы «BRUKER» были изготовлены таблетки с KBr, навески составляли ~22 и ~710 мг соответственно. Для регистрации электронных спектров на спектрометре «Evolution Array» фирмы «ThermoScientific» использовали водные и спиртовые экстракты.

Установлено, что в спектрах листьев березы проявляются различия в области валентных и деформационных колебаний. Значительно изменяются характеристические полосы поглощения с максимумом $\sim 1735 \text{ см}^{-1}$ (валентные колебания C=O групп) и $\sim 1435 \text{ см}^{-1}$ (деформационные колебания -CH₂- групп). В электронных спектрах обнаружены значительные колебания в содержании фенольных соединений различного типа. Таким образом, методы спектроскопии могут быть эффективно использованы для мониторинга отдельных компонентов окружающей среды и для оценки современного состояния природных объектов.

Данная работа выполнена на оборудовании ЦКП ТвГУ

УДК 548.57

Свешников Павел Александрович

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА МОРФОЛОГИЮ ПОВЕРХНОСТИ МОНОКРИСТАЛЛОВ ГЕРМАНИЯ

Руководитель: А. И. Иванова

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра прикладной физики

Кристаллы германия используются при изготовлении основных деталей оптических устройств, работающих в инфракрасном диапазоне длин волн. Оптическое качество монокристаллов германия зависит от плотности дефектов, характера легирующей примеси и шероховатости оптических поверхностей [1-2].

Целью данной работы явилось исследование влияния температуры на изменение профиля поверхности монокристаллов германия. Исследования проводились на монокристаллах германия, выращенных способом Чохральского в направлении [111], легированных сурьмой. Для определения шероховатости поверхности использовался метод бесконтактной оптической профилометрии. Измерения проводились на интерферометре NanoMap 1000WLI, нагревательный элемент размещали на предметном столике прибора.

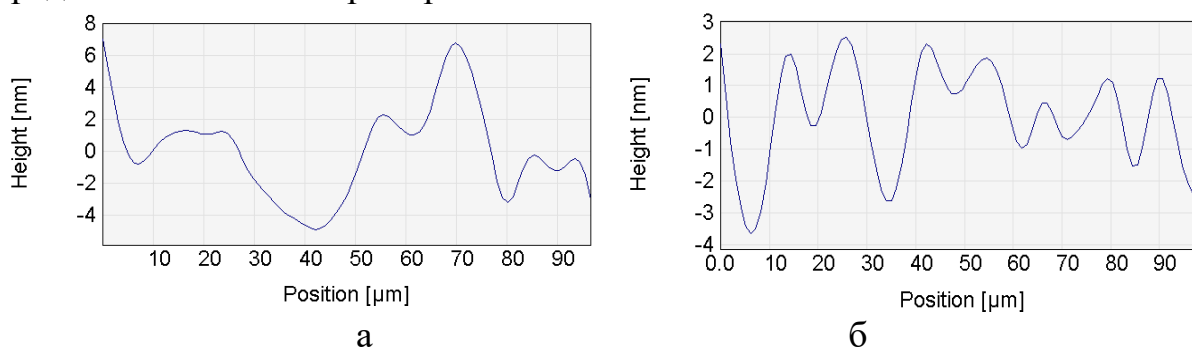


Рис.1. 2D-профили участка поверхности полированного кристалла германия при $T= 25^{\circ}\text{C}$ (а) и при $T= 65^{\circ}\text{C}$ (б).

Параметры шероховатости поверхности монокристалла при нагреве уменьшаются, а рельеф становится более периодичным (рис. 1). Длительный нагрев оптических элементов монокристаллов германия, приводит к изменению рельефа полированной поверхности вследствие перераспределения вещества и носит необратимый характер.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

- 1.И.А. Каплунов, А.И. Колесников, Е.И. Каплунова. Техника и технологии. №6, Т.3, С.324-333.2013.
2. И.А. Каплунов, А.И. Колесников, А.И. Иванова и др. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2015. №6. С. 89-94.2015 г.

УДК 544.147.3

Селезнева Татьяна Владимировна

**НАДМОЛЕКУЛЯРНОЕ СТРУКТУРИРОВАНИЕ
В НИЗКОКОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ВОДНЫХ РАСТВОРАХ
НА ОСНОВЕ L-ЦИСТЕИНА, N-АЦЕТИЛ-L-ЦИСТЕИНА
И АЦЕТАТА СЕРЕБРА**

Руководители: Д.В. Аверкин, Д.В. Вишневецкий

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Научный интерес вызывает изучение процессов самоорганизации супрамолекулярных систем на основе L-цистеина и N-ацтил-L-цистеина с ацетатом серебра (ЦСРац и НАЦац, соответственно), так как биосовместимость и низкая концентрация активных веществ предоставляют данным системам широкую область практического применения. Установлено, что при добавлении простых электролитов, таких как NaCl и Na₂SO₄, дополнительное структурирование происходит путем связывания заряженных агрегатов в растворе за счет взаимодействия ионов электролита с амино- и карбоксильными группами аминокислот, а также за счет специфического взаимодействия анионов с серебром в узлах организации исходных молекул и ионов.

Авторами были исследованы растворы ЦСРац и НАЦац при введении гептомолибдата аммония и растворы ПВС различной концентрации. Установлено, что введение гептомолибдата аммония с концентрацией 1 см³ в объеме от 0,02 мл в 1 мл супрамолекулярных растворов вызывает «перезарядку» исходных агрегатов, что регистрируется с помощью метода электрофоретического светорассеяния. В ЦСРац происходит изменение дзета-потенциала с +60мВ до -40мВ, в НАЦац с -50мВ до +30мВ. В УФ-спектрах систем с ЦСРац регистрируется отсутствие пика 275нм и увеличение интенсивности пика 398нм, в системах с НАЦац наблюдается отсутствие характеристических полос поглощения 260нм и 315нм.

Введение ПВС упорядочивает пространственную организацию агрегатов, о чем свидетельствуем уменьшение среднеквадратичного отклонения поверхностного заряда и стабильность систем под действием электрического поля: дзета-потенциал равен +35мВ в растворе НАЦац и, соответственно, +42мВ в ЦСРац. УФ-спектры для систем на основе НАЦац не регистрируют изменение полос поглощения, что говорит о сохранении исходной структуры растворов, однако в УФ-спектрах систем на основе ЦСРац уменьшается поглощение в районе 275нм.

Работа выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.

УДК 544.478+661.715.4

Семенова Аксинья Михайловна

КОНВЕРСИЯ ТЯЖЕЛЫХ НЕФТЕЙ В СВЕРХКРИТИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ

Руководитель: А.А. Степачёва

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

Нефть-это сложная смесь органических соединений, которая может содержать такие гетероатомы, как O, N, S, P. В составе нефти преобладают линейные углеводороды с углеродным числом 4-30, а также ароматические и нафтеновые соединения. Помимо ректификации, переработка нефти требует удаления гетероатомов и крекинга тяжелых углеводородов. Каталитическая гидроочистка нефтяных фракций является широко используемым методом, включающим такие реакции, как каталитический гидрокрекинг и гидродесульфирование. В настоящее время большой интерес представляют исследования, направленные на разработку новых подходов к гидроочистке нефти. Эти исследования делятся на две основные группы: (i) поиск новых высокоэффективных катализаторов и (ii) поиск технологических условий, позволивших повысить технологичность процесса.

Одним из таких перспективных направлений является использование сверхкритических флюидов в гидроочистке нефтяных фракций. Вода является одним из широко используемых сверхкритических растворителей, поскольку ее уникальные свойства в сверхкритическом состоянии позволяют эффективно растворять нефтяные углеводороды. Кроме того, СКВ может служить донором водорода, что позволяет проводить процесс в инертной атмосфере. Другими донорами водорода являются сверхкритический тетралин, гексан, додекан и легкие спирты. Все исследования показывают, что применение сверхкритических растворителей, помимо полного удаления гетероатомов и высокой конверсии исходного сырья, приводит к снижению вязкости и плотности получаемого продукта, а также препятствует коксованию катализатора.

В данной работе проведено исследование гидрокрекинга модельных соединений нефти (антрацена) в среде сверхкритических растворителей. Исследовано влияние состава растворителя, а также присутствия водорода. В работе использованы катализаторы переходных металлов, нанесенные на полимерную матрицу сверхсшитого полистирола.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 20-08-00080).

УДК 662.756.3+544.478

Симанова Алена Юрьевна

СЕЛЕКТИВНОЕ ВОССТАНОВЛЕНИЕ КАРБОКСИЛЬНОЙ ГРУППЫ СТЕАРИНОВОЙ КИСЛОТЫ

Руководитель: А.А. Степачёва

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

Одним из основных процессов в химической технологии является переработка природных масел. Гидрирование на медных, платиновых или палладиевых катализаторах один из примеров таких процессов. Гидрированию могут подвергаться как двойные связи остатков ненасыщенных высших кислот, так и их карбоксильные группы [1].

Наиболее известным методом получения высших спиртов является гидрирование карбоксильных групп жирных кислот и их производных в присутствии активных катализаторов на основе металлов платиновой группы [2].

В данной работе был изучен процесс жидкофазного гидрирования стеариновой кислоты для получения высших спиртов в присутствии неполярного растворителя толуола. Процесс проводился при температуре 150 °С и давлении водорода 3.0 МПа. В качестве катализаторов использовались палладий, платина и рутений, нанесенные на различные подложки. Образцы жидкой фазы анализировались методом газовой хроматографии масс-спектрометрии.

Исследования показали, что при использовании 1% Pt/MN270, 1%Pt/MN100 и 1% Ru/MN500 продуктами гидрирования были октадекан и стеариновый альдегид. Образование спирта не происходило на протяжении всего процесса. Катализаторы 1%Pd/MN270, 1%Ru/MN100 и 1%Pt/MN500 оказались наиболее селективными к образованию стеарилового спирта.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Rios L.A., Restrepo G.M., Valencia S.H. et al. // *Scientia et Technica* Año XII, 2006, Vol.31, p. 221.
2. *Российский рынок олеохимии* // М.: ID-Marketing. 2012. 62 с.

УДК 538.9

Синкевич Артем Игоревич

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ СОЕДИНЕНИЯ SmCo_5 ПО ДАННЫМ МСМ

Руководитель: Е.М. Семенова

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физики конденсированного состояния

Для высокоанизотропных магнетиков, обладающих магнитокристаллической анизотропией типа «ось легкого намагничивания» существует метод оценки поверхностной плотности энергии доменных границ (γ), основанный на измерении ширины замыкающих доменов на базисной плоскости [1]. Среднее расстояние между доменными границами на поверхности такого кристалла L связано с параметром γ следующим образом:

$$L = \frac{\beta 4\pi\gamma}{I_s^2}$$

где I_s – намагниченность насыщения, β – числовой коэффициент, зависящий от типа доменной структуры.

Впервые эта методика была реализована в работе [1] на соединении SmCo_5 при этом домены на поверхности кристалла регистрировались средствами оптического металлографического микроскопа с помощью полярного эффекта Керра. Целью настоящей работы являлась оценка параметров доменов того же соединения по данным магнитно-силовой микроскопии (МСМ). При сканировании использовалась двухпроходная методика, при которой на первом проходе регистрируется рельеф образца, а на втором топография полей рассеяния с учетом рельефа. Показано, что измеряемые значения ширины доменов будут существенно зависеть от высоты, на которой находится зонд при сканировании, поскольку, начиная с некоторого значения, преимущественно регистрируются поля рассеяния от основных доменов, а не от замыкающих.

Исследования выполнены на оборудовании центра коллективного пользования ФГБОУ ВО ТвГУ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Bodenberger, R. Zur Bestimmung der Blochwandenergie von einachsigen Ferromagneten / R. Bodenberger, A. Hubert // Phys. Stat. Sol. (a). 1977. V.44. P.K7.

УДК 54.021, 54.04, 54.056

Скобин Михаил Игоревич

ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСНОГО СОЕДИНЕНИЯ ГЕПАРИНА С ГАДОЛИНИЕМ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ И ТВЕРДОМ СОСТОЯНИИ

Руководитель: М.А. Феофанова

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

Методом потенциометрии исследованы сложные химические равновесия с участием ионов гадолиния (III) и полимерного биолганда гепарина (рис. 1). рН-метрический анализ проведен в модельной системе, соответствующей по значениям температуры (37°C), ионной силе (фоновый электролит 0.15 М NaCl) параметрам плазмы крови.

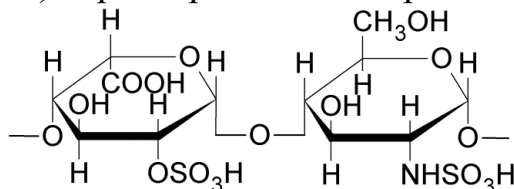


Рис. 1. Мономерное звено гепарина

На основе данных рН-метрии проведено математическое моделирование, построена диаграмма распределения комплексных форм (рис. 2) и получено значение $\lg\beta$ ($[\text{GdHep}]$) = 4.28 ± 0.04 . Определено оптимальное значение рН для синтеза среднего комплекса $[\text{GdHep}]$.

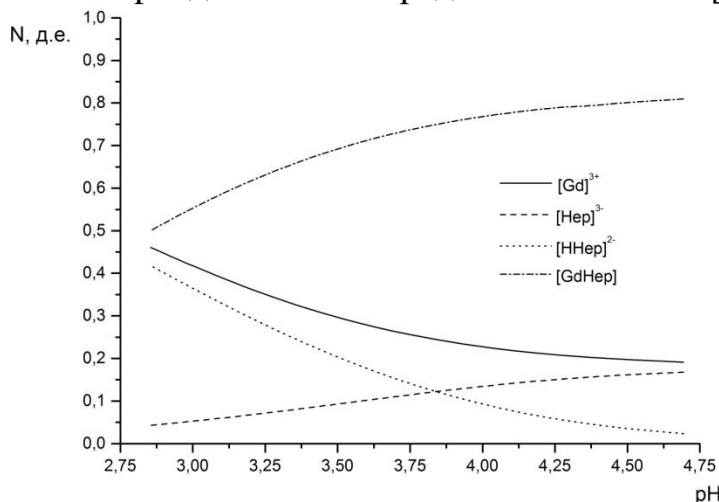


Рис. 2. Диаграмма распределения комплексных форм в системе Gd^{3+} - Hep^{3-}

Синтез $[\text{GdHep}]$ проводился смешением растворов хлорида гадолиния с раствором натриевой соли гепарина в эквивалентных количествах. Выпадал бесцветный аморфный осадок.

Качественный и количественный состав образца определен методами электронно-зондового анализа с помощью энергодисперсионного спектрометра и растрового электронного микроскопа и ТГ/ДСК термического анализа на установке.

УДК 631.811.98

Смирнова Екатерина Витальевна

**ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ЛИГНИНА
В КАЧЕСТВЕ ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНЫХ СТИМУЛЯТОРОВ
РОСТА *LINUM USITATISSIMUM***

Руководитель: Е.В. Ожимкова

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

В настоящее время актуальной является проблема разносторонней и рациональной утилизации лигносодержащих отходов, количество которых ежегодно возрастает в связи с увеличением объемов химической переработки растительного сырья, в том числе, и древесины хвойных и лиственных пород. Экологически оправданным способом утилизации крупнотоннажных лигнинсодержащих отходов могут являться технологии получения препаратов лигнина, которые можно использовать в качестве стимулятора роста растений.

В представленной работе исследована ростостимулирующая активность образцов лигнина, полученных по методике, представленной в работе [1]. Для проведения экспериментов точную навеску лигнина растворяли в диметилсульфоксиде, после чего готовили серию водных растворов с концентрациями от 10^{-1} до 10^{-15} г/л. В качестве контрольного эксперимента использовали проращивание семян с поливом водой. Семена льна проращивали на фильтровальной бумаге в чашках Петри в климатостате КС-200 при температуре $22 \pm 1^\circ\text{C}$ в течение 7 суток. В каждой из трех повторностей всех вариантов опыта использовали по 20 штук семян. Критериями эффективности воздействия растворов лигнина на развитие льна в опытах служили всхожесть семян, общая длина и сырая биомасса проростка.

При анализе полученных экспериментальных данных установлено, что обработка семян льна раствором лигнина с концентрацией 10^{-13} г/л оказывала сильное влияние на всхожесть семян (92,5% при 82,5% в контроле), а обработка раствором с концентрацией 10^{-15} г/л - на увеличение прироста биомассы ростков льна (0,6043 г при 0,5374 г в контроле).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Wood extracted lignin as a plant growth regulator/E. Korotkova, A. Pranovich, E. Ozhinkova, S. Willfor // The 7th Nordic Wood Biorefinery Conference: book of abstracts (Stockholm, Sweden, March 28-30, 2017). – P. 192-193.

УДК 541.6:539:538

Соколов Александр Викторович

РОЛЬ РАСТВОРИТЕЛЯ ПРИ ПОЛУЧЕНИИ ВЫСОКОПРОЧНЫХ ВОЛОКОН СВМПЭ МЕТОДОМ ГЕЛЬ-ФОРМОВАНИЯ

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

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

В технологии получения высокопрочных волокон из сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ) методом гель-формования важное значение отводится растворителю – вазелиновому маслу (ВМ), массовая доля которого составляет 97%. Растворитель многократно используется в процессе. Роль ВМ заключается в увеличении сегментальной подвижности макромолекул полимера при растворении реакторного порошка СВМПЭ на первом этапе вытяжки и получении гель-нити с кратностью ~ 25-35. Характеристики гель-нити и стабильность её получения зависят от качества очистки ВМ от продуктов деструкции СВМПЭ (ПД) и физико-химических свойств растворителя.

Далее растворитель удаляют из гель-нити с помощью н-гексана (до 0.5% массы) с целью формирования более компактной структуры элементов уже сухой нити при последующем вытягивании в воздушной среде до кратности более 60. Однако остаточный растворитель остается в порах нити, что может влиять на её физико-механические свойства.

Целью работы является изучение влияния остаточного растворителя в нити СВМПЭ на её упруго-прочностные свойства, а также термоокислительной деструкции (ТОД) на качество растворителя.

Методами ДСК и механических испытаний установлено, что у образцов нити с различной массовой долей ВМ и кратностью вытяжки 32 (после первой стадии вытягивания) и 64 (после второй стадии) с увеличением концентрации остаточного растворителя, увеличивается линейная плотность нити, и снижаются прочность, модуль упругости и степень кристалличности. Присутствие остаточного ВМ в нити определяли методами рентгеновской дифракции и ИК спектроскопии.

Методами оптической (УФ и ИК) спектроскопии установлена корреляция между интенсивностью окрашивания растворителя и концентрацией хромофорных С=О группировок. Методом ротационной вискозиметрии показано увеличение сдвиговой вязкости при увеличении степени ТОД и концентрации ПД в растворителе. Анализ степени ТОД растворителя и качества его очистки от ПД осуществляли спектрофотометрическим методом цветности и турбодиметрии.

УДК 538.9

Стречень Артем Степанович

ТРАНСФОРМАЦИЯ МИКРО-, НАНО- И ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ СПЛАВОВ SmZrCoCuFe В РЕЗУЛЬТАТЕ ТЕРМИЧЕСКИХ ОБРАБОТОК

Руководитель: Е.М. Семенова

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физики конденсированного состояния

Проведение термических обработок исходных сплавов SmZrCoCuFe меняет их микро- и наноструктуру таким образом, что появляются регулярные наноразмерные центры задержки доменных границ, обеспечивающие высокую коэрцитивную силу таких материалов [1].

Исходные сплавы были получены методом индукционной плавки. Термообработки включали гомогенизацию при 1170°C в течение 3 часов, и последующий 20-часовой отжиг при 800°C с двумя режимами охлаждения: быстрая закалка до комнатной температуры (ТО-1) и медленное охлаждение до 400°C со средней скоростью 2°C/мин и охлаждение до комнатной температуры (ТО-2).

На рис.1 представлены изображения доменной структуры (ДС) сплава после ТО-1 и ТО-2. ДС выявлялась методом полярного эффекта Керра на оптическом микроскопе Neophot 30. Сравнивая конфигурацию доменов после двух ТО видно, что после медленного охлаждения в сплаве формируется анизотропная структура, которую отражают домены.

В работе проводится анализ трансформации ДС в зависимости от изменений микро- и наноструктуры гетерогенных соединений типа SmZrCoCuFe.

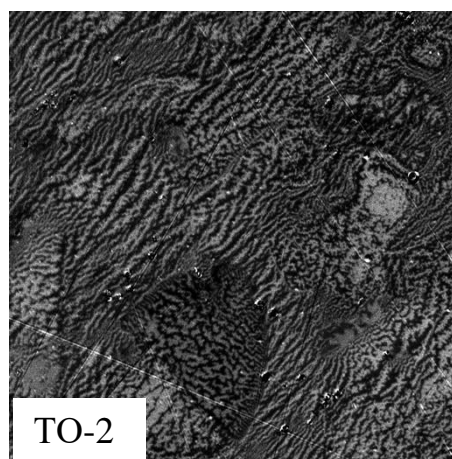
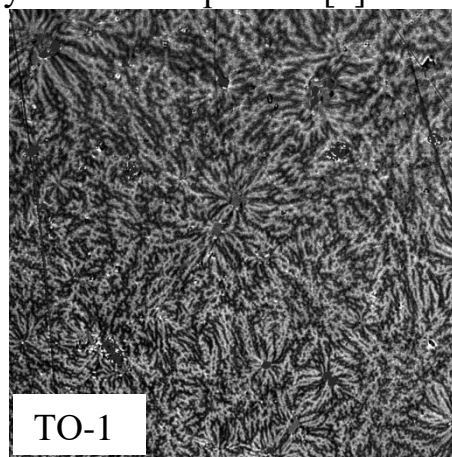


Рис.1. Доменная структура на базисной плоскости литого образца SmZrCoCuFe после ТО

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Semenova E.M., Lyakhova M.B., Lukin A.A., Karpenkov A.Yu., Lukina E.A. // Metal Science Heat Treatment. 2018.

УДК 543.226:541.8

Суворова Александра Марковна

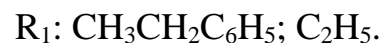
ТЕРМИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ С ТЕТРАХЛОПАЛЛАДАТ АНИОНОМ

Руководитель: Л.И. Ворончихина

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра органической химии

Современный подход к решению проблемы создания новых каталитических систем в органическом синтезе включает применение ионных жидкостей (ИЖ). В случае, если в качестве анионов в ИЖ выступают галогениды переходных металлов, эти ИЖ имеют большой мезофазный ряд и проявляют одновременно каталитические, магнитные, электрические и другие свойства. Известно, что в зависимости от природы катиона и аниона ИЖ обладают различной термической стабильностью. Знание термической стабильности ИЖ позволяет определить тот температурный интервал, в котором можно их использовать без особых мер предосторожности.

В настоящей работе изучена термическая стабильность тетрахлорпалладатов аммония (1) и пиридиния (2) в сравнении с термостабильностью исходных галогенидов четвертичных солей:



Термическую стабильность соединений изучали термогравиметрическим методом на воздухе в интервале температур 20-500°C. Как показали исследования, замена галоида в исходных галогенидах на металлатный PdCl_4^{-2} анион приводит к повышению термостойкости ионной жидкости. Так, практически все исследованные комплексы устойчивы до 200°C и разлагаются в интервале 220-300°C, в то время как четвертичные соли разлагаются в интервале 160-250°C. Причиной повышенной термостабильности тетрахлорпалладатов, вероятно, является трудность реализации переходного состояния из-за большого объема аниона PdCl_4^{-2} . Среди всех исследованных соединений тетрахлорпалладаты пиридиния более термически стабильны, нежели комплексы аммония.

УДК 661.185.3 + 541.6 + 504.06

Суставова Татьяна Александровна

СВОЙСТВА ПОЛИАМФОЛИТНЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ГИДРОЛИЗОВАННОГО ПОЛИАКРИЛАМИДА

Руководитель: В.А. Липин

Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и
дизайна Высшая школа технологии и энергетики, г. Санкт-Петербург
Кафедра физической и коллоидной химии

Особенность строения полиамфолитных гидрогелей, а именно наличие одновременно положительно и отрицательно заряженных групп, позволяет использовать их в качестве сорбентов для удаления окрашенных примесей из растворов, удаления ионов тяжелых Рb (II) и Cd(II) из сточных вод и других целей [1].

Целью работы являлось получение полиамфолитных гидрогелей на основе частично гидролизованного полиакриламида и алифатических диаминов (этилендиамина и диаминопропана) и исследование их комплексообразующих свойств.

Полиамфолитные гидрогели получали путем смешения частично гидролизованного полиакриламида и алифатических диаминов.

Качественный анализ полученных полиамфолитных гидрогелей проводили методом ИК-спектроскопии. Было исследовано влияние рН и ионной силы водного раствора на степень набухания полиамфолитных гидрогелей. Изучение сорбционных свойств полученных гидрогелей проводили на модельном водном растворе индигокармина.

Комплексообразующие свойства полученных полиамфолитных гидрогелей исследовались на примере водного раствора $Pb(NO_3)_2$. Было установлено, что в результате взаимодействия полиамфолитных гидрогелей с раствором, содержащим ионы Pb^{2+} , часть этих ионов переходит в осадок, а часть связывается с полимерной сеткой гидрогелей.

Было также доказано, что полученные гидрогели являются эффективными сорбентами для удаления из растворов окрашенных примесей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Copello Guillermo Javier, Diaz Luis E, Dall' Orto Viviana Campo Adsorption of Cd(II) and Pb(II) onto a one step-synthesized polyampholyte: Kinetics and equilibrium studies // Journal of hazardous materials. 2012. Vol. 212-218. P. 374-381.

УДК 547.1

Томилов Вячеслав Олегович

РОЛЬ МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ В КОМПЛЕКСНОМ ЛЕЧЕНИИ ГНОЙНО-ВОСПАЛИТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ

Руководитель: А.В. Кадомцева

ФГБОУ ВО «Приволжский исследовательский медицинский университет»

МЗ России

Кафедра общей химии

Наночастицы металлов проявляют не только выраженную биологическую активность, но и бактериостатическое и бактерицидное действия. В результате проведенных авторами [1] экспериментальных исследований было отмечено, что использование суспензий наночастиц металлов в изотоническом растворе оказывается эффективным при местном лечении гнойных ран, в различной степени отмечается подавление микробной флоры и регенеративное действие. Наиболее выраженное антисептическое и регенеративное действие отмечается у наночастиц меди, эффективно влияют на регенерацию ран и наночастицы цинка, не проявляя при этом четкого антибактериального эффекта. Наночастицы железа обладают минимальным эффектом на гнойные раны, контаминированные клиническими штаммами *Staphylococcus aureus*. Авторами [2] оценено влияние серебросодержащих кремов на репаративные процессы, динамика цитологической и гистологической картины ран у пациентов с гнойно-некротическими формами. Антибактериальный и противогрибковый эффект перевязочного материала на основе серебра показал клиническую эффективность в отношении грамположительных, грамотрицательных бактерий и кандид. Резистентность микроорганизмов к серебросодержащему перевязочному материалу не коррелирует со спектром и уровнем их чувствительности к антибиотикам [3].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Бабушкина И. В. Наночастицы металлов в лечении экспериментальных гнойных ран. // Саратовский научно-медицинский журнал. 2011.7(2). С.530–533.
2. Зиновьев Е.В., Барташевич Е.В., Прохоренко А.В., Жарков А.В. Применение серебросодержащих кремов и раневого покрытия как пути улучшения системы местного лечения ран у пациентов с гнойно-некротическими формами синдрома диабетической стопы. Вестник Новгородского государственного университета. 2010. 59. с. 42-48
3. Довнар Р.И., Смотровин С.М., Васильков А.Ю., Жмакин А.И. Антибактериальный и противомикробный эффект перевязочного материала, содержащего наночастицы серебра. Новости хирургии. 2010. 18(6). с. 3-11
4. Кадомцева А.В., Обьедков А.М. Восстановление GeCl_4 в присутствии катализатора на основе модифицированного NiCl_2 . Неорганические материалы. 2017. Т. 53. № 12. С. 1342-1347 [Kadomtseva A.V., Ob'edkov A.M. REDUCTION OF GeCl_4 IN THE PRESENCE OF A CATALYST BASED ON MODIFIED NiCl_2 . Inorganic Materials. 2017. Т. 53. № 12. С. 1312-1318].

УДК 544.773.423

Травников Юрий Николаевич

ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА РАЗМЕР КВАНТОВЫХ ТОЧЕК СУЛЬФИДА ЦИНКА

Руководитель: О.Е. Журавлёв

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра органической химии

Сульфид цинка относится к наиболее распространенным и хорошо известным полупроводниковым материалам, которые излучают в видимой области спектра при оптическом или электрическом возбуждении. Интерес к таким соединениям постоянно растет на протяжении последних двух десятилетий из-за изучения так называемых квантовых точек, то есть наноразмерных кристаллов, обладающих уникальными оптическими свойствами.

В настоящей работе проведено исследование влияния концентрации и природы ионных жидкостей на размеры наночастиц сульфида цинка в золях. В качестве ионных жидкостей были использованы гексафторфосфаты и тетрафторбораты N-алкилпиридиния в растворе ацетонитрила. Для оценки среднего размера наночастиц полупроводника по величине сдвига края фундаментального поглощения спектральным методом были записаны спектры поглощения в УФ-области золь сульфида цинка. Для золь сульфида цинка полученных в растворах гексафторфосфата N-додецилпиридиния, величина среднего размера наночастиц возрастает с ростом концентрации ZnS в золе, о чем свидетельствует смещения полос поглощения в спектрах при увеличении концентрации прекурсоров. Поэтому, можно говорить о дорастивании наночастиц при добавлении очередных порций реагентов, осаждении на них дополнительного сульфида цинка как на зародышах. С другой стороны, рост размера относительно не велик, т.е. вероятнее всего одновременно происходит образование и рост новых частиц, на что указывает увеличение интенсивности поглощения. Для N-додецилпиридиний тетрафторбората при низких концентрациях прекурсоров наблюдается образование преимущественно частиц одинакового размера. При увеличении концентрации прекурсоров происходит рост размеров наночастиц сульфида цинка в золе и наблюдается высокая полидисперсность золь. Таким образом, для получения наночастиц сульфида цинка с минимальным отклонением размеров наночастиц целесообразно использование 20%-ного раствора ионной жидкости – гексафторфосфата N-додецилпиридиния в ацетонитриле.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 18-33-00890.

УДК 537.226.4

Усачева Валерия Дмитриевна

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ГИСТЕРЕЗИС В КОБАЛЬТ – И ХРОМСОДЕРЖАЩИХ КРИСТАЛЛАХ ТРИГЛИЦИНСУЛЬФАТА

Руководитель Н.Н. Большакова

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физики конденсированного состояния

Настоящая работа поставлена с целью получения информации о диэлектрических свойствах и процессах переключения кристаллов триглицинсульфата (ТГС), содержащих одновременно два лиганда: Co^{2+} и Cr^{3+} . Концентрации примесей определялись в образцах методом химического анализа. Процессы переключения образцов исследованы с помощью схемы Сойера-Тауэра на частоте 50 Гц. Доменная структура кристаллов выявлена методом растровой электронной микроскопии.

Установлено, что для кристаллов ТГС: $\text{Co}^{2+}:\text{Cr}^{3+}$ петли диэлектрического гистерезиса прямоугольны и практически не искажены. По оси ординат петли гистерезиса смещены относительно нулевого уровня, что соответствует униполярному состоянию образцов. В таблице приведены результаты измерений и расчета диэлектрической проницаемости ($\epsilon_{\text{эф}}$) и элементов петли гистерезиса для исследуемых кристаллов при комнатной температуре.

№	Co^{2+} , 10^{-3} вес. %	Cr^{3+} , 10^{-3} вес. %	$\epsilon_{\text{эф}}, 10^4$	$P, 10^{-2}$ Кл·м ⁻²	$E_c,$ $10^4 \text{В} \cdot \text{м}^{-1}$	η	$\text{tg} \delta$
1	0	0	1,40	2,0	3,2	0,30	0,10
2	0,9	< 0,01	1,18	1,1	10,9	0,29	0,17
3	0,9	< 0,01	0,30	0,4	14,3	0,20	0,11
4	2,1	< 0,01	0,50	0,7	17,3	0,18	0,19
5	1,6	1,1	1,10	1,7	17,3	0,80	0,17
6	1,1	2,9	1,37	1,8	14,9	0,01	0,18
7	1,4	7,1	0,28	0,5	20,1	0,18	0,50

Полевые зависимости переключаемой поляризации для большинства кристаллов ТГС: $\text{Co}^{2+}:\text{Cr}^{3+}$ резко возрастают в интервале полей $(30 - 90) \cdot 10^4 \text{В} \cdot \text{м}^{-1}$ и выходят на насыщение в полях порядка $(80 - 150) \cdot 10^4 \text{В} \cdot \text{м}^{-1}$. Доменная структура кристаллов ТГС: $\text{Co}^{2+}:\text{Cr}^{3+}$ состоит из матрицы основного домена, внутри которой располагаются линзовидные микродомены с противоположной ориентацией вектора спонтанной поляризации, что объясняется определяющей ролью ионов хрома, которые создают заряженные хелатные комплексы.

УДК 544.478

Уткина Алена Владимировна

АЛКОКСИКАРБОНИЛИРОВАНИЕ ПАРА-БРОМАНИЗОЛА В ПРИСУТСТВИИ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ Pd/MN100

Руководитель: А.В. Быков

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

В качестве катализаторов, используемых для получения сложных эфиров в результате реакции арилгалогенидов с нуклеофилами в присутствии монооксида углерода, широкое применение находят гомогенные комплексы палладия. Такие системы обычно работают при избыточном давлении монооксида углерода, и с трудом отделяются от реакционной массы.

В ходе работы в качестве гетерогенной каталитической системы, беспрепятственно удаляющейся из зоны реакции, был рассмотрен катализатор на основе ацетата палладия, стабилизированный в промышленной полистирольной сетке MN100 в присутствии трифенилфосфина. В качестве модельного субстрата был выбран п-броманизол, а реакция проводилась при атмосферном давлении СО.

В ходе исследования варьировались температура реакционной массы, тип растворителя (спирты, ДМФА, ДМФ), а также основания (трибутиламин, гидроксиды щелочных, щелочноземельных металлов, карбонаты). Время реакции составляло 24 часа.

Состав реакционной массы контролировался методом газовой хроматомасс-спектрометрии, стабильность полимерной матрицы подтверждалась методом инфракрасной спектроскопии диффузного отражения, а степень восстановленности палладия методом рентгенофотоэлектронной спектроскопии.

Было показано, что использование гидроксида кальция позволяет провести реакцию с наибольшей скоростью в серии тестов и достичь 100% интегральной селективности при 100% конверсии в среде протонного растворителя (бутанола-1). Использование апротонных растворителей во всех случаях приводило к резкому падению скорости и селективности.

Также было показано, что полимерная матрица в ходе реакционного цикла остается стабильной, значительной адсорбции трифенилфосфина на ее поверхности не наблюдается.

Тестирование невосстановленной и предварительно восстановленной в токе водорода при 300 °С каталитических систем показало, что предварительное восстановление системы не приводит к выигрышу в скорости и селективности процесса.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ 19-08-00334

УДК 547.821.3

Ушанова Ольга Сергеевна

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ ТРИЭТИЛАМИНА И 3-МЕТИЛПИРИДИНА

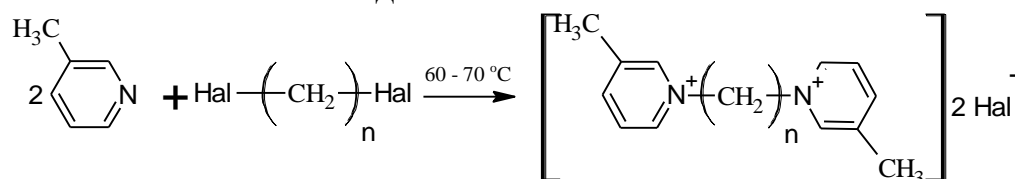
Руководитель: О.Е. Журавлёв

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра органической химии

Ионные жидкости (ИЖ) - это расплавы органических солей, находящиеся в жидком состоянии в широком интервале температур, в ряде случаев ниже комнатной. Как правило, ИЖ состоят из объемных органических катионов и неорганических или органических анионов. Из-за несимметричности структуры ИЖ следует разнообразие ее свойств. Наиболее важными характеристиками ИЖ являются высокая полярность, ионная проводимость, низкая температура плавления и широкий интервал жидкого состояния, высокая термическая стабильность, способность растворять комплексы металлов, соли, органические вещества и газы. Изучение взаимосвязи структура-свойство для ионных жидкостей является актуальной задачей.

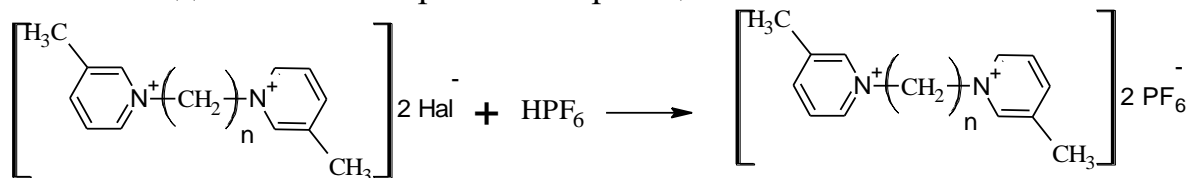
В настоящей работе были получены ионные жидкости на основе бис-четвертичных солей триэтиламина и 3-метилпиридина с различной длиной алкильного заместителя ($n = 2-4$). В качестве анионов выступали тетрафторборат- и гексафторфосфат-анионы (BF_4^- , PF_6^-).

Исходные бис-четвертичные соли были получены по реакции нуклеофильного замещения триэтиламина и 3-метилпиридина (γ -пиколин) с различными алкилгалогенидами:



где Hal: Cl^- , Br^- ; $n = 2-4$.

Ионные жидкости синтезированы по реакции метатезиса:



где Hal: Cl^- , Br^- ; $n = 2-4$.

Полученные соединения представляют собой вещества белого или жёлтого цвета, хорошо растворимые в полярных органических растворителях (спирт, ацетон, ацетонитрил). Структура ионных жидкостей подтверждена данными ИК-спектроскопии. Чистота подтверждена ТСХ.

УДК 537.226.4

Феногенова Владилина Владиславовна

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДВУХСЛОЙНЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ НИТРИД АЛЮМИНИЯ/НИТРИД АЛЮМИНИЯ ГАЛЛИЯ

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

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра физики конденсированного состояния

Полярные слои нитридов обладают пьезоэлектрическими и пироэлектрическими свойствами, благодаря чему являются перспективными материалами для микроэлектромеханики (МЭМС) и инфракрасной (ИК) техники. Исследования полярных свойств широкозонных полупроводников показали, что к числу наилучших пьезоэлектрических материалов относятся тонкие слои нитрида алюминия (AlN) и твердых растворов на его основе, характеризующиеся сочетанием высоких значений электромеханических коэффициентов, высокой теплопроводности и низкой электропроводности. Совершенствование технологии их роста позволит получать тонкие монокристаллические пластины с максимальными пьезо- и пироэлектрическими параметрами.

Монокристаллические слои AlN/AlGaN толщиной приблизительно 150 мкм выращены методом хлор-гидридной эпитаксии на подложках SiC/Si. После выращивания монокристаллов подложка удаляется. Ориентация монокристаллических пластин соответствовала направлению [0001], совпадающему с направлением спонтанной поляризации.

Исследования диэлектрических характеристик в переменном электрическом поле проводились с помощью измерителя иммитанса E7-20. Зависимости диэлектрической проницаемости и тангенса угла диэлектрических потерь получены в диапазоне 25 – 10⁶ Гц. Определены вольт-фарадные (C-V) характеристики исследуемых структур в диапазоне от –40 до +40 В.

Частотные зависимости диэлектрической проницаемости свидетельствует о ее значительной дисперсии во всем исследуемом диапазоне, причем диэлектрическая проницаемость практически монотонно уменьшается от 400 (при 25 Гц) до 30 (при 10⁶ Гц). Необходимо отметить, что диэлектрическая проницаемость для монокристаллов AlN и GaN в этом частотном диапазоне практически не зависит от частоты и составляет приблизительно 10. Наличие заметной дисперсии диэлектрических свойств может быть связано с существованием объемно-зарядовой поляризации, обусловленной межфазной границей AlN/AlGaN. Поведение C-V характеристик определяется направлением приложенного поля смещения.

УДК 541.49:615.33

Филяровская Навна-Мария

ОДНОСТАДИЙНЫЙ СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ АМИНОКИСЛОТЫ L-ЦИСТЕИН С ГАЛОГЕНИДАМИ МЕТАЛЛОВ

Руководители: В.С. Лагусева, С.Д. Хижняк

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Изучение процессов гелеобразования в супрамолекулярных гидрогелях на основе низкомолекулярных соединений (аминокислот, пептидов) представляет научный и практический интерес, т.к. подобные системы находят применение в различных областях – косметологии, медицине, пищевой промышленности. В данной работе изучаются низко-концентрированные гидрогели на основе серосодержащей аминокислоты L-цистеин (L-Cys), нитрата серебра и галогенидов щелочных металлов (хлоридов и бромидов), полученные одностадийным методом. Целью работы является изучение процессов самосборки и механизма гелеобразования в системах с различным молярным соотношением исходных компонентов под влиянием хлорид и бромид анионов с помощью различных физико-химических методов.

Исследуемые образцы были получены так называемым одностадийным методом – путем последовательного смешения компонентов в определенном порядке при интенсивном перемешивании. Молярное соотношение исходных компонентов ($Ag^+/L-Cys$) в образцах меняли в интервале 1,33 – 2,00; содержание хлорид и бромид анионов варьировали в диапазоне 0,5 – 2,0 мМ; концентрация L-Cys составляла 3,0 мМ. Процессы структурирования в гель-системах изучали с помощью методов УФ спектроскопии, динамического светорассеяния (ДСР), вискозиметрии, сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). Установлено, что при одинаковой концентрации и соотношении компонентов динамическая вязкость образца с хлорид-ионом выше, чем образца с бромид-ионом. Кроме того, наблюдается возрастание вязкости образца с хлорид-ионом во времени, тогда как вязкость образца с бромидом изменяется незначительно. Устойчивость во времени (более 60 дней) образцов гидрогелей, полученных одностадийным способом, – главное отличие от образцов, полученных двухстадийным способом. Стабильность гелей, полученных одностадийным способом, определяется структурой супрамолекулярных цепочек – фрагментов гель-сетки, что подтверждается данными УФ спектроскопии. Таким образом, разная методика получения супрамолекулярных гидрогелей на основе L-Cys и нитрата серебра позволяет регулировать прочность и устойчивость образцов.

Данная работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии центра коллективного пользования ТвГУ.

УДК 621.376.3

Цай Полина Владимировна

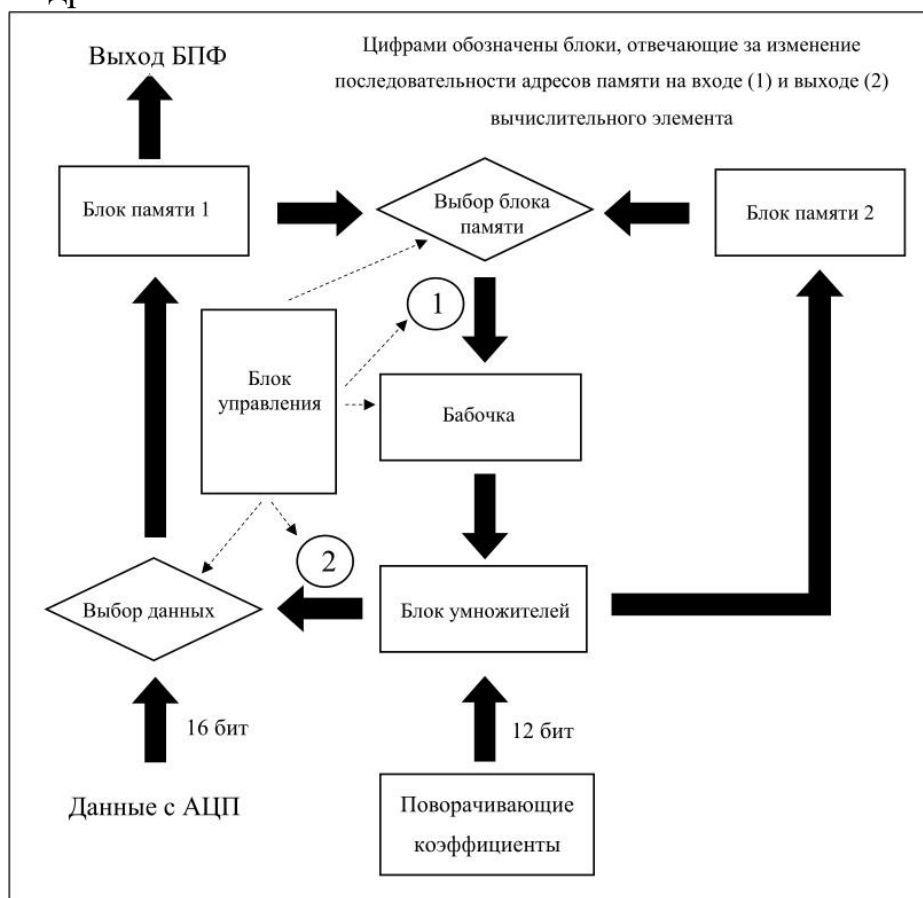
РЕАЛИЗАЦИЯ МОДУЛЯ БПФ НА VHDL. ЧАСТЬ 1

Руководитель: А.А. Репин

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра общей физики

Применение БПФ в осциллографе позволяет получить сигнал сразу в частотной и временной областях, чтобы произвести его спектральный анализ. Разработана структура модуля БПФ на 1024 входных отсчета с использованием алгоритма Radix-4, что позволяет существенно ускорить весь процесс расчета и экономит ресурсы. Данный модуль был реализован для автоподстройки осциллографа через нахождение частоты максимальной амплитуды входного сигнала.

Главной проблемой при использовании алгоритма Radix-4 является вероятность записи промежуточных данных по адресу, где уже хранится другой результат. Для устранения данной ситуации был разработан метод, который позволяет записывать данные только в свободные от важной информации адреса.



Блок-схема работы БПФ, описывающая взаимосвязь компонентов между собой при помощи блока управления.

УДК 547.854.4

Чигина Мария Дмитриевна

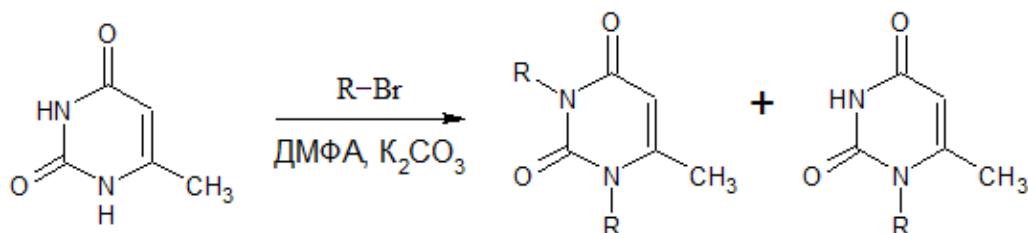
ИЗУЧЕНИЕ РЕАКЦИИ АЛКИЛИРОВАНИЯ 6-МЕТИЛУРАЦИЛА

Руководитель: С.А. Темникова

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра органической химии

Производные урацила, проявляющие свои снотворное, анаболическое, противоязвенное, противовоспалительное, противовирусное, антиоксидантное, антикатаболическое и другие свойства, имеют обширную фармакологическую применяемость. В настоящее время известны не все возможные действия подобных веществ, поэтому в настоящее время является актуальным не только синтез новых соединений, но и анализ и усовершенствование уже известных методов. Целью работы является выявление наиболее эффективных условий реакции алкилирования и ацилирования 6-метилурацила и сравнение алкилирующей способности галогеналканов.

Синтез проведен по схеме:



где R = C₄H₉, C₈H₁₉.

Проведен синтез моно- и диалкил производных 6-метилурацила в среде диметилформаида (ДМФА) с помощью катализаторов тетрабутиламмонийбромид (ТБАБ) / тетраэтиламмонийбромид (ТЭАБ) при взаимодействии с бромбутаном и бромоктаном. Полученные смеси веществ были разделены экстракцией хлороформом при различных значениях pH.

Исследованы физические и химические свойства синтезированных соединений: температура плавления и растворимость. Строение подтверждено данными ИК-спектроскопии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Алкилирование производных пиримидина этиленхлоргидрином / В. П. Кривоногов., Г. А. Толстикова, Ю. И. Муринов, Л. В. Спирихин, А. А. Фатыхов, И. Б. Абдрахманов // Журнал прикладной химии. - 1997. - Т.70. – Вып. 2. – С. 315-320.
2. Алкилирование производных пиримидина этиленхлоргидрином / Г. Г. Козлова, Ю. Н. Чернышенко, Л. В. Спирихин, И. Б. Абдрахманов // Журн. органич. химии. - 2006. - Т. 42, № 11. - С. 1723-1726.

УДК 663.918.21:54.062

Шамахов Вячеслав Игоревич

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МАССОВЫХ ДОЛЕЙ ЗОЛЫ И ВЛАГИ В ОБРАЗЦАХ КАКАО-ПОРОШКА

Руководитель: Ю.А. Рыжков

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра органической химии

Какао-порошок является основным продуктом переработки какао бобов и кондитерским изделием, состоящим из тонкоизмельченного и частично обезжиренного тёртого какао. Содержит в своём составе от 12 до 20% масла какао и до 7,5% влаги.

По виду обработки различают два вида продукта:

- неперепарированный – измельчённый жмых, массовая доля жира около 17%; рН водного раствора около 6,4; массовая доля золы около 6%;
- перепарированный – обработанный щёлочью. После обработки улучшается стойкость суспензии напитка, вкус и аромат, рН=7, зольность 9%

Разнообразен минеральный состав какао (средние значения), мг/100г: К– 2400,0, Са– 18,0, Mg– 90,0, Р– 771,0, Fe– 11,7, Na– 7,0 [1].

В данной работе для оценки качества какао-порошка по физико-химическим показателям и их соответствия параметрам техническим условиям [2] определена зольность продукта и установлена массовая доли влаги в нём. В качестве объектов исследования выбраны образцы какао-порошка различных производителей.

Определение массовой доли минерального остатка фиксируется гравиметрически: навеску сжигают в муфельной печи при 600 °С, после чего охлаждают и фиксируют массу. Определение массовой доли влаги в составе определяется методом высушивания образца до постоянной массы. После охлаждения сравнивают её начальное и конечное значения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Школьникова М.Н., Елесина В.В., Севодина К.В., Аверьянова Е.В. Оценка качества и идентификация какао-порошка и шоколада. Бийск: Издательство Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова. 2014, 54 с.
2. СТБ 1205-2000. Государственный стандарт Республики Беларусь. Какао-жмых и какао-порошок производственный, технические условия. Минск: Госстандарт. 2000, 10 с.

УДК 544.147.3

Шарапова Любовь Алексеевна

ИЗУЧЕНИЕ МИНЕРАЛЬНОГО СОСТАВА ВОЛЖСКОЙ ВОДЫ НА ТЕРРИТОРИИ ТВЕРСКОГО РЕГИОНА

Руководитель: В.М. Никольский

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

Возросший спрос на пресную воду вызван увеличением численности населения, промышленным развитием и расширением орошаемого земледелия. Поэтому сегодня серьезной является проблема ее качества, вызванная техногенным воздействием на водные ресурсы.

Осуществлен химический анализ проб воды реки Волга в ее истоке (д. Волговерховье), в районе впадения в неё реки Селижаровки (в пределах пгт. Селижарово) и при впадении в неё реки Тьмаки в г.Твери. Помимо наших экспериментов в 2009 г. институтом водных проблем РАН также проводилось исследование реки Волга на участке от истока до г.Твери [1].

Исследования показали, что за десять лет верхневолжская вода не претерпела существенных изменений. Она имеет нейтральную реакцию и отличается низким содержанием солей. В истоке Волги отмечено высокое содержание железа, что характерно для болотных вод. В Волгу впадает вытекающая из озера Селигер река Селижаровка (Селигеровка), почти наполовину пополняя Волгу селигерской водой. Приток характеризуется малым содержанием железа и повышенным, по сравнению с Волгой, содержанием солей. Это оказывает значительное влияние на химический состав воды Волги, делая её более минерализованной, но с меньшим содержанием ионов железа по сравнению с водой истока. Повышение минерализации, как правило, обусловлено вкладом сульфатов, хлоридов и гидрокарбонатов. Результаты исследований показывают, что от истока реки Волга до г. Твери наблюдается некоторая трансформация химического состава воды, что обусловлено как природными, так и антропогенными факторами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Л.А. Шарапова, В.М. Никольский ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ В СОСТАВЕ ВОДЫ РЕКИ ВОЛГИ ОТ ИСТОКА ДО ТВЕРИ / Инновационные материалы и технологии: материалы Междунар. науч.-техн. конф. молодых ученых, г. Минск, 9–10 янв. 2020г. – Минск: БГТУ, 2020.

УДК 66.097.3

Шкерина Кристина Николаевна

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ПРОВЕДЕНИЯ РЕАКЦИИ СУЗУКИ НА СКОРОСТЬ ПРЕВРАЩЕНИЯ 4-БРОМАНИЗОЛА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КАТАЛИЗАТОРА Pd/MN100

Руководитель: Л.Ж. Никошвили

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

Реакция кросс-сочетания Сузуки является эффективным инструментом получения продуктов тонкого органического синтеза, таких как лекарственные препараты, косметические средства, жидкие кристаллы. Традиционно в качестве катализаторов реакции Сузуки используют гомогенные комплексы палладия. В рамках данной работы исследовано поведение безлигандного палладиевого катализатора на основе сверхсшитого полистирола марки MN100, синтезированного с применением ацетата палладия в качестве прекурсора.

Каталитическое тестирование образца Pd/MN100-R, предварительно восстановленного в токе водорода, проводилось на примере модельной реакции кросс-сочетания 4-броманизола (4-БрАн) и фенилбороновой кислоты (ФБК) в присутствии основания NaOH. Реакция проводилась в смеси этанол/вода (4:1) при варьировании скорости перемешивания, концентрации Pd, количества NaOH и ФБК, а также температуры процесса.

Было показано, что изменение скорости перемешивания в диапазоне от 500 до 1300 об./мин практически не оказывает влияния на скорость превращения 4-БрАн. При исследовании влияния концентрации Pd на скорость реакции кросс-сочетания было обнаружено, что скорость реакции прямо пропорциональна количеству палладия, при этом порядок реакции кросс-сочетания по палладию, рассчитанный по времени полупревращения 4-БрАн, близок к 1. Варьирование количества ФБК и NaOH при температуре 60°C позволило установить следующее оптимальное соотношение: 2,5 ммоль ФБК и 3,0 ммоль NaOH. В данных условиях достигается 100% конверсия 4-БрАн за 40 минут. Исследование влияния температуры показало, что при повышении температуры реакции от 40°C до 70°C скорость превращения 4-БрАн возрастает пропорционально. При этом с повышением температуры повышается селективность по продукту кросс-сочетания (4-метоксибифенилу): с 85% до 92% при значениях конверсии 4-БрАн, близких к 100%.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-08-00429).

УДК 547.854.4

Шубин Алексей Дмитриевич

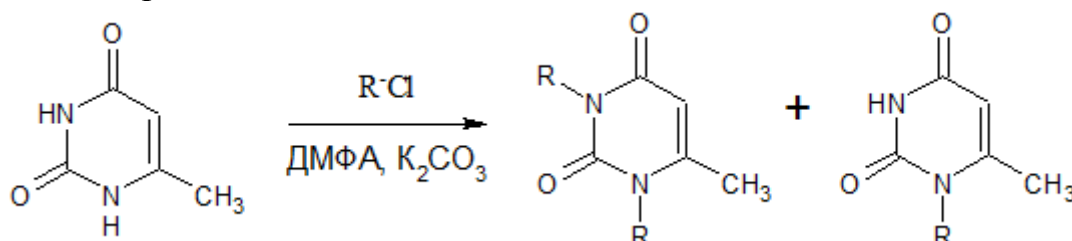
СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ 6-МЕТИЛУРАЦИЛА

Руководитель: С.А. Темникова

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра органической химии

Замещенные урацила обладают разнообразными биологическими свойствами и успешно используются во многих областях медицины. Так, ряд производных пиримидина (метилурацил, пентоксил, оксиметилурацил (иммурег), зидовудин, калия оротат, фторурацил, фторафур и др.) используется в медицинской практике в качестве лекарственных средств, проявляющих противоопухолевое, противовоспалительное, антиоксидантное, анаболическое, противоязвенное, антикатаболическое и другие виды действия. Широкий спектр фармакологической активности существенным образом определяется их структурным сродством к эндогенным пиримидиновым основаниям (нуклеотидам, нуклеозидам), играющих важную роль в механизмах обмена веществ и наследственности. В этой связи производные пиримидин-2,4-диона представляют интерес в качестве перспективных биологически активных соединений. Целью работы является ацилирование 6-метилурацила с целью синтеза новых биологически активных соединений, стимулирующих регенерацию тканей.

Синтез проведен по схеме:



где $R = \text{HOC}_6\text{H}_4\text{CO}$, $\text{ClOCC}_2\text{H}_4\text{CO}$.

Ацилирование 6-метилурацила проведено хлорангидридами салициловой и янтарной кислот в среде диметилформамида (DMF) с использованием комплекса межфазного катализатора тетрабутиламмонийбромид (ТБАБ) и K_2CO_3 . Смесь веществ разделена с помощью экстракции хлороформом при различных значениях pH. Синтезированные соединения очищены перекристаллизацией.

Исследованы физические и химические свойства синтезированных соединений: температура плавления и растворимость. Строение подтверждено данными ИК-спектроскопии.

УДК 537.226.4

Шустова Ольга Александровна

ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В ТОНКИХ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛАСТИНАХ ALN/ALGAN

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

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физики конденсированного состояния

Полярные материалы, обладающие пьезоэлектрическими, пироэлектрическими и сегнетоэлектрическими свойствами, широко используются в качестве функциональных элементов различных электротехнических устройств в современной электронике: акустические преобразователи, микроэлектромеханические устройства (MEMS), устройства памяти, инфракрасные датчики и сенсоры, тепловизоры и т.п. Среди таких материалов особое место занимают линейные пироэлектрики, которые обладают спонтанной поляризацией в широком температурном интервале вплоть до точки плавления. К таким материалам относится нитрид алюминия (AlN) и твердые растворы на его основе.

Монокристаллические слои AlN/AlGaN толщиной приблизительно 150 мкм выращены методом хлор-гидридной эпитаксии на подложках SiC/Si. После выращивания подложка была удалена. Ориентация слоев соответствовала направлению [0001], совпадающему со спонтанной поляризацией.

Исследования пироэлектрической активности монокристаллических пластин выполнены динамическим методом с использованием модулированного лазерного излучения с длиной волны 980 нм. Частота модуляции теплового потока варьировалась в пределах 1 – 10³ Гц.

При воздействии на образцы модулированного теплового излучения появлялся биполярный пироэлектрический отклик, который изменял форму и величину с ростом частоты. Воздействие теплового потока на поверхность образцов со стороны слоя AlGaN приводит к появлению пироэлектрического отклика, носящего сложный характер. В начальный момент воздействия теплового потока наблюдается выброс тока в противофазе с опорным сигналом, воспроизводящим форму тепловых импульсов. Затем, по мере нагревания двухслойной системы тепловым потоком амплитуда отклика уменьшается, в некоторый момент времени ток обращается в ноль, меняет направление на противоположное (смена фазы пироэлектрического отклика) и сравнительно медленно нарастает. Такое поведение пироэлектрического отклика может свидетельствовать о наличии в монокристаллических пластинах AlN/AlGaN приповерхностного слоя со встречной поляризацией.

УДК 577.1:543.422.27

Шухина Ксения Александровна

ПРОЦЕССЫ САМООРГАНИЗАЦИИ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ГЛИЦИНА, НИТРАТА СЕРЕБРА И ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА

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

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Процесс самоорганизации представляет собой явление спонтанной ассоциации как минимум двух или более компонентов, приводящее к образованию протяжённых полимолекулярных ансамблей. В данной работе процессы самоорганизации изучены на примере низкоконцентрированных водных систем на основе глицина (Gly), нитрата серебра (AgNO_3) и поливинилового спирта (ПВС). Благодаря карбоксильной, гидроксильной и аминогруппам, системы Gly-ПВС способны образовывать многочисленные межмолекулярные связи. Полученные системы Gly- AgNO_3 -ПВС могут найти применение в медицине, в частности, как плёночные материалы для заживления ран. Кроме того, благодаря нитрату серебра плёнки обладают антибактериальной активностью.

Были исследованы двухкомпонентные (Gly-ПВС) и трёхкомпонентные (Gly- AgNO_3 -ПВС) образцы с различным объёмным соотношением и концентрациями исходных компонентов (ПВС 5 и 10%, Gly 0,01 и 0,1М). Из исследуемых систем были получены прозрачные плёнки методом полива. Полученные образцы были изучены с помощью различных физико-химических методов: УФ, ИК-спектроскопии, динамического светорассеяния, вискозиметрии и рН-метрии.

Формирование наноагрегатов в образцах было доказано с помощью ДСР. Установлено, что на размер и кинетику образования наноассоциатов влияет концентрация, объёмное соотношение исходных компонентов и время выдержки образца. Сдвиг максимума полосы поглощения в области $3290\text{--}3269\text{ см}^{-1}$ в ИК-спектрах плёнок Gly-ПВС с разной концентрацией полимера (1, 5, 10%) и соотношением компонентов свидетельствует о множественных межмолекулярных взаимодействиях глицина и ПВС. Данные вискозиметрии подтверждают, что Gly, связывая макромолекулы ПВС в качестве гибкого линкера, влияет на пространственную конфигурацию молекул полимера и, как следствие, на структурированность изученных систем в целом.

Работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии ЦКП ТвГУ.

УДК 537.226.4

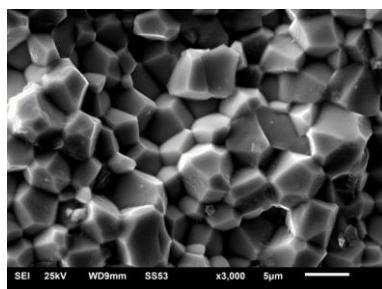
Щеглова Анастасия Игоревна

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ РЕЛАКСОРА $(\text{Pb}_x\text{La}_{1-x})(\text{Zr}_y\text{Ti}_{1-y})\text{O}_3$

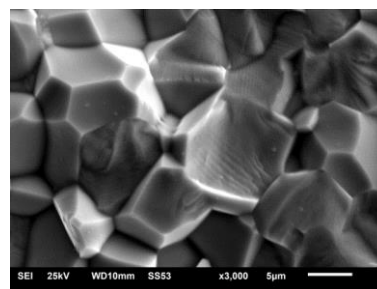
Руководитель: И.Л. Кислова

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физики конденсированного состояния

Соединение PLZT – $(\text{Pb}_x\text{La}_{1-x})(\text{Zr}_y\text{Ti}_{1-y})\text{O}_3$ относится к семейству кислородных оптических керамических соединений и является типичным представителем материалов с релаксорным поведением. Различные составы такой керамики PLZT обычно описываются соотношениями La:Zr:Ti как $x/y/z$, где x , y , z – концентрации элементов La, Zr и Ti соответственно, ат.%.
Были проведены исследования структуры образцов на растровом электронном микроскопе JEOL JSM6610LV. Установлено, что размеры зерен увеличиваются с увеличением концентрации La (рис.1)



La 5 %



La 12 %

Рис.1 Изображения зернистой структуры керамических соединений PLZT, полученные с помощью СЭМ.

Диэлектрические свойства образцов исследовались с помощью измерителя иммитанса E7-20 в диапазоне частот от 25 Гц до 1 МГц. Во всех образцах наблюдалась значительная частотная зависимость диэлектрической проницаемости, а именно: с увеличением частоты значения ϵ уменьшаются на 250-300 по сравнению со значениями диэлектрической проницаемости в низкочастотной области.

Проводились измерения диэлектрической проницаемости в процессе нагрева и охлаждения. Во всех образцах максимум диэлектрической проницаемости носил размытый характер. Кроме того, наблюдался большой температурный гистерезис в процессе нагрева и охлаждения, что характерно для сегнетоэлектриков-релаксоров.

УДК 577.322.5

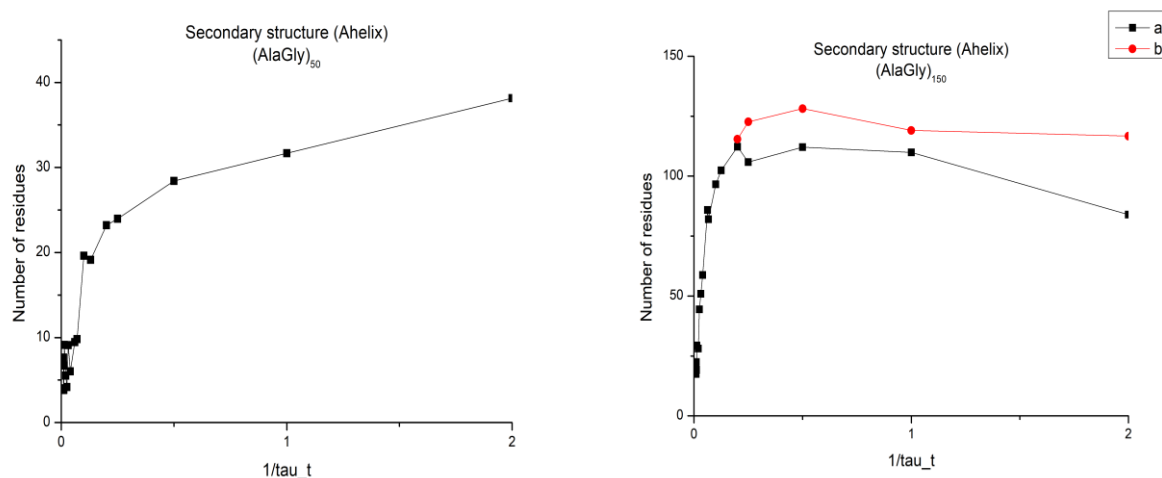
Эрендженова Анастасия Александровна

ВЛИЯНИЕ ВЯЗКОСТИ СРЕДЫ НА ФОРМИРОВАНИЕ ВТОРИЧНОЙ СТРУКТУРЫ МОДЕЛЬНЫХ ПОЛИПЕПТИДОВ

Руководитель: К.В. Шайтан

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
Биологический факультет, Кафедра биоинженерии

Методами Ланжевеновской динамики при различных значениях параметров среды было изучено сворачивание модельных полипептидных последовательностей, состоящих из 50 и 150 аминокислотных остатков с чередованием аланина и глицина. Условия моделирования аналогичные описанным в работах Шайтана К.В. [1, 2]. Стартовые конформации соответствовали полностью развернутой структуре цепи. Изменение диссипативных свойств среды моделировалось за счет вариации параметров термостата. Показано, что сворачивание рассмотренных полипептидных последовательностей при эффективной вязкости среды порядка вязкости воды происходит преимущественно в альфа-спиральные конформации. Уменьшение вязкости среды ниже некоторого порога приводит к сворачиванию в случайную конформацию (рисунок).



Зависимость количества аминокислотных остатков в α -спиральных конфигурациях при различных значениях коэффициента вязкости, для 50 и 150 звенной цепи а- длина траектории 2 нс; в – длина траектории 4 нс

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Шайтан К. В., Ложников М. А. и Кобельков Г. М. // Биофизика. 2016. Т. 61, С. 629.
2. Шайтан К. В., Ложников М. А. и Кобельков Г. М. // Биофизика. 2017. Т. 62, С. 249.

УДК 544.18+547.495.9

Юлмасов Глеб Сергеевич

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТАЛОКОМПЛЕКСОВ ЦЕФОТАКСИМА

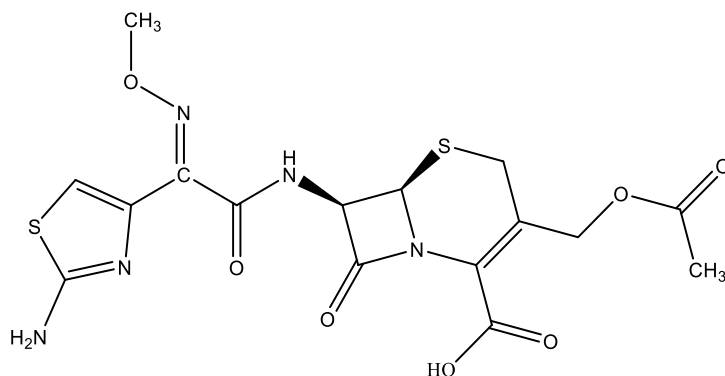
Руководитель: В.Г. Алексеев

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

Внутрикомплексные соли цефотаксима состава $\text{Co}(\text{Cxm})_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, $\text{Ni}(\text{Cxm})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $\text{Cd}(\text{Cxm})_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$, $\text{Cu}(\text{Cxm})_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ и $\text{Zn}(\text{Cxm})_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ получены в виде осадков путем взаимодействия водных растворов хлоридов металлов с натриевой солью цефотаксима (NaCxm). После промывания холодной водой на фильтре, осадки высушены при 80°C в сушильном шкафу. Состав образцов определен методами рентгеноспектрального электронно-зондового анализа с помощью энергодисперсионного спектрометра INCA Energy 350, используемого в качестве аналитической приставки к растровому электронному микроскопу JEOL JSM-6610LV и термогравиметрии на установке синхронного термического анализа Netzsch STA 449 F3 Jupiter. Исследование методом ИК спектроскопии на приборе Bruker Equinox 55 показало смещение полос валентных колебаний $\nu(\text{C}=\text{O})$ амидной, бета-лактамной групп и $\nu(\text{COO}^-)_{\text{as}}$ карбоксилатной группы в сторону более высоких частот по сравнению со спектром NaCxm , что можно расценивать как координацию этих групп с металлами.

Отнесение полос поглощения в ИК спектрах образцов

Образец	$\nu(\text{C}=\text{O})$, β -лактам	$\nu(\text{C}=\text{O})$, амид	$\nu(\text{COO}^-)$
$\text{NaCxm} \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$	1759	1647	1612
$\text{Co}(\text{Cxm})_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$	1769	1672	1618
$\text{Ni}(\text{Cxm})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1778	1682	1618
$\text{Cu}(\text{Cxm})_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$	1769	1674	1616
$\text{Zn}(\text{Cxm})_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	1772	1668	1620
$\text{Cd}(\text{Cxm})_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	1768	1680	1618



Цефотаксим

УДК 544.478+665.666.5

Яблокова Наталья Сергеевна

МАГНИТООТДЕЛЯЕМЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ДЕОКСИГЕНИРОВАНИЯ ЖИРНЫХ КИСЛОТ

Руководитель: А.А. Степачёва

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

Ограниченность ископаемых источников энергии вызывает интерес к возобновляемым видам топлива. Биомасса является наиболее перспективным ресурсом для производства энергии. Большое внимание исследователей привлекли различные соединения растительной биомассы, такие как целлюлоза, лигнин, гемицеллюлозы и растительные масла. В настоящее время триглицериды являются одним из наиболее доступных возобновляемых источников сырья для производства биотоплива. Деоксигенирование растительных масел и их компонентов является одной из альтернатив классической переэтерификации, приводящей к получению первого поколения биодизельного топлива. Удаление кислорода из триглицеридов путем деоксигенирования происходит в присутствии классических катализаторов NiMo/Al₂O₃, CoMo/Al₂O₃ или благородных металлов (Pt/C, Pd/C). Однако для получения насыщенных бескислородных соединений требуется использование достаточно большого количества водорода, что делает полученное топливо неконкурентоспособным.

В данной работе изучен новый способ конверсии жирных кислот в углеводородное топливо без потребления водорода. Деоксигенирование стеариновой кислоты как модельного соединения проводили в среде сверхкритического н-гексана в присутствии магнитоотделяемых рутенийсодержащих катализаторов. Изучено влияние носителя на выход целевых продуктов конверсии стеариновой кислоты в углеводороды. Для оценки влияния носителя были выбраны три типа пористых материалов: оксид кремния, оксид церия и сверхсшитый полистирол (СПС). Катализатор на основе СПС обеспечивает более высокую степень конверсии стеариновой кислоты, а также наибольшую селективность к C₁₅-C₁₇ углеводородам (более 90 мас. %).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 19-08-00318).

УДК 544.032.4

Ярмак Дарья Викторовна

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА КАТИОННЫХ ПАВ НА ОСНОВЕ 2-ДИМЕТИЛАМИНОЭТАНОЛА

Руководитель: Ю. А. Рыжков

Тверской государственной университет, г. Тверь
Кафедра органической химии

Настоящая работа посвящена синтезу катионных ПАВ из класса ЧАС на основе 2-диметиламиноэтанола (ДМАЭ) с последующим определением критической концентрации мицеллообразования (ККМ), размера частиц в разных температурных условиях и точки Крафта с целью установления оптимальных условий для практического использования ПАВ.

Четвертичные соли сложного эфира 2-диметиламиноэтанола получены кватернизацией алкилгалогенидами (в данной работе - 1-бромбутаном) с использованием абсолютного ацетона в качестве растворителя в течение 4-5 часов при 60-70°C. Сложный эфир ДМАЭ получен азеотропной этерификацией аминспирта лауриновой кислотой при 150-160°C в течение 4 часов. Очистка четвертичных солей конечных продуктов производилась промыванием абсолютным эфиром и двукратной перекристаллизацией из смеси абсолютный эфир-ацетон (3:1) [1].

Для определения ККМ и точки Крафта полученных ПАВ использовался кондуктометрический метод. Значения электропроводности устанавливались при разных температурах в диапазоне от 13 до 39°C. Наблюдаемые значения ККМ варьируются от $2,2 \times 10^{-3}$ до $3,5 \times 10^{-3}$ моль/л, при этом с увеличением температуры ККМ уменьшается, что согласуется с известной температурной интерпретацией ККМ для ионных ПАВ [2]. На основании полученных данных по электропроводности установлена величина точки Крафта, равная 17°C, что определяет нижний температурный интервал для данного класса соединений.

Методом динамического светорассеяния (ДСР) определен размер частиц в растворах ПАВ с концентрацией на порядок ниже, чем концентрация ККМ, с целью сохранения монодисперсности системы. При увеличении концентрации размер молекул уменьшается от 190,0 нм до 141,8 нм. Прослеживается зависимость между размером частиц и временем приготовления раствора (свежеприготовленные растворы дают меньший показатель). Увеличение температуры растворов ПАВ приводят к небольшому увеличению размеров частиц вне зависимости от концентрации раствора.

УДК 544.773.32:542.8

Ярусов Максим Вадимович

ОЦЕНКА МОРФОЛОГИИ ЭМУЛЬСИЙ МЕТОДОМ ОПТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Руководители: П.М. Пахомов, А.И. Маркова

Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Эмульсия является лиофильной дисперсной системой, состоящей из двух или более жидких фаз, одна из которых (дисперсная фаза), является непрерывной. Эмульсии имеют широкое применение в промышленности, медицине и сельском хозяйстве. Однако для изучения их морфологии используется дорогостоящее оборудование, которое требует больших трудозатрат в использовании и последующей обработке данных. В связи с этим важно иметь простой, доступный и точный метод оценки размера капель в эмульсиях и их распределении по размерам при различных концентрациях. Нами предлагается достаточно простой и эффективный метод УФ спектроскопии [1]. Целью данной работы являлось выяснение возможности использования метода УФ спектроскопии для изучения морфологии эмульсий.

В качестве образцов для исследования использовалась эмульсия – сливки (капли молочного жира в воде), для определения распределения размеров частиц при разных концентрациях системы. Основным методом оценки морфологии эмульсий являлась УФ спектроскопия, в качестве контролирующего метода был использован метод динамического светорассеяния (ДСР).

За счет разницы в показателях преломления матрицы и наполнителя исследуемая система относится к «мутным» сильно рассеивающим свет средам. Спектроскопическим методом определены размеры капель в системе и их распределение при различных концентрациях. Установлено, что при увеличении концентрации дисперсной фазы происходит агрегация капель в эмульсии. Данные полученные методом УФ спектроскопии совпадают с данными контролирующего метода ДСР, полученными с одними и теми же образцами, что говорит об эффективности данного метода.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Маркова А. И., Хижняк С. Д., Пахомов П. М. // Вестник ТвГУ. Сер. «Химия». 2019. №2(36). С. 71-81.

Научное издание

Физика, химия и новые технологии

*Сборник материалов
всероссийской научно-технической конференции
молодых учёных
в рамках Каргинских чтений*

Отпечатано с авторских оригиналов.

Подписано в печать 27.04.2020. Формат 60x84 ¹/₁₆.

Усл. печ. л. 8,2. Тираж 300. Заказ № 109.

Редакционно-издательское управление
Тверского государственного университета

Адрес: 170100, г. Тверь,

Студенческий пер. 12, корпус Б.

Тел. РИУ (4822) 35-60-63.