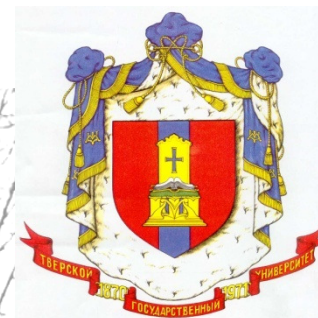


ФОНД СОДЕЙСТВИЯ РАЗВИТИЮ
малых форм предприятий в научно-технической сфере



XXIV КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ

с международным участием

**Всероссийская научно-техническая
конференция молодых учёных**

«Физика, химия и новые технологии»

ТВЕРЬ 2017

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

XXIV КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ
с международным участием

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

23 марта 2017 года

г. Тверь

Тезисы докладов

ТВЕРЬ 2017

УДК 54(082)

ББК Г.я431

Р32

Ответственные за выпуск:

доктор химических наук П.М. Пахомов
кандидат химических наук С.Д. Хижняк

Р32 XXIV Каргинские чтения: тезисы докладов. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2017. – 132 с.

Областная, а затем 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.

Настоящий сборник издан на средства РФФИ (грант №17-03-20022Г).

© Тверской государственный университет, 2017

© Авторы статей, 2017

Д.В. Аверкин

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ САМООРГАНИЗАЦИИ В
НИЗКОКОНЦЕНТРИРОВАННЫХ СИСТЕМАХ НА ОСНОВЕ
АМИНОКИСЛОТЫ L-ЦИСТЕИН И АЦЕТАТА СЕРЕБРА

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

Благодаря биологической активности исходных компонентов, супрамолекулярные системы на основе водных растворов L-цистеина (L-Cys) и ионов серебра могут найти применение в качестве матриц для получения различных фармакологических препаратов широкого спектра действия. В работе были исследованы процессы самоорганизации и механизм гелеобразования в низкоконцентрированных растворах и гидрогелях на основе L-цистеина и ацетата серебра (AgAcet).

Установлено, что в системах L-Cys-AgAcet сразу после смешивания исходных компонентов в результате процессов самоорганизации происходит образование олигомерных цепочек, состоящих из молекул меркаптида серебра. Образуется так называемый цистеин-серебряный раствор (ЦСР). Исследование образцов на основе ЦСР с различными концентрацией исходных компонентов и их молярным отношением с помощью метода динамического светорассеяния (ДСР) доказало процесс формирования структурированных фрагментов – супрамолекулярных агрегатов, имеющих преимущественно бимодальное распределение частиц по размерам. Измерение дзета-потенциала образцов ЦСР показало, что агрегаты в этих системах имеют положительный заряд, величина которого варьируется в зависимости от концентрации исходных компонентов.

Добавление в ЦСР водного раствора электролита (например, сульфата или хлорида натрия, марганца) вызывает гелеобразование, однако, образующиеся гидрогели являются слабыми из-за низкой концентрации компонентов (~0,01%) и легко разрушаются при механическом воздействии. Вискозиметрические исследования показали, что введение электролита в ЦСР приводит к увеличению вязкости системы в 3-5 раз. Прочность образующихся гелей и устойчивость их во времени варьируется в зависимости от типа и концентрации электролита – инициатора гелеобразования.

Микрофотографии образцов на основе L-цистеина и ацетата серебра, полученные с помощью просвечивающей электронной микроскопии, подтверждают факт самоорганизации в низкоконцентрированных ЦСР и формирование пространственной сетки в гелях.

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ L-ЦИСТЕИНА И АЦЕТАТА СЕРЕБРА

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

Низкоконцентрированные гидрогели на основе аминокислоты L-цистеина и солей серебра являются интересным объектом для изучения процессов самоорганизации в наноструктурированных системах на основе низкомолекулярных соединений, особенно, принимая во внимание простоту их синтеза, возможность модификации и практическую значимость. Как показали исследования, гелеобразование в таких системах является сложным процессом, основанным на процессах самоорганизации. Основная цель работы – определение порога гелеобразования в системах на основе водных растворов L-цистеина и ацетата серебра, которые представляют научный интерес и как модельные системы для выполнения компьютерных расчетов. Объектами исследования являлись растворы и гели, полученные при разном содержании исходных компонентов.

В ходе исследований выяснено, что после смешивания растворов L-цистеина и ацетата серебра в системе в результате процессов самоорганизации происходит образование супрамолекулярных полимерных цепочек типа $(-AgS(R)...AgS(R)...AgS(R)-)_n$, где R – остаток цистеина. При этом формируется прекурсор геля – цистеин-серебряный раствор (ЦСРац). Образование гидрогеля инициируется добавлением электролита, при этом анионы электролита действуют как дополнительные скрепки, приводящие к уплотнению супрамолекулярных цепочек и формированию трехмерной сетки. Для определения порога гелеобразования была получена серия водных растворов на основе L-цистеина и ацетата серебра, в которых концентрация аминокислоты варьировалась в пределах 0,6 – 3,0 мМ, а соотношение исходных компонентов Ag^+/Cys составляло 1,23 и 1,33. Процессы самоорганизации в системах контролировали с помощью методов УФ спектроскопии и динамического светорассеяния. Обнаружено, что в данной системе даже при концентрации L-цистеина 0,6 мМ происходит формирование прекурсора, о чем свидетельствует появление в электронном спектре образца полос поглощения с максимумами 314 и 394 нм. Применение хлоридов различных металлов в качестве инициаторов гелеобразования (например, NaCl, NiCl₂) позволяет по электронным спектрам образца определить момент перехода системы в гель-состояние. Этот переход, связанный с образованием трехмерной сетки, приводит к существенным изменениям в электронной конфигурации супрамолекулярных фрагментов.

РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩАЯ ТЕХНОЛОГИЯ КРАШЕНИЯ ШЕРСТЯНОЙ ПРЯЖИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫХ (РЕДОКС) СИСТЕМ

Руководитель А.А. Буринская

Санкт-петербургский государственный университет
промышленных технологий и дизайна
Кафедра Химической технологии и дизайна текстиля

Одним из путей повышения качества шерстяных изделий и снижения энергозатрат в процессах колорирования является применение окислительно-восстановительных систем [1,2]. Проведен анализ качественных показателей волокнистого субстрата в результате применения редокс-системы (персульфат аммония – глицерин) в процессе крашения шерстяной пряжи 155 текс красителем кислотным ярко-красным 4 Ж при пониженной температуре (75-80 °С). Установлено, что исследуемая система способствует получению более прочных и интенсивных окрасок, о чем свидетельствовали функции Гуревича -Кубелки-Мунка (K/S) окрашенных образцов, прочность окрасок к экстракции в ДМФА, стирке и трению по сравнению с образцом, окрашенным по традиционной технологии при температуре 100 °С.

На основании анализа спектральных карт комбинационного рассеяния окрашенных волокон, сканированных по глубине образцов, и снимков поперечных срезов, установлено, что при использовании редокс-системы в процессе низкотемпературного крашения наблюдается повышение глубины прокраса шерстяных волокон (рис 1).

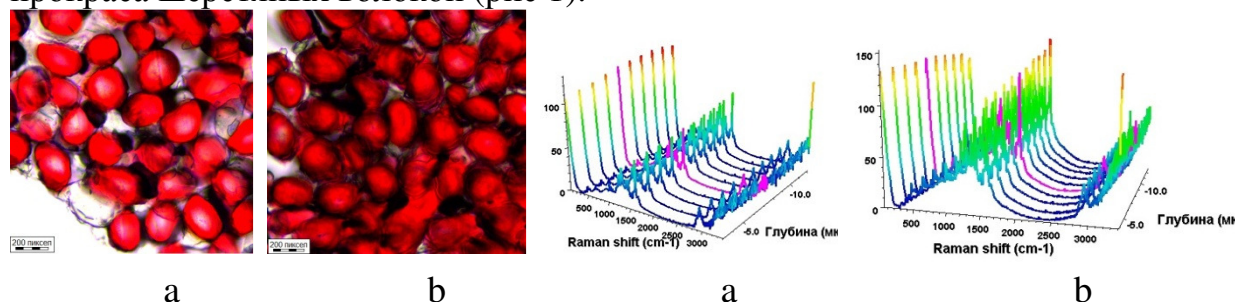


Рис.1. Поперечные срезы и карты спектров комбинационного рассеяния шерстяных волокон: а –окрашенных по традиционной технологии при 100 °С; б – окрашенных с использованием редокс-системы при 80°С.

С использованием метода Гарриса и Смита по растворимости волокна в растворах NaOH и физико-механических испытаний на «Instron 1122» установлена более высокая сохранность субстрата по предложенной технологии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Aitova A., Burinskaya A. // Fiber and Textiles (3) 2016. P. 10 – 14.
2. Аитова А.Н, Буринская А.А., Чекренева Г.М. // Известия ВУЗов. Технология легкой промышленности. Том 21, №3, 2013 г., С. 36-40.

Н.В. Айдинян, А.В. Селиверстов, Е.М. Олейник, А.А. Таргоний

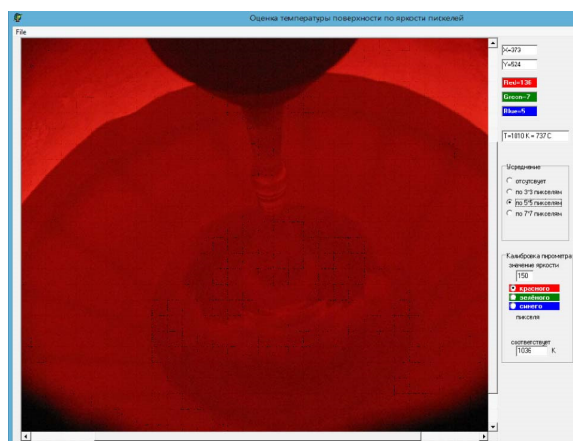
ВЛИЯНИЕ ФЛУКТУАЦИЙ ТЕМПЕРАТУРЫ РАСПЛАВА НА МИКРОРЕЛЬЕФ ПОВЕРХНОСТЕЙ КРИСТАЛЛОВ ПАРАТЕЛЛУРИТА

Руководитель А.И. Колесников

Тверской государственной университет

Кафедра прикладной физики

Микрорельеф боковых поверхностей монокристаллов парателлуриата ($\alpha\text{-TeO}_2$), выращиваемых из расплавов способом Чохральского, отражает флуктуации температуры и радиальной скорости роста в процессе вытягивания. Они определяют распределение в булях дефектов структуры, влияющих на оптическое качество парателлуриата – основного материала для светозвукопроводов акустооптических устройств видимого и ближнего ИК диапазонов длин волн излучения. Целями работы являлись измерения флуктуаций температуры в расплаве диоксида теллура, окружающем кристалл, а также их сопоставление с образовавшимися неровностями в рельефе поверхностей кристаллов. Для измерения температуры использован метод, состоящий в фотографировании цифровой камерой поверхности расплава с кристаллом. Цветные изображения (RGB) анализируются с помощью компьютерной программы, алгоритм расчета температуры в которой заключается в сравнении цветовых яркостей



пикселей, основанный на законе Стефана-Больцмана. Максимальные амплитуды флуктуаций в расплаве диоксида теллура, измеренные таким способом, составляют 10–13 К. Микрорельеф поверхности кристаллов исследован на интерференционном профилометре, программное обеспечение которого позволило найти отклонения профиля, соответствующие периодическим

разрачиваниям и подплавлениям кристаллов, а по отклонениям – получить кинетические зависимости для роста парателлуриата из расплава.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Колесников А.И., Каплунов И. А., Третьяков С.А., Воронцова Е.Ю. Конвекция расплава при выращивании монокристаллов парателлуриата методом Чохральского // Расплавы. 2009. Т.49. № 2. С.58-67.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТРАНСФОРМАЦИИ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ
СОЕДИНЕНИЯ $\text{Fe}_{0,6}\text{Co}_{0,4}\text{В}$ ВБЛИЗИ ТОЧКИ КЮРИ

Руководитель М.Б. Ляхова

Тверской государственный университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Орторомбическое соединение $\text{Fe}_{0,6}\text{Co}_{0,4}\text{В}$ является интересным объектом для исследования трансформации магнитной доменной структуры вблизи точки Кюри (T_C), при которой происходит переход ферромагнетик-парамагнетик. Для соединения $\text{Fe}_{0,6}\text{Co}_{0,4}\text{В}$ температура Кюри невысока – $T_C \approx 80^\circ\text{C}$ [1].

Наблюдение доменной структуры псевдомоноборида $\text{Fe}_{0,6}\text{Co}_{0,4}\text{В}$ производилось на поликристаллическом образце методом полярного эффекта Керра. Исследования проводились на металлографическом микроскопе Neophot 30 в интервале температур $20\text{--}80^\circ\text{C}$, использовалась нагревательная приставка на основе элемента Пельтье.

Исследование доменной структуры при 20°C показало, что в части зерен образца наблюдаются полосовые или каплевидные домены. На поверхности других зерен выявляются домены в виде так называемых «звездочек». В рядах «звездочек» наблюдается выделенное направление, вдоль которого они ориентированы. Замыкающие домены имеют правильную форму ромбов. При увеличении температуры до $25\text{--}30^\circ\text{C}$ начинают появляться первые области, в которых доменная структура не выявляется. Как правило свободные от доменов области начинают формироваться вблизи границ небольших выделений вторичной фазы. При дальнейшем увеличении температуры области «бездоменности» начинают разрастаться. А при температурах $60\text{--}65^\circ\text{C}$ контрастность магнитной доменной структуры, еще выявляемой на некоторых участках поверхности исследуемого образца, начинает резко падать, и в диапазоне температур $70\text{--}75^\circ\text{C}$ она становится едва различимой. Однако конфигурация наблюдаемой доменной структуры не изменяется во всем интервале температур и представляет собой «ряды из звездочек». При достижении температуры $\sim 80^\circ\text{C}$ и выше магнитная доменная структура не визуализируется уже на всей поверхности образца, то есть соединение $\text{Fe}_{0,6}\text{Co}_{0,4}\text{В}$ переходит в парамагнитное состояние.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Cadeville M. C. PhD Thesis Strasbourg University. 1965.

АНАЛИЗ СВОЙСТВ МОЛОКОСВЕРТЫВАЮЩИХ ФЕРМЕНТОВ *Urtica dioica*

Руководитель И.В. Ущাপовский
Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии и химии

В основе технологии производства сыров лежит способность молока коагулировать под воздействием определенных протеолитических ферментов, получивших название молокосвертывающих [1,2]. Все молокосвертывающие энзимы, достаточно широко используемые в сыроделии, принадлежат к кислым протеазам, проявляющим максимальную ферментативную активность в кислой среде. Они характеризуются высоким содержанием дикарбоновых аминокислот, низким содержанием основных аминокислот. Вытяжка из сычуга традиционно чаще всего используется в сыроделии, однако, его высокая стоимость и растущий дефицит приводят к росту спроса на коагулянты для молока растительного и микробиологического происхождения. Существенным преимуществом использования растений для получения молокосвертывающих ферментных препаратов является большая рентабельность производства за счет доступных источников сырья [3-4]. Многие экстракты растительного происхождения способны свертывать молоко, но некоторые из них (например, сок фигового дерева или бромелин из ананаса) не могут быть получены в промышленных масштабах из собственного сырья в РФ. Целью данной работы является исследование свойств молокосвертывающих ферментов растительного происхождения *Urtica dioica*. Во всех проведенных экспериментах использовались аптечные образцы крапивы. Для получения экстрактов с максимальной коагулирующей активностью были исследованы различные экстрагенты (с учетом их применимости в пищевой промышленности), а также время и способ получения экстрактов. Затем была исследована молокосвертывающая активность полученных экстрактов при варьировании процентного соотношения их внесения в молоко. Все пробы молока, используемого для экспериментов, предварительно анализировались на кислотность и на наличие возможных примесей (крахмал, сода, антибиотики), так как эти факторы также влияют на ход коагуляции белков молока. Для оптимизации условий экстракции молокосвертывающих ферментов из *Urtica dioica* каждой серии экспериментов варьировались следующие параметры: гидромодуль, температура и продолжительность экстракции. Для обоснования выбора оптимальных условий экстракции, все полученные образцы использовались для коагуляции молока. После окончания эксперимента для каждого образца определяли массу влажного белкового сгустка, объем и массу образовавшейся сыворотки, а также остаточное содержание белка в сыворотке. На основании анализа полученных экспериментальных данных доказана высокая молокосвертывающая активность экстрактов *Urtica dioica*.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Колесникова С. С. // Молочное дело. 2006. № 8. С. 50-52; № 9. С. 50-51.
2. Крахмалева Т.М. Пищевая химия: учеб. пособие. Оренбург, 2012. 155 с.
3. Осипов, Д.Н. Применение молокосвертывающих ферментных препаратов в пищевой промышленности. Кемерово, 2016. – 34 с.
4. Колесникова С. С. // Молочное дело. 2006. № 8. С. 50-52; № 9. С. 50-51.

Я.В. Андрианова

РЕОЛОГИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА
САМООРГАНИЗАЦИИ ВОДНЫХ ГИДРОГЕЛЕЙРуководители: П.М. Пахомов, С.Д. Хижняк
Тверской государственной университет
Кафедра физической химии

В настоящее время особый интерес представляют гидрогели, полученные на основе биоактивных веществ, с низким содержанием дисперсной фазы в растворе. Гидрогель, полученный в данной работе при смешении водных растворов L-цистеина, нитрата серебра и разных электролитов обладает супрамолекулярным строением и является низкоконцентрированной (~0,01 М), тиксотропной системой. Цель данной работы – синтезировать разные композиции гидрогелей на основе цистеин-серебряного раствора (ЦСР) с использованием биоактивных электролитов, исследовать процесс самоорганизации под воздействием хлоридов и сульфатов металлов методами вибрационной вискозиметрии, кондуктометрии и динамического светорассеяния (ДСР).

Для получения геля использовали в качестве электролитов водные растворы солей металлов (Al^{+3} , Co^{+2} , Cu^{+2} , Mg^{+2} , Mn^{+2} , Ni^{+2} , Na^{+}). О наличии и свойствах пространственной геле-сетки в данной системе можно судить по изменению вязкости. Именно непрерывный каркас слабо связанных частиц дисперсной фазы придает прочностные свойства гелю. При этом изучали зависимость вязкости от времени гелеобразования, а также определяли, как быстро образец разрушается под действием вибрации (при соотношении 1.27 наибольшее значение вязкости сохранялось около 15-20 мин., но при увеличении концентрации $AgNO_3$ – около часа). Большинство изученных нами хлоридов металлов образуют наиболее прочные гели в диапазоне от 2,5 до 3,8 мМ. В ходе исследований методом ДСР обнаружили, что увеличение размера частиц прямо пропорционально увеличению вязкости системы. Кроме того, с помощью измерения электропроводности в ЦСР при добавлении по частям электролита установлено, при каких min концентрациях начинается процесс гелеобразования. Так, при добавлении 0,005 мл электролита в ЦСР происходит резкое падение значений электропроводности. В течение часа, удельная электропроводность достигала значения в 553 μ См/см и дальше практически не изменялась. Таким образом, можно считать, что в течение 2-3 часов происходит полное созревание ЦСР, а на молекулярном уровне образуются супрамолекулярные цепочки из молекул МС.

Работа выполнена при финансовой поддержке Мин. Науки РФ в рамках выполнения гос. работ в сфере научной деятельности (проект №4. 1325. 2014/К), Гос. задания "Обеспечение проведения научных исследований" на базе ЦКП ТвГУ и программы У.М.Н.И.К. (гос. контракт №5334ГУ1/2014 от 24.03.15).

ВЛИЯНИЕ ГИДРОТЕРМИЧЕСКИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЦЕЛЛЮЛОЗЫ

Руководитель И.И. Осовская

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

Исследовано влияние термо-, влагообработки на гидрофильные свойства целлюлозной папки. Объектом исследования служили промышленные образцы сульфатной беленой целлюлозы (СП-1650, степень упорядоченности 0,65, содержание α -целлюлозы 95,5 %). Обработку воздушно-сухой целлюлозы проводили водяным паром в автоклаве в условиях постоянной относительной влажности 100 % при температуре 438 К и времени воздействия 5-40 минут. В качестве методов исследования целлюлозы были использованы: калориметрический для измерения теплот гидратации модифицированной целлюлозы; вискозиметрический для определения средней степени полимеризации (растворитель - железовиннонатриевый комплекс), рентгенографический для определения степени упорядоченности; статический метод сорбции паров воды в широком диапазоне относительных давлений. Показана возможность использования данной обработки для восстановления субмикроскопической структуры целлюлозы. Исследования выявили полное восстановление капиллярно-пористой структуры водяным паром при температуре 438К и времени воздействия 4 минуты, о чем свидетельствуют теплоты гидратации и равное содержание капиллярной влаги образца, обработанного в указанном режиме и образца производственной целлюлозы, не прошедшей стадию сушки. Влагосодержание, соответствующее предельному насыщению функциональных групп молекулами воды указывает также на увеличение содержания активных центров, доступных к взаимодействию с водой. При воздействии более 4 минут гидрофильные свойства обработанной целлюлозы снижаются вследствие протекания процесса вторичной кристаллизации, который типичен для полимеров в высокоэластическом состоянии. При этом степень полимеризации снижается с 1650 до 1380, в связи с начавшейся деструкцией полимолекул целлюлозы. Следовательно, в условиях постоянной температуры и влажности может происходить как увеличение гидрофильных свойств целлюлозы, так и гидрофобизация полимера в зависимости от времени гидротермических воздействий.

СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ МОДИФИЦИРОВАННОЙ ОТБЕЛКИ СУЛЬФАТНОЙ ЛИСТВЕННОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ

Руководитель И.И. Осовская

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

Целью данного исследования является совершенствование ЕСФ отбелки целлюлозы путем введения в схему отбелки стадии озонирования для снижения расхода диоксида хлора и выявления влияния озонирования на свойства целлюлозного композита. Снижение расхода диоксида хлора при отбелке целлюлозы является одной из основных проблем технологии получения беленой целлюлозы на российских предприятиях. В работе использованы методы исследования: вискозиметрический для оценки влияния различных ступеней отбелки на вязкость целлюлозы, погрешность измерений – 3.0 %; растворимость целлюлозы в водных растворах гидроксида натрия и определение количества водорастворимых фракций по стандартным методикам, погрешность измерений – 3.0 %; фотометрический для определения уровня белизны целлюлозы, погрешность измерений – 0,1 %; аналитические для определения числа Каппа; физико-механические для определения разрывной прочности, сопротивления раздиранию; метод масс-спектрометрии для определения ионов тяжелых металлов. Для характеристики гидрофильных свойств целлюлозы применили статический метод сорбции паров воды при различных P/P_0 , относительная погрешность измерений – 5%. Объектом исследования служили промышленные образцы сульфатной небеленой целлюлозы из лиственных пород древесины. Полученные экспериментальные данные позволяют сделать следующие выводы:

1. Разработана схема отбелки сульфатной лиственной целлюлозы со степенью озонирования при невысоком расходе диоксида хлора.
2. Получены физико-химические и физико-механические параметры целлюлозы на всех стадиях отбелки целлюлозы.
3. Эффективная делигнификация при совместном использовании озона и диоксида хлора позволила сократить расход диоксида хлора с 22 кг/т до 15 кг/т целлюлозы при допустимом снижении механических свойств и гидрофильности опытных отливок. Показатель АОХ снижается с 0,27 кг/т.ц. до 0,21 кг/т.ц.
4. Исследования содержания ионов тяжелых металлов на масс-спектрометре показали возможность проведения отбелки без использования комплексонов.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЛИНКОМИЦИНА В СМЕСИ С КЛИНДОМИЦИНОМ С
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭЛЕКТРОДОВ РАЗНОГО ТИПА

Руководитель М.А.Феофанова

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

На сегодняшний день возможно определение линкомицина (антибиотика широкого спектра действия) с использованием твердоконтактного ионоселективного электрода (ИСЭ), изготовленного нами ранее. Возникает вопрос, будет ли экспериментальный электрод селективно определять линкомицин в присутствии близких аналогов антибиотиков. Поэтому целью работы явилось определение селективности твердоконтактного электрода, а также ИСЭ с внутренним электродом сравнения по отношению к структурным аналогам линкомицина, в частности клиндомицина. Твердоконтактный электрод и мембранный электрод были изготовлены по типу: классического (с внутренним электродом сравнения и ионселективной мембраной) и с использованием ионоэлектронного трансдюсера, представляющего собой пластифицированную мембрану состава: поливинилхлорид: дибутилфталат: полианилин в процентном соотношении (40:35:25) и помещенный между ионселективной мембраной и токоотводом. Исследование электродных функций полученных электродов показало, что оба имеют крутизну электродной функции в пределах 35 мВ/рС, что соответствует теоретическим значениям, при этом минимально определяемая концентрация находится в интервале 1-5 (рС). Данный диапазон концентраций является достаточным для большинства практических измерений. После подтверждения работоспособности электрода была проведено определение значения перекрестной чувствительности по отношению к клиндомицину. Для получения достоверных результатов нами были использовали: методы смешанных растворов и отдельного раствора, которые показали сходимые значения. В результате эксперимента было выявлено, что твердоконтактный и классический электроды обладают удовлетворительной селективностью по отношению к мешающим компонентам. Коэффициент селективности для клиндомицина находится в диапазоне 0,1-0,01, причем коэффициент селективности для твердоконтактного электрода был ниже по сравнению с классическим электродом. Таким образом, созданный твердоконтактный электрод для определения линкомицина в присутствии его близкого аналога предпочтительнее по сравнению с классическим электродом.

ПОИАНИЛИН КАК АДСОРБЕНТ ИОНОВ МЕДИ (II) И ЦИНКА (II)

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Полианилин в составе своей молекулы имеет имино- и аминокруппы, которые потенциально могут быть координированы ионами металлов. Поскольку полианилин обладает рядом уникальных качеств, интересно было бы оценить способность этого полимера к адсорбции различных ионов. Поэтому целью настоящей работы было изучение адсорбционной способности полианилина в отношении ионов Cu^{2+} и Zn^{2+} , которые являются основой бронзовых и латунных сплавов.

Известно, что полианилин содержит одновременно иминохиноидные и фенилендиаминовые группировки, соотношение которых определяется степенью окисления полианилина, а следовательно условиями синтеза. Очевидно, что это соотношение будет влиять на адсорбционную способность полианилина.

Синтез полианилина осуществляли методом окислительной поликонденсации. В качестве исходного материала использовали анилин солянокислый, в качестве окислителя – персульфат калия; синтез проводили в 1М HCl. При этих условиях соотношение иминохиноидных и фенилендиаминовых групп примерно равно. После промывки до нейтральной среды полианилин использовали для изучения адсорбции.

Адсорбцию проводили в статическом режиме, время экспозиции составило 60 минут, pH среды варьировали от pH=1 до pH=10. Чтобы проследить динамику адсорбции из раствора, отбирались пробы, в которых определялась концентрация катиона методом комплексонометрического титрования. Было выяснено, что динамическое равновесие для ионов Cu^{2+} достигается через 5 минут, а для ионов Zn^{2+} – через 10 минут.

Максимальная адсорбция для ионов Cu^{2+} в кислой среде составила 0,27 мг/г, а в щелочной – 0,28 мг/г; для ионов Zn^{2+} в кислой среде – 0,26 мг/г, а в щелочной – 0,36 мг/г.

Предполагаемый механизм адсорбции, заключается в координации иона металла атомами азота. Поскольку атом азота входит как в имино-, так и в аминокруппу, вопрос о преимущественной координации иона металла с той или иной группой требует дополнительного изучения.

Учитывая легкость синтеза и достаточную адсорбционную емкость, на наш взгляд, полианилин может найти применение как адсорбент для катионов Cu^{2+} и Zn^{2+} .

ПОЛИАНИЛИН КАК АДсорбЕНТ ИОНОВ МЕДИ (II) И НИКЕЛЯ (II)

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Полианилин в составе своей молекулы имеет имино- и аминокгруппы, которые могут быть координированы ионами металлов. Так как полианилин обладает особыми свойствами, интересно было бы оценить способность этого полимера к адсорбции различных ионов.

Целью настоящей работы было изучение адсорбционной способности полианилина в отношении ионов Cu^{2+} и Ni^{2+} , которые являются основой мельхиоровых сплавов.

Так как полианилин содержит одновременно иминохиноидные и фенилендиаминные группировки, очевидно, что их соотношение будет влиять на адсорбционную способность полимера.

Синтез полианилина осуществляли методом окислительной поликонденсации. В качестве исходного материала использовали анилин солянокислый, в качестве окислителя - персульфат калия; синтез проводили в 1М HCl. При этих условиях соотношение иминохиноидных и фенилендиаминных групп примерно равно. Полученный полианилин промыли до нейтральной среды и использовали для изучения адсорбции.

Адсорбцию проводили в статическом режиме, время экспозиции составило 60 минут, pH среды варьировали от pH=1 до pH=10. Чтобы проследить динамику адсорбции ионов из раствора, проводили отбор пробы, в которой определялась концентрация изучаемого катиона методом комплексонометрического титрования. В результате эксперимента было установлено, что динамическое равновесие для ионов Cu^{2+} и Ni^{2+} достигается через 5 минут.

На наш взгляд, наиболее вероятным механизмом адсорбции будет координация иона металла атомами азота. В связи с тем, что атом азота входит как в иминохиноидные, так и фенилендиаминную группировки, вопрос о преимущественной координации иона металла с той или иной группой требует дополнительного изучения.

Выявленная максимальная адсорбция для ионов Cu^{2+} в кислой среде составила 0,27 мг/г, а в щелочной – 0,28 мг/г; для ионов Ni^{2+} в кислой среде составила 0,23 мг/г, а в щелочной – 0,33 мг/г.

Из выше сказанного следует, что полианилин имеет достаточную адсорбционную емкость, а простота синтеза, делает возможным применение полианилина как адсорбента для катионов Cu^{2+} и Ni^{2+} .

П.О. Бабуркин

КРУПНОЗЕРНИСТОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛУЧЕНИЯ
ФЕРМЕНТОПОДОБНЫХ ГЛОБУЛ НА ОСНОВЕ БЛОКА-АВ-
СОПОЛИМЕРОВ

Руководитель Комаров П.В.

Тверской государственный университет
Кафедра общей физики

Целью настоящей работы являлось создание модели для предсказания условий лабораторного синтеза блокА-АВ-сополимеров на основе N-винилкапролактама (VCL) и N-винилимидазола (VI), которые могут служить основой искусственных ферментоподобных глобул. Выбранные сомономеры имитируют физико-химические свойства аминокислот, которые определяют способность цепей на их основе к спонтанной самосборке в неагрегирующую плотную глобулу с функциональными группами на поверхности.

Моделирование воспроизводит основные особенности лабораторного синтеза, который предполагается осуществлять в ходе двух этапов: 1) получение полиVCL-блока, 2) присоединение к нему сополимерного блока из полиVCL и полиVI в условиях «хорошего» растворителя для VCL и VI, которым является диметилформамид. Для реализации компьютерной модели используется метод диссипативной динамики частиц, относящийся к мезоскопическим методам моделирования. Основные параметры построенной модели: длина цепи сополимера (N), доля полярных сомономеров в реакционной смеси (f_p) и длина первого полиVCL-блока (L). Коллапс полученных цепей, для проверки их способности формировать водорастворимые глобулы, осуществлялся в условиях «плохого» растворителя для блоков из VCL и «хорошего» для блоков из VI (водный раствор). На основе полученных результатов сделаны следующие выводы: цепи с $N \leq 100$ являются слишком короткими для формирования глобул с двуслойной морфологией «ядро-оболочка». Для $N = 200$ и 400 компактные глобулярные структуры возникают, когда $f_p \leq 0.7$, а доля полиVCL-блока в цепи сополимера составляет $\sim 25\%$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Барабанова А.И. // ДАН, – 2015. – Т. 465.– С. 178 - 181.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РНФ № 14-13-00544 (Биомиметический дизайн ферментоподобных наноструктурированных катализаторов на полимерной основе), с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ имени М.В. Ломоносова.

ТЕОРЕТИКО-ГРАФОВАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ АДДИТИВНЫХ СХЕМ РАСЧЁТА ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ ТИОСПИРТОВ И ТИОЭФИРОВ

Руководитель М.Г. Виноградова

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Целью настоящей работы является – установление количественных корреляций “структура – энтальпия образования” в тиоспиртах и тиоэфирах.

В работе рассмотрены феноменологические методы; методы теории графов; методы статистического анализа и линейной алгебры.

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

- анализ экспериментальных данных по исследуемым соединениям,
- построение расчётных схем
- проведение численных расчётов.

В работе обсуждены возможности теоретико-графового подхода в построении и интерпретации аддитивных схем расчёта и прогнозирования тиоспиртов и тиоэфиров.

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

Так для тиоспиртов имеем:

$$P_{C_nH_{2n+1}SH} = a_0 + p_1b + p'_1b' + p_2\Gamma_{cc} + p'_2\Gamma_{cs} + R\Delta_{ccc} + R'\Delta_{ccs} + p_3\tau_{cc} + p'_3\tau_{cs} + p_4\omega_{cc} + p'_4\omega_{cs}$$

где $a_0 = p_{c-n} + p_{s-n}$

Здесь p_1, p_2, p_3, p_4 – соответственно число путей (рёбер) длины один, два, три и четыре; R – число троек смежных рёбер; $\Gamma_{cc}, \Gamma_{cs}, \tau_{cc}, \tau_{cs}, \omega_{cc}, \omega_{cs}$, - эффективные взаимодействия пар атомов С (С и S) соответственно через один атом, два, три и четыре атома и т.д.

Аналогично, для тиоэфиров получаем:

$$P(C_nH_{2n+1})_2S = p_1b + p'_1b' + p_2\Gamma_{cc} + p'_2\Gamma_{cs} + R\Delta_{ccc} + R'\Delta_{ccs} + p_3\tau_{cc} + p'_3\tau_{cs} + p_4\omega_{cc} + p'_4\omega_{cs} + p_5\nu_{cc} + p'_5\nu_{cs}$$

где $a_0 = p_{c-n} + p_{s-n}$

По полученным формулам проведён численный расчёт энтальпии образования ряда тиоспиртов и тиоэфиров.

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

ПРОГРАММИРОВАНИЕ УРОЖАЙНОСТИ ЯРОВОЙ ТРИТИКАЛЕ

Руководитель д.с.-х.н., профессор З.И. Усанова
Тверская государственная Сельскохозяйственная академия
Кафедра технологии производства, переработки и хранения продукции
растениеводства.

В последние годы у сельских товаропроизводителей значительно вырос интерес к новой зерновой культуре – тритикале, созданной путем скрещивания пшеницы и ржи и воплотивший в себя все ценные свойства родительских форм. В связи с этим появилась потребность в поиске новых сортов, в разработке и совершенствовании технологии возделывания. Важным методом создания высокопродуктивных посевов (агротенозов) является программирование урожайности, который обеспечивает наибольшую окупаемость всех материально – технических затрат.

Цель исследований – выявить возможность получения запрограммированных урожаев разных уровней двух сортов яровой тритикале – Норман и Ровня (селекции Владимирского НИИСХ) в условиях Верхневолжья (Тверская область). Исследования выполнены в 2015 году в полевом многофакторном опыте на хорошо окультуренной дерново – среднеподзолистой суглинистой почве опытного поля Тверской ГСХА. Изучали на 3—х фонах минерального питания: 1 – без удобрения, 2-3 расчетная доза NPK на урожай зерна 2,5 и 3,5 т/га (фактор А), 2 сорта – Норман и Ровня (фактор В).

Выявлено, что в условиях региона оба сорта сформировали запрограммированные урожаи зерна в 2,5 т/га: Норман – 2,81, ровня – 2,62 т/га. Оба сорта не накопили урожайность 2-го уровня (3,5 т/га). более высокая она получена у сорта Ровня – 3,24 т/га (недобор урожая 7,4 %). У сорта Норман недобор урожая к программируемому уровню составил 0,65 т/га или 18,6 %. Наибольшая окупаемость удобрений обеспечена на 2 фоне: на 1 кг действующего вещества NPK собрано – 9,50 кг зерна у сорта Норман и 9,58 кг у сорта Ровня. На 3 фоне наибольшая окупаемость 1 кг д.в. NPK достигнута при возделывании сорта Ровня – 8,12 кг зерна. Недобор урожая на 3 фоне – объясняется значительным отклонением тепло- и влагообеспеченности посевов от среднемноголетних показателей. Выявлено также, что по среднемноголетней обеспеченности климатическими ресурсами в условиях Тверской области яровая тритикале может формировать действительно возможный урожай (ДВУ) 4,0 т/га (зерна). Для этого целесообразно использовать более пластичный сорт Ровня.

ПОЛУЧЕНИЕ ГАЛОГЕНОКОБАЛЬТАТОВ
ТРИЭТИЛБУТИЛАММОНИЯ

Руководитель И.Ю.Егорова

Тверской государственной университет

Кафедра органической химии

Комплексы переходных металлов являются привлекательными объектами в органическом синтезе, они позволили изменить представление об органической молекуле, благодаря своей возможности трансформироваться и совмещаться с большим количеством различных функциональных групп. Кобальт является одним из перспективных металлов для создания координационных соединений с органическими лигандами. Комплексы на его основе нашли широкое применение, например, как противогрибковые, противоопухолевые, противомаларийные и антибактериальные препараты. Благодаря d^3 конфигурации орбитали кобальта, он способен образовывать устойчивые и в большинстве случаев инертные металлокомплексы.

Представленная работа посвящена получению комплексных солей на основе бромид триэтилбутиламмония и хлорида кобальта.

Кватернизацией триэтиламина бромистым бутилом получен бромид триэтилбутиламмония. В качестве растворителя использовали ацетон. Реакционную массу в течение двух часов выдерживали при температуре 50°C . Полученное соединение представляет собой кристаллы белого цвета, хорошо растворимые в воде и спирте. Измерена температура плавления полученной четвертичной соли аммония, которая равна $54-56^\circ\text{C}$, что хорошо соответствует литературным данным.

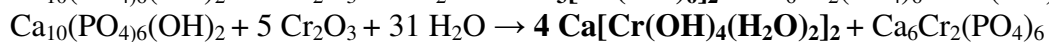
Реакцией взаимодействия спиртовых растворов бромид триэтилбутиламмония и хлорида кобальта (II) при температуре 50°C получена комплексная соль дихлородибромкобальтат триэтилбутиламмония. Полученное соединение представляет собой кристаллы голубого цвета, расплывающиеся на воздухе, так как анион дихлородибромкобальтат неустойчив и легко подвергается гидролизу. Полученное соединение хорошо растворяется в воде, спирте и других полярных растворителях, таких как ацетон, и не растворяется в неполярных – эфир, гексан. Определена температура плавления, которая составляет $36-40^\circ\text{C}$. Несколько расширенный интервал температуры плавления говорит о наличии воды в комплексной соли, что подтверждается широкой полосой поглощения в области $3500-3000\text{ см}^{-1}$. Данные ИК спектра подтвердили наличие связей углерод-галоген в области 2964 и 2919 см^{-1} .

ОТБЕЛИВАНИЕ ЗУБОВ КАК СЛОЖНЫЙ ХИМИЧЕСКИЙ ПРОЦЕСС

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

В ходе работы проведен анализ химических взаимодействий, протекающих при возникновении патологического окрашивания зубов, составлены оригинальные авторские реакции, дополнена и исправлена схема, предлагаемая в одном из используемых источников. Знание химических реакций, приводящих к возникновению окрашивания, позволят в будущем разработать новые и усовершенствовать существующие методы лечения, применяемые в эстетической стоматологии.

Так, некоторые пигменты имеют неорганическую природу и являются оксидами металлов. Матрицей для присоединения «цветных» неорганических субстратов являются кристаллы гидроксиапатита. При его взаимодействии с амфотерными оксидами трёхвалентного хрома и трёхвалентного железа образуются гексагидроксохроматы, гексагидроксоферраты и другие комплексные гидроксиды, имеющие различную окраску: от зеленоватой до красно-коричневой.



В зависимости от степени соединения, эти и другие пигментные комплексы могут быть частично или полностью окислены определенными физико-химическими средствами. Наиболее предпочтительным химическим средством в настоящее время остается перекись водорода, при поверхностном окрашивании может быть использована микроабразия с применением соляной кислоты.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Атлас по стоматологии. Эстетическая стоматология / Джозеф Шмидседер; пер.с англ. под ред. Т. Ф. Виноградовой. - Москва: МЕДпресс - информ, 2007. - 320 с., ил.
2. Туати, Б. Эстетическая стоматология и керамические реставрации: пер. с англ./ Б. Туати, П. Миара, Д. Нэтэнсон. - Москва: Издательский дом "Высшее Образование и Наука". 2004. - 448 с.

СРАВНЕНИЕ СОСТАВА ЯБЛОЧНОГО СОКА РАЗЛИЧНЫХ ТОРГОВЫХ МАРОК С СОКОМ, ИЗГОТОВЛЕННЫМ В ДОМАШНИХ УСЛОВИЯХ

Руководитель Е.В. Андрианова

ФГБОУ ВО Тверской ГМУ Минздрава России, г. Тверь

Кафедра биохимии, с курсом КЛД ФДПО, интернатуры и ординатуры

В настоящей работе, в качестве исследуемых образцов были выбраны следующие торговые марки соков: «Добрый», «J7», «Фруктовый сад», «Любимый», а также сок домашнего приготовления. Были проведены качественные реакции на наличие в яблочном соке витамина В₆, витамина С, природных красителей, сахара, крахмала, консервантов. Концентрацию витамина В₆ определяли фотометрически.

При добавлении CuSO_4 , NaOH 30% к соку «Добрый» образовался осадок, который при нагревании приобрёл бордовую окраску. Это свидетельствует о наличии сахара, в то время как в составе, указанным производителем, говорится о его отсутствии. Так же сахар в меньших количествах был обнаружен в соках «J7», «Фруктовый сад» и «Любимый» (осадок ярко-оранжевого цвета). В домашнем соке сахар обнаружен не был, об этом свидетельствовала ярко-голубая окраска раствора.

При добавлении FeCl_3 3% к домашнему соку и соку торговой марки «J7» наблюдалась грязно-желтая окраска, что характерно для содержания пиридоксина (витамина В₆).

При добавлении FeCl_3 3% к сокам «Добрый», «Фруктовый сад» и «Любимый» наблюдалась светло-желтая окраска. Это говорит о том, что витамин В₆ в соках этих марок содержится в меньших количествах.

Количественный расчет, сделанный на основе данных, полученных на фотоэлектроколориметре, подтвердил эти результаты.

В результате установили, что яблочный сок домашнего приготовления содержит наибольшее количество витамина В₆ (0,061 мг/дл), по сравнению с другими исследуемыми соками (от 0,0061 до 0,024 мг/дл). В ходе исследования консерванты в домашнем соке не обнаружены. В домашнем соке присутствуют только натуральные красители, такие как каротин и хлорофилл. А также, опытным путем установлено, что в соке «Добрый» присутствует сахар.

СПОСОБЫ ОБРАБОТКИ ЗАЛЕЖНЫХ ДЕРНОВО-ПОДЗОЛИСТЫХ ПОЧВ, ПРИ ИХ ВВЕДЕНИИ В СОСТАВ ПОЛЕВЫХ СЕВООБОРОТОВ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии и земледелия

Произошедшие с начала 90-х годов прошлого столетия изменения в нашей стране привели к тому, что в аграрном секторе произошло значительное сокращение площади сельскохозяйственных угодий. Выведенные из оборота земли находились в виде залежи и за прошедший период многие из них покрылись кустарником, а кое-где и мелколесьем. В настоящее время ставится задача ввода таких земель в эксплуатацию. Мы исследовали бывшие пахотные земли, которые в течение 20 лет находились в виде залежи и за это время заросли кустарниковой растительностью. Основным породным составом оказались береза, осина, ива, частично ольха. По густоте покрытия поверхности кустарник подразделяется на три группы. Первая группа- редкий, степень покрытия поверхности 10-30%; вторая группа- средний, степень покрытия 30-60% и густой, степень покрытия 60-100%. По диаметру стволов кустарник различают: крупный- диаметр до 8 см; средний- диаметр 4-7 см и мелкий- диаметр до 4 см.

Работа проводилась на поле возле д. Каблуково Калининского района. На обследованной площади в 50 га 30 га находились под разнотравной сорной растительностью, 12 га покрыты редким кустарником, густота покрытия 18-20% и 8 га имели среднюю закустаренность с густотой покрытия 45-50%. При введении таких земель в состав обрабатываемых почв на участках без кустарника можно использовать обычные плуги, либо фрезерные машины. На закустаренных участках лучше применять кустарниково-болотные плуги, агрегатируемые с тракторами класса 3- ДТ 75, либо колесные трактора класса 5 –К 700, а также класса 6-John Deere 9430. Приемлемы для этих целей и имеющиеся большие фрезы, но у них очень низкая сменная норма выработки. (0,15-0,4 га). В настоящее время, когда имеется выбор земель для их введения в эксплуатацию, следует задействовать поля без древесного покрытия, либо с минимальным покрытием.

Используя на таких землях обычную вспашку, верхний слой почвы окажется на дне борозды и содержащийся в нем азот, зольные элементы могут оказаться не доступными для возделываемых растений. Гораздо эффективнее поверхностная обработка таких земель, без оборота пласта, что достигается при использовании фрезерования. В опыте использовалась фрезерная машина ФКН- 1,7, агрегатируемая трактором Т 130. При глубине фрезерования на 20 см в верхнем слое (0-5 см) остается до 85% общего количества дернины, с фракциями размером от 5 до 8 см. В слое 5-10 см дернина составляла до 40%, а в более глубоких слоях она присутствовала крайне ограниченно.

ТЕРМОРЕАКТИВНЫЕ СВЯЗУЮЩИЕ ДЛЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ СО СТЕКЛЯННЫМ НАПОЛНИТЕЛЕМ

Руководители: Е.И. Лагусева, И.И. Спиридонов
Тверской государственной технической университет
Кафедра технологии полимерных материалов

В современном мире широкое применение получили изделия из композиционных материалов. Для их изготовления используется разнообразный спектр связующих (термопластичных, термореактивных, гибридных) и наполнителей (стеклянный, органический, углеродный, базальтовый и др.). В настоящее время в композиционных материалах наиболее широкое применение получили стеклянные волокна в качестве наполнителя и термореактивные полимеры в качестве связующего.

В данной работе в качестве связующего использована эпоксивинилэфирная смола DERAКANE 510A-40, которая имеет высокую коррозионностойкость и применяется там, где требуется соблюдение высоких требований к пожаробезопасности конечного изделия. Обладает высокой реакционной способностью, обеспечивает стойкость к воздействию растворителей, химических веществ, сильных кислот, окислительных сред, кислых окислительных сред и органических растворителей. Сохраняет прочность и вязкость при повышенных температурах. В качестве наполнителя использовали стеклоткани MX 1150 и UDL 1200 – однонаправленные, прошитые в направлениях 0°/90°, изготовлены из двух слоев ровинговой ткани с поверхностной плотностью 550 – 1250 г/м². Безусадочный материала. Назначение стеклоткани – обеспечение прочности и толщины готового изделия.

Образцы стеклопластика исследованы на сжатие и растяжение (таблица).

Таблица. Физико-механические характеристики образцов из стеклопластика

Марка ткани	Направление	Разрушающее напряжение при разрыве, МН/м ²	Модуль упругости при растяжении, ГПа	Разрушающее напряжение при сжатии, МН/м ²	Модуль упругости при сжатии, ГПа
MX 1150	90	88,2	13,9	129,2	3,64
	0	643,7	36,4	467,8	5,32
UDL 1200	90	45,8	16,0	117,4	4,5
	0	607,7	42,3	499,2	6,4

Анализ показал: прочностные характеристики зависят от расположения слоев ровинговой ткани. Поэтому слои стеклоткани следует накладывать под определенными углами. Прочностные свойства образцов стеклопластика с использованием стеклоткани марки MX 1150 выше, чем UDL 1200.

ИЗМЕНЕНИЕ АГРОХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ДЕРНОВО-ПОДЗОЛИСТЫХ ПОЧВ, ВЫВЕДЕННЫХ ИЗ СОСТАВА СЕЛЬСКОХОЗЯЙСТВЕННОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии и земледелия

С начала 90-х годов прошлого столетия в России в силу целого ряда причин произошло заметное сокращение площади эксплуатируемых сельскохозяйственных угодий, в том числе и пашни. Наиболее остро данный процесс коснулся Нечерноземной зоны. В Тверской области, из общей площади пашни в 1,46 млн. га, в настоящее время находится в обработке 0,54 млн. га. Выведенная из оборота пашня перешла в так называемые залежные земли. В течение 15-25 лет многие поля находятся под естественной травянистой растительностью, частично они заросли кустарником, а кое-где и мелколесьем. В ближайшие 7 лет планируется вернуть в состав полевых севооборотов не менее 125 тыс. га залежных земель.

Мы исследовали эксплуатируемую все время пашню и участок, находящийся последние 19 лет в виде залежи, используемый в качестве луга. Указанные массивы расположены один от другого на расстоянии 1,5 километров и сформированы на одинаковых почвообразующих породах. На каждом из них закладывались почвенные разрезы, отбирались по генетическим горизонтам почвенные образцы, которые подвергались анализу. Работа выполнялась в Молоковском районе. Полученные данные свидетельствуют (табл.1), что в залежной почве содержалось больше гумуса, но снизилось количество подвижных форм фосфора и калия.

Таблица 1. Агрохимическая характеристика почв на моренных отложениях

Горизонт, глубина взятия образца, см	Гумус, %	рН (KCl)	S	Нг	V, %	P ₂ O ₅	K ₂ O
			мг-экв. на 100 г почвы			мг/кг почвы	
Разрез № 4 залежь в виде луга							
A1 (5-22)	2,45	6,26	11,80	1,95	85,83	62	52
A2 (23-36)	1,66	6,25	10,80	2,10	83,72	52	43,7
B1gоч (37-56)	0,43	5,67	8,05	1,48	84,43	65	35
B2g (57-93)		5,54	9,00	1,67	84,35	156	43,8
C		5,44	11,90	2,04	85,36	183	71,5
Разрез № 6 пашня							
Апах (0-24)	2,33	6,48	11,00	1,67	86,82	96	70
A2 (25-46)	1,74	6,80	13,25	1,58	89,37	84	35,8
A2Bgоч (47-55)	0,56	6,28	7,15	1,58	81,93	125	38,9
B1 (56-75)	0,46	4,93	9,90	3,62	73,24	66	56,5
B2g (76-104)		5,18	8,65	1,86	82,34	210	54
C		4,73	10,65	3,90	73,22	153	66,5

РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ ПРОВОДИМОСТИ В
МОНОКРИСТАЛЛАХ ГРУППЫ ТГС

Руководитель В.В. Иванов

Тверской государственной университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Важнейшим свойством сегнетоэлектрического кристалла является электропроводность. Изучение этого свойства, позволяет выяснить структурные особенности кристалла, получить некоторые данные об энергии решетки, о дефектах и примесях [1]. Наиболее распространенные сегнетоэлектрические кристаллы принадлежат семейству триглицинсульфата (ТГС), широко применяющегося в пироэлектрических видиконах. Электропроводность монокристалла исследовалась на постоянном электрическом токе. Образец, находящийся в специальном держателе помещался в термостат, показания температуры измерялись термометром с погрешностью $\pm 0,5^\circ\text{C}$. Исследовались временные зависимости тока проводимости. В качестве источника напряжения, подаваемого на кристалл, использовался источник постоянного напряжения (ТЕС-13). Электрический ток измерялся пикоамперметром Keithley 6485. Температурный интервал измерений составлял $17\text{-}60^\circ\text{C}$.

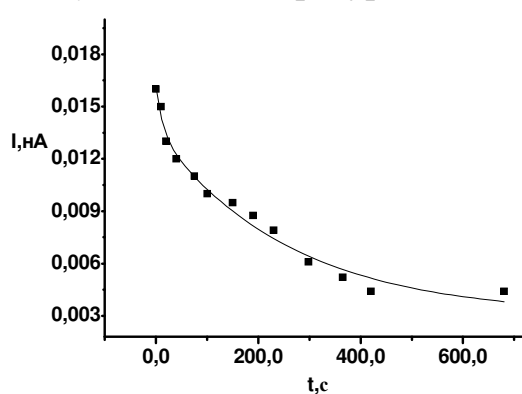


Рис.1. Зависимость силы тока от времени

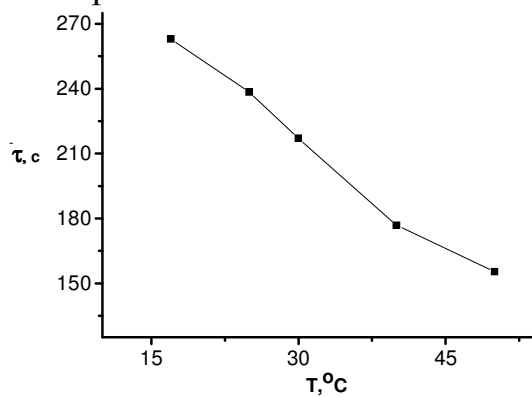


Рис.2. Зависимость времени релаксации от температуры

На Рис.1. представлена зависимость силы тока от времени при температуре 17°C . Точки соответствуют экспериментальным результатам, а сплошная линия получена экстраполяцией экспоненциальной зависимостью. Установлено, что наблюдается два времени релаксации. На рис.2. представлена зависимость времени релаксации от температуры. Как видно из рис. время релаксации постепенно убывает с повышением температуры.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. В.М. Гуревич, Электропроводность сегнетоэлектриков М., 359 стр., 1969.

ВЛИЯНИЕ ХЕЛАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ МИКРОЭЛЕМЕНТОВ И СПОСОБОВ ИХ ПРИМЕНЕНИЯ НА УРОЖАЙНОСТЬ И КАЧЕСТВО УРОЖАЯ ТОПИНАМБУРА.

Руководитель З.И. Усанова

Тверская государственная Сельскохозяйственная академия

Кафедра технологии производства,

переработки и хранения продукции растениеводства.

Оптимизация питания человека, импортозамещение требуют увеличения производства экологически безопасной продукции растениеводства с повышением содержанием биологически активных веществ (БАВ). В этих целях необходимо использовать все разнообразие биоресурсов, к числу которых принадлежит топинамбур – важнейший источник инулина и других БАВ.

Увеличения содержания этих ценных для человека питательных веществ можно достичь путем оптимизации минерального питания растений с применением экологически безопасных хелатных комплексов микроэлементов, к которым относятся комплексоны с этилендиаминдиантарной кислотой.

Цель исследований – разработать способ применения комплексонов микроэлементов, обеспечивающих получение наибольшей урожайности, увеличение содержания инулина и выхода его с гектара посадок.

Исследования проводили в 2016 г. в полевом опыте на дерново-среднеподзолистой легкосуглинистой почве, на опытном поле Тверской ГСХА. Изучали три способа применения комплексонов Zn-ЭДДЯК, Со-ЭДДЯК, Cu-ЭДДЯК, В-ЭДДЯК, Se-ЭДДЯК, контроль – дистил. вода: обработка семенных клубней, одно- и двукратное опрыскивание растений. Сорт – Скороспелка.

Установлено, что комплексоны микроэлементов стимулируют рост растений, формирование ассимилирующей поверхности, прироста урожая клубней, в результате чего повышается урожайность и качество урожая.

Комплексоны биометаллов (Zn-ЭДДЯК, Со-ЭДДЯК, Cu-ЭДДЯК) наибольшую урожайность (42,2 – 47,0 т/га), содержание инулина в клубнях (15,2 – 18,8 %), выход инулина с гектара (6,4 – 8,2 т) обеспечивают при обработке семенных клубней, а комплексоны неметаллов (В-ЭДДЯК, Se-ЭДДЯК) при опрыскивании вегетирующих растений: урожай клубней – 46,5 – 48,8 т/га, содержание инулина – 19,9 – 20,7 %, выход инулина – 9,2 – 10,1 т/га.

ЭНЕРГИИ РАЗРЫВА СВЯЗИ В АЛЬДЕГИДАХ И КЕТОНАХ

Руководитель М.Г. Виноградова

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Целью настоящей работы является – проведение анализа энергии разрыва связи в кетонах и альдегидах с помощью феноменологических методов, основывающихся на концепции попарных и более сложных взаимодействий атомов в молекуле.

Для достижения поставленной цели в работе решались следующие задачи:

1. Оценка и анализ экспериментальных данных по энергиям разрыва связи в исследуемых соединениях.
2. Построение расчётных схем и проведение численных расчетов,
3. Построение и анализ графических зависимостей “энергия разрыва связи – степень замещения”.

Данные зависимости позволяют графическим путем получить недостающие значения свойств. Найдено, что они в общем случае нелинейны, однако линии замещения на одну и ту же группу симбатны между собой.

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

1. Энергии разрыва связей D_{298} в выбранных соединениях изменяются в широких пределах.

Например (в кДж/моль [1]):

	$C_2H_5-C(O)H$	$CH_3-C(O)CH_3$	$CH_3C(O)CH_3$
D_{298}	$346,0 \pm 2,1$	$351,9 \pm 2,1$	$401,7 \pm 9,2$

2. Появление в цепи молекулы атомов галогена практически не влияет на D_{298} . Например (в кДж/моль [1]):

	$CH_3C(O)CH_3$	$CH_3C(O)CF_3$
D_{298}	$401,7 \pm 9,2$	$402,5$

и т.д.

В результате проделанной работы проведена оценка состояния численных данных по энергиям разрыва связи в кетонах и альдегидах, выведены рабочие формулы, проведены численные расчёты, согласующиеся с экспериментом, получены новые данные.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Yu-Ran Luo*. Handbook of bond dissociation energies in organic compounds. Florida: CRC Press. 2003. 380 p.

Л.Н. Быкова, А.Н. Петров

АНАЛИЗ ФАКТОРОВ ТЕХНОГЕННОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ ОТ ОСАДКОВ СТОЧНЫХ ВОД

Руководители: Р.Ф. Витковская, Н.П. Новоселов
Санкт Петербургский государственный университет
промышленных технологии и дизайна

В современных исследованиях при биологической очистке сточных вод все еще не решена проблема утилизации образующегося осадка. Основная сложность - широкий диапазон концентраций тяжелых металлов и специфических загрязнителей – диоксиноподобных веществ. Наиболее распространенными методами утилизации осадков сточных вод являются: депонирование на полигонах и иловых картах (часто используемый метод в России и зарубежом); использование в качестве биоорганического субстрата на сельхозугодиях (наиболее распространен в Европейских странах и странах Ближнего Востока); термическая обработка с последующей утилизацией золы на полигонах; геотубирование (использование текстильных материалов с использованием коагулянтов и флокулянтов).

В России используется преимущественно метод депонирования на полигонах и иловых карта, однако, возникает проблема длительного техногенного воздействия. Например, в исследованиях было выделено 6 этапов жизненного цикла, которые можно отнести к многофакторному техногенному воздействию: 1) депонирование илового осадка; 2) структурирование осадков иловых карт; 3) биодеструкция органической фракции активного ила; 4) ассимиляция илового осадка; 5) взаимосвязь с наземной растительностью; 6) замирание.

Структурные особенности иловых карт с различными сроками жизненного цикла имеют сложный характер подхода к изучению процессов рекультивации. Многолетнее депонирование (10-20 лет) иловых осадков на площадках и полигонах не обеспечивает достижения санитарных норм по тяжелым металлам, особенно в условиях быстро меняющихся климатических условий. Это порождает проблему формирования ареола техногенного загрязнения с признаками объектов накопленного ущерба. При оценке воздействия объектов утилизации осадков сточных вод в пределах ареалов функционирования природно-хозяйственных систем основной задачей является установление границ территории, на которой окружающая среда может быть подвергнута деградации и/или загрязнению (граница техногенного ландшафта; площадь территорий, подверженная повышенному загрязнению атмосферного воздуха, подземных и поверхностных вод, почв и др.), со специфическими для каждого типа объектов результатами воздействия.

ВЛИЯНИЕ АНТРОПОГЕННОГО ФАКТОРА НА ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ ХВОЙНЫХ РАСТЕНИЙ

Руководитель П.М. Пахомов

Тверской Государственный университет

Кафедра физической химии

Развитие промышленных предприятий, увеличение выбросов автотранспортных средств и др. привели к серьезным нарушениям природных ландшафтов. Загрязнители попадают в окружающую среду и поглощаются растениями, многие из которых используются человеком в приготовлении лекарственных препаратов, кормов для животных в сельском хозяйстве. Различные виды хвойных растений, чувствительны к определенным загрязняющим веществам. Можно отметить, что одним из таких видов, зачастую повреждающихся различными загрязняющими веществами, является ель европейская.

Целью работы является изучение влияния антропогенного фактора на химический состав хвойных растений методами оптической спектроскопии. Исследуемые виды могут произрастать как в чистых, так и загрязненных местах обитания, они интенсивно поглощают биогенные элементы, минеральные и органические вещества, выступают в роли минерализатора и детоксиканта, а также биофильтра пестицидов и нефтепродуктов.

Поскольку под действием антропогенного загрязнения окружающей среды в хвойных растениях могут происходить изменения на химическом и анатомическом уровнях, то эффективными методами изучения этих изменений являются Фурье-ИК спектроскопия и РЭМ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Яковлева, Г.П. Лекарственное сырье животного и растительного происхождения. Фармакогнозия./ Г.П. Яковлева – Спб.: Спецлит, 2006. – 845с.
2. Муравьева, Д.А. Фармакогнозия / Д.А. Муравьева, И.А. Самылина, Г.П. Яковлев. – М.: Медицина, 2002
3. Химия растительного сырья №4. – 2007. – 73-77 с.
4. <https://marsu.ru/science/libr/resours/thuja/gl3.html>

МАГНИТОМЕТР СИЛЬНЫХ ПОЛЕЙ НА ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯХ
ХОЛЛА

Руководитель Р.М. Гречишкин

Тверской государственной университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Целью настоящей работы явилось создание магнитометра на основе преобразователей Холла, рассчитанного на измерение петель гистерезиса и кривых намагничивания магнитных материалов в открытой магнитной цепи в условиях лабораторий физического материаловедения в сильных (0.5...2 Т) полях. Основой созданного магнитометра явилась схема, предложенная в работе [1]. Отличительная особенность состояла в использовании двух пар встречно включённых преобразователей Холла для регистрации планарной компоненты поля образца, пропорциональной его магнитному моменту. Источником внешнего магнитного поля служил электромагнит ЭМ-1, подключенный к регулируемому тиристорному источнику постоянного тока. Преобразователи Холла ориентировались в межполюсном зазоре электромагнита и балансировались таким образом, чтобы в отсутствие образца выходной сигнал был минимизирован, при этом измерительный сигнал создавался за счёт перпендикулярной компоненты поля рассеяния образца. Выходной сигнал подавался на АЦП преобразователь, подключенный к компьютеру.

В качестве преобразователей Холла использовались датчики ПХЭ-606 с чувствительностью порядка 50 мкВ/мТ с линейной характеристикой в диапазоне полей до ± 2 Т.

Отличительными особенностями магнитометра является его простота, высокая чувствительность и малые габариты, что делает его удобным средством для экспресс-испытаний образцов малого размера в лабораторных условиях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Craik, D. J. The measurement of magnetization using Hall probes. *Journal of Physics E: Scientific Instruments*, 1968, 1(12), 1193.

ИНДИКАТОРНАЯ БУМАГА ДЛЯ АНАЛИЗА НИТРАТОВ

Руководитель В.М. Никольский

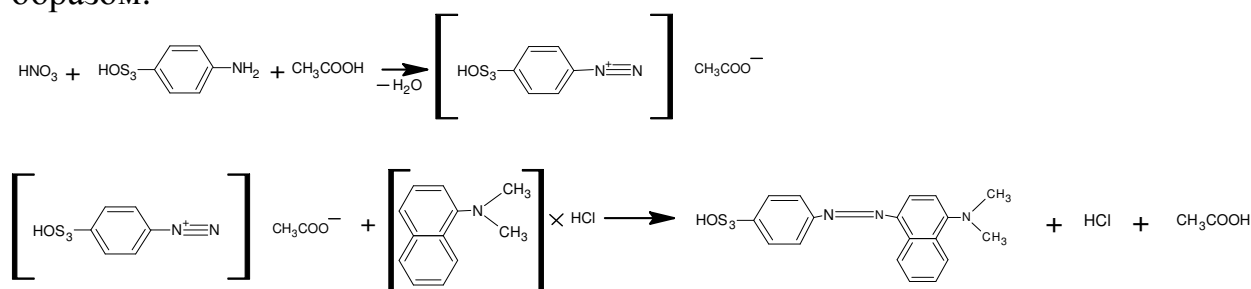
Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Для экспресс-контроля содержания нитратов в продуктах растениеводства, воде, пищевых продуктах и сточных водах различного происхождения в аналитической химии используется химический индикатор на твердофазном носителе.

Нами разработан метод экспресс-анализа нитратов с применением трехслойной бумажной индикаторной бумаги [1]. По этому патенту в составе маскирантно-кислотного слоя используется синтезированная нами N-(карбоксиметил) аспарагиновая кислота (КМАК), синтез и кислотно-основные свойства которой представлены в работе [2]. Метод экспресс-анализа в ходе открытия нитрат-ионов по указанному патенту основан на применении теста Грисса с использованием 1-нафтиламина.

К недостаткам описанного метода относится присутствие в составе реактива Грисса канцерогенного реагента 1-нафтиламин. Для совершенствования индикаторной бумаги экспресс-контроля содержания нитратов нами предложено в слое с тестом Грисса вместо 1-нафтиламина использовать диметил-1-нафтиламин, который не является канцерогеном, однако, по химическому действию аналогичен 1-нафтиламину и может с успехом применяться в составе реактивов для анализа нитрат-ионов [3].

Уравнение реакции с применением диметил-1-нафтиламин гидрохлорида можно записать следующим образом:



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Патент РФ на полезную модель №162596, опубл. 20.06.2016/ Индикаторная бумага экспресс-анализа содержания нитратов/ Гусева Д.А., Логинова Е.С., Никольский В.М.
2. Логинова Е.С., Никольский В.М., Толкачева Л.Н., Лукьянова Н.И. Синтез и некоторые свойства комплексонов, производных янтарной кислоты // Известия Академии наук. Серия химическая, 2016, Т. 65, №9, С. 2206-2210.
3. Ешоткин В.И. Определение нитритов и нитратов реактивом Грисса, <http://himkniga.com/experiments/501?page=2>

ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛОКА НА НАЛИЧИЕ АНТИБИОТИКОВ
ТЕТРАЦИКЛИНОВОЙ ГРУППЫ С ПОМОЩЬЮ
ВЫСОКОЭФФЕКТИВНОЙ ЖИДКОСТНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ И
МАСС-СПЕКТРОМЕТРА

Научный руководитель проф., д.х.н. Ворончихина Л. И.
Тверской государственной университет
Кафедра органической химии

Полноценное и регулярное снабжение организма всеми необходимыми биологически значимыми элементами – витаминами, минеральными веществами и микроэлементами – играет важнейшую роль для поддержания здоровья и активности человека. Поступать они должны регулярно, в полном наборе и количествах, соответствующих физиологической потребности организма. Главным поставщиком витаминов и минеральных веществ является молоко.

Серьезную проблему для молочной промышленности представляет наличие остаточных количеств антибиотиков в молоке. Антибиотики тетрациклинового ряда применяются для лечения инфекционных заболеваний у животных, поэтому остаточные их количества могут встречаться в пищевых продуктах животного происхождения. Употребление в пищу продуктов, содержащих остаточные количества антибиотиков, негативно сказывается на организме человека, в связи с этим их содержание нормируется. Поэтому важнейшей задачей для молочной промышленности является инактивация антибиотиков в молоке. И необходим подбор оптимальных методов решения данной проблемы.

В настоящей работе представлены результаты исследования антибиотиков тетрациклиновой группы в молоке на способность инактивироваться при изменении различных факторов (рН среды, температуры, времени).

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ
ПОЛУЧЕНИЯ ТОНКИХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК ПУТЕМ
НАПЫЛЕНИЯ И РАСТЕКЕНИЯ С ПОСЛЕДУЮЩЕЙ
КРИСТАЛЛИЗАЦИЕЙ

Руководитель В.М. Самсонов

Тверской государственный университет

Кафедра общей физики

В данной работе с использованием потенциала сильной связи [1] и компьютерной программы [2] было осуществлено моделирование процессов получения тонких металлических пленок. Было рассмотрено два способа:

1. Молекулярно-лучевая эпитаксия;
2. Растекание наноразмерной капли жидкого металла по твердой поверхности с последующей кристаллизацией.

Оба способа для Ag демонстрируют схожие результаты: нанопленки серебра формируют двумерный монокристалл, хотя при высоких скоростях кристаллизации растекшейся капли возможно формирование поликристалла.

Для нанопленок золота ситуация отлична – молекулярно-лучевая эпитаксия приводит к формированию поликристалла, в то время как второй способ приводит к образованию островковой пленки с идеальной кристаллической структурой. Важно отметить, что полученные во всех случаях структуры отвечают плоскости (111) ГЦК-структуры.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Cleri. F., Rosato V. // Phys. Rev. B. 1993. V.48, №1. P. 22.
2. Бембель А.Г. Молекулярно-динамическое моделирование структурных и фазовых превращений в свободных нанокластерах и наночастицах на поверхности твердого тела. Дисс. к.ф.-м.н. Тверь, 2011. 173 с.

ФОРМИРОВАНИЕ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КЕРАМИКИ СИСТЕМЫ ЦТС В ПРОЦЕССЕ СПЕКАНИЯ

Руководитель Е.В. Барабанова

Тверской государственной университет

Кафедра прикладной физики

С целью выявления условий и этапов формирования сегнетоэлектрических и пьезоэлектрических свойств керамики на основе цирконата-титаната свинца (ЦТС) исследовалось влияние температуры спекания керамики на микроструктуру и доменную структуру. В качестве объектов исследования была выбрана пьезоэлектрическая керамика состава ЦТС-46, имеющая пониженную по сравнению с другими составами температуру спекания. Образцы представляли собой спрессованные блоки исходных оксидов, не прошедшие этап спекания и синтеза и имеющие форму диска. Согласно промышленной технологии керамика ЦТС-46 спекается с выдержкой 4 часа при максимальной температуре 970°C . В работе были выбраны различные конечные температуры спекания ниже и равно 970°C . Скорость нагрева и время выдержки оставались неизменными.

Исследование микроструктуры производилось на растровом электронном микроскопе и атомно-силовом микроскопе (АСМ). Изучение доменной структуры выполнялось на АСМ методом силовой микроскопии пьезоотклика. При этом на зонд подавалось переменное напряжение с амплитудой 7 В. Как следует из полученных данных вплоть до максимальной температуры спекания происходит увеличение размеров зерен синтезируемой керамики. Рост зерен происходит нелинейно: наиболее интенсивное увеличение размеров зерен начинается от температуры 860°C . Формирование сегнетоэлектрических доменов также начинается от температуры спекания 860°C . Изначально они имеют неправильную форму с нечеткими границами раздела. При повышении температуры спекания внутри этих областей появляются полосовые домены. Размер их в среднем составляет порядка 100-200 нм, но незначительно увеличивается по мере повышения температуры спекания. И доменная структура, и микроструктура активно видоизменяются до $910-930^{\circ}\text{C}$, выше этих температур изменения минимальны.

Таким образом, можно сделать вывод, что формирование сегнетоэлектрических свойств, исходя из данных о доменной структуре, происходит в интервале температур $860-910^{\circ}\text{C}$.

ИК-СПЕКТРОСКОПИЯ В АНАЛИЗЕ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ

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

Инфракрасная спектроскопия является одним из самых распространённых и эффективных методов анализа лекарственных препаратов в фармации. Кафедрой химии Тверского Государственного Медицинского Университета ведётся многолетняя работа по изучению ИК-спектров различных российских фармацевтических препаратов и их зарубежных аналогов. Объектами для исследования становились: аспирин пяти производителей, варфарин и дротаверин двух производителей.

В данной работе использовали метод ИК-спектроскопии с преобразованием Фурье. Запись ИК-спектров осуществляли на Фурье-ИК спектрометрах «Equinox-55» фирмы Брукер и Nicolet iS10 фирмы Thermo SCIENTIFIC. Использовали литературные данные [1].

Сравнение ИК-спектров препаратов аспирина российских производителей показало почти полное совпадение спектров как по частоте, так и по интенсивности. Анализ ИК-спектров отечественного аспирина и его зарубежных аналогов показал, что в ИК-спектрах аспирина российского производства интенсивность полосы $3550\text{--}3400\text{ см}^{-1}$, соответствующей водородным связям, менее выражена по сравнению с зарубежными образцами.

На ИК-спектрах препаратов варфарина видно наличие широкой полосы $2800\text{--}3500\text{ см}^{-1}$, характеризующей наличие водородных связей (внутри- и межмолекулярных). Анализ ИК-спектров показал, что оба спектра близки как по форме, так и по положению пиков поглощения.

На ИК-спектре препаратов дротаверина наблюдались 2 интенсивные полосы поглощения с максимумами при 3380 см^{-1} (валентные колебания ароматических С-Н связей изохинолинового ядра) и 1037 см^{-1} (что свидетельствует о наличии этоксигрупп). Наложение спектров препаратов показывало практически полное совпадение, как по расположению пиков поглощения, так и по их интенсивности по всему диапазону исследованных частот.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тарасевич Б.Н. ИК спектры основных классов органических соединений: справочные материалы// МГУ имени М.В. Ломоносова — Москва 2012.

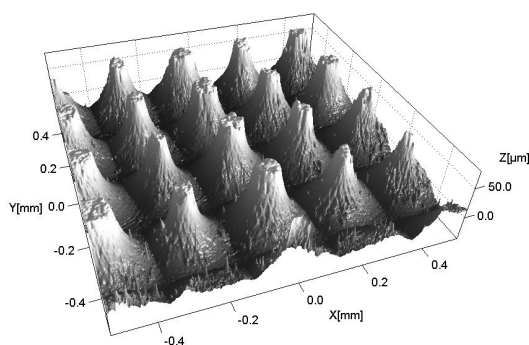
М.С. Воронцов, А.В. Селиверстов, Е.М. Олейник, П.В. Иванова,
И.В. Русин

СОЗДАНИЕ АНТИОТРАЖАЮЩИХ СТРУКТУР НА ОПТИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЯХ КРИСТАЛЛОВ ПАРАТЕЛЛУРИТА

Руководители: С.А. Третьяков, А.И. Колесников
Тверской государственной университет
Кафедра прикладной физики

Целью исследований, проведенных в представленной работе, являлось создание с помощью химического травления на оптических поверхностях монокристаллов парателлурифта периодической структуры микрорельефа, снижающей отражение и увеличивающей пропускание света акустооптическими элементами из этих кристаллов. Среди экспериментально испытанных в работе химических составов травителей оптимальным оказался раствор КОН с концентрацией 9 моль/л.

Для создания периодических структур на поверхностях кристаллов парателлурифта определена следующая последовательность технологических операций: 1) покрытие кристалла лаком НЦ-218; 2) снятие с помощью индентора микротвердомера части слоя лака; 3) приготовление раствора КОН с концентрацией 9 моль/л; 4) травление кристалла 5) промывание кристалла дистиллированной водой и снятие лака с помощью ацетона.



Изображение одной из созданных в результате травления периодических структур, полученной с помощью интерференционного профилометра NanoMap1000WLI, представлено на рисунке. Прямые измерения пропускания света на фурье-спектрометре подтверждают существенное – на 2% снижение потерь на отражение.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Колесников А.И., Каплунов И.А., Морозова К.А., Третьяков С.А. Влияние рельефа поверхности на отражение и пропускание электромагнитного излучения // Аннотированный сборник материалов Всероссийской научно-технической конференции «Расплетинские чтения - 2016». М.: ПАО НПО «Алмаз». 2015. С. 103.

Н.В. Востров, А.В. Рисунков

КОСВЕННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МАГНИТОУПРУГИХ СВОЙСТВ
СОЕДИНЕНИЙ $\text{LaFe}_{11,4}\text{Si}_{1,6}$

Руководитель А.Ю. Карпенков

Тверской государственной университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Систематическое изучение магнитоупругой связи является важным для понимания причин гигантских изменений энтропии в соединениях системы La-Fe-Si и родственных ей материалов.

В качестве объекта исследований было выбрано соединение $\text{LaFe}_{11,4}\text{Si}_{1,6}$, обладающее фазовым магнитным переходом при температуре 212 К. Для расчета коэффициента сжимаемости k была использована теория Бина и Родбелла.

Основываясь на модели молекулярного поля можно рассчитать температурную зависимость относительной намагниченности $\sigma = B[(H_{\text{eff}} + H)g\mu_B / k_B T]$, при этом $H_{\text{eff}} = \lambda N g \mu_B \sigma$, где $B(x)$ - функция Бриллюэна, а $\lambda = 3k_B T_C / [N g^2 \mu_B^2 J(J+1)]$ [1]. Приняв $J=1.5$, $g=2$, $N=6 \cdot 10^{22}$, $T_0=207$ К и, используя температурную зависимость объемного расширения $w(T)$, была найдена наилучшая форма температурной зависимости относительной намагниченности $\sigma(T)$. В ходе построений была определена константа $\beta=22$.

Используя формулу для определения (в неявном виде) температурной зависимости $\sigma(T)$ введенную Бином и Родбеллом:

$$\frac{T}{T_0} = \frac{\sigma}{\text{arctanh} \sigma} \left(1 + \eta \frac{\sigma^2}{3} - P \chi \beta \right), \text{ где } \eta \equiv \frac{3}{2} N k_B k T_0 \beta^2$$

был найден параметр $\eta=1,05$, при котором расчетная кривая наилучшим образом совпадает с экспериментальной зависимостью. Определенное значение параметра η позволяет найти температурную зависимость коэффициента сжимаемости k , который принимает значения от 0,68 до $0,86 \cdot 10^{-12} \text{см}^2/\text{дин}$. Найденное значение коэффициента сжимаемости может в дальнейшем быть использовано для расчета температуры магнитного превращения при всестороннем сжатии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Н.П. Гражданкина. Магнитные фазовые переходы I рода // Успехи физических наук. 1968. Т.96. вып. 2 С.291-325.

ИДЕНТИФИКАЦИЯ СТРУКТУРНЫХ ИЗОМЕРОВ ХЕЛАТНЫХ N,O-КОМПЛЕКСОВ Cu(II) МЕТОДАМИ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ МНПВО И КВАНТОВОХИМИЧЕСКИМ МОДЕЛИРОВАНИЕМ

Руководитель Т.В. Берестова

Башкирский государственный университет
Кафедра физической химии и химической экологии

Известно, что хелатные бис- и разнолигандные аминокислотные N,O-комплексы Cu(II) принимают участие в самосборке белковых молекул [1], а также могут рассматриваться в качестве моделей активных центров медьсодержащих ферментов. Недавно было установлено, что низкомолекулярные аминокислотные хелаты Cu(II) обладают достаточной стабильностью в водных растворах при обычных условиях [2].

Выявление критериев для идентификации геометрических изомеров аминокислотных N,O-комплексов остается актуальной задачей, решение которой позволит установить механизм их фармакологического действия и разработать на их основе препараты для регуляции гомеостаза в биологических системах.

Методом ИК спектроскопии МНПВО и квантово-химическим моделированием (M06-L, mPWPW91, OLYP, M06, B3LYP, LC-wPBE, базисный набор 6-311+G(d)) изучены *транс*-(a) и *цис*-(b) изомеры комплексов [Cu(^bL₁L₂) 1-5a,b (^bL - bidentate ligand: gly, S-ala, S-val, R,S-val) [3] в области характеристических валентных колебаний карбоксилат-иона. Показано, что полученные экспериментально ИК-характеристики геометрических изомеров 1-5a,b согласуются с теоретическими расчетами (метод M06-L/6-311+G(d)).

По результатам исследования сделаны отнесения характеристических полос поглощения 1-5a,b и установлено, что валентные колебания карбонильной группы $\nu(\text{C}=\text{O})$ для *цис*-изомеров 1-5b имеют уширенный характер и сдвигаются в более длинноволновую область по сравнению с *транс*-изомерами 1-5a. Область асимметричных и симметричных валентных колебаний $\nu_{\text{as,s}}(\text{C}-\text{O})$ (1370-1400 cm^{-1}) *транс*-изомеров 1-5a из-за возможного наложения имеет большую интенсивность по сравнению с *цис*-изомерами 1-5b.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. O. YAMAUCHI, A. ODANI, M. TAKANI // J. CHEM. SOC. DALTON TRANS. 2002, P. 3411.
2. O.M.D. Lutz, C.B. Messener, T.S. Hover, B.M. Rode // J. Phys. Chem. Lett. 2014, p. 1502.
3. Berestova T.V., Kuzina L.G., Amineva N.A., Faizrakhmanov I.S., Massalimov I.A., Mustafin A.G. // J. Mol. Struct. 2017, doi: 10.1016/j.molstruc.2017.02.023.

РАЗРАБОТКА ХИМИЧЕСКОГО МЕТОДА ЗАЩИТЫ ПОВЕРХНОСТЕЙ
ОТ МХОВ И ЛИШАЙНИКОВ

Руководитель Н.В. Веролайнен
Тверской государственной университет
Кафедра органической химии

В настоящее время на рынке бактерицидных средств, выпускаемых в нашей стране недостаточно составов, которые позволяют защищать материалы поверхности крыш от мхов и лишайников. Так как, с каждым годом строительство развивается все интенсивнее, то проблема создания такого защитного средства широкого спектра действия весьма важна и актуальна.

Четвертичные аммониевые соединения давно используют в различных областях благодаря тому, что сочетают в себе дезинфицирующие, антикоррозионные, гидрофобизирующие свойства, способны образовывать пленки на твердых поверхностях с отрицательным зарядом. Максимальную противомикробную активность проявляют соединения, которые содержат 10-16 атомов углерода в длинноцепочечном радикале. Хлорид бензалкония принадлежит к указанному классу соединений и представляет собой смесь продуктов замещения: содержит в своем составе помимо метилов, радикалы от C_3 до C_{16} . Из литературных источников известно, что эффективное бактерицидное действие на мхи и лишайники оказывают четвертичные аммониевые соли производные хлорида бензалкония с длинноцепочечными радикалами децил и додецил.

Настоящая работа посвящена разработке метода получения бензил N, N - диметилдодециламмоний хлорида реакцией кватернизации хлористого бензила с N, N-диметилдодециламином.

Предварительно N,N-диметилдодециламин получали взаимодействием додецил хлористого и гидрохлорида диметиламина в присутствии порошкообразной щелочи (NaOH). Полученный третичный амин отделяли деконтацией от соли (NaCl) и щелочи.

Далее проводили реакцию кватернизации додецилдиметиламина. Полученную соль очищали многократной перекристаллизацией из смеси этилацетата с этиловым спиртом. Выход продукта в виде кристаллов белого цвета составил 45%.

Полученную соль бензил, N, N-диметилдодециламмоний хлорида идентифицировали, анализировали как катионное поверхностно-активное соединение и измеряли его поверхностно-активные свойства.

Для создания защитного комплекса бактерицидного действия, в работе предполагается провести подбор эффективного пленкообразователя и растворителя.

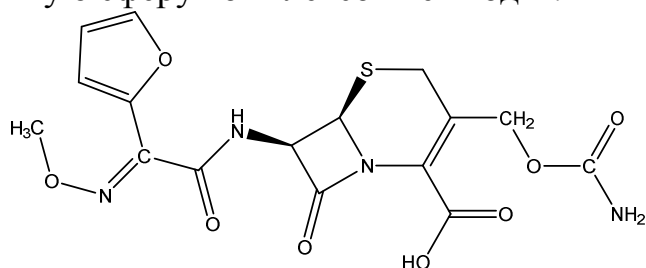
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСОВ ЦЕФУРОКСИМА

Руководитель В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Внутрикомплексные соли цефуроксима (HCfur) с Zn(II) и Cd(II) получены в виде осадков путем взаимодействия водных растворов ZnCl₂, CdCl₂ и NaCfur. Проведено исследование полученных образцов с использованием комплекса физических методов: электронно-зондового анализа (INCA Energy 350, JEOL JSM-6610LV), синхронного термического анализа (Netzsch STA 449 F3 Jupiter), ИК спектроскопии (Brucker Equinox 55). Проведен квантово-химический расчёт ИК спектра цефуроксима, парциальных зарядов атомов в анионе цефуроксима, пространственной структуры комплексов Zn(Cfur)₂ и Cd(Cfur)₂. Квантовохимические расчеты выполнены методом DFT с использованием гибридного функционала B3LYP и набора базисных функций 6-31G** (расчет ИК спектра, программа Spartan), 6-31G**++ (расчет парциальных зарядов, Jaguar), LACVP**++ (моделирование структуры комплексов, Jaguar).

Анализ результатов экспериментальных и теоретических исследований показал, что были получены комплексы состава Zn(Cfur)₂·3H₂O и Cd(Cfur)₂·3H₂O, в которых Zn(II) и Cd(II) координируют анионы цефуроксима через атомы кислорода карбоксилатной, бета-лактамной и карбаматной групп. Координационная сфера Cd(II) и Zn(II) – близкая к октаэдру, почти правильная тетрагональная бипирамида. Координационное число Cd(II) и Zn(II) равно 6. Молекулы воды в координационную сферу комплексов не входят.



Цефуроксим

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

РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ ПЛЕНОК ЦТС В ПОСТОЯННЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

Руководители: В.В. Иванов, О.Н. Сергеева
Тверской государственный университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Исследована релаксация реверсивной диэлектрической проницаемости в процессе переключения поляризации в самополяризованных пленках ЦТС, сформированных на ситалловых и кремниевых подложках, при воздействии постоянных электрических полей. Перед получением релаксационных зависимостей проводилось измерение вольт-фарадных характеристик на пленках ЦТС. По максимумам реверсивных зависимостей определялись напряженности коэрцитивных полей, при которых в последующем цикле измерялась релаксация емкости (диэлектрической проницаемости). На рис. 1 представлены релаксационные зависимости диэлектрической проницаемости пленок ЦТС при приложении постоянного электрического поля в направлении самополяризации.

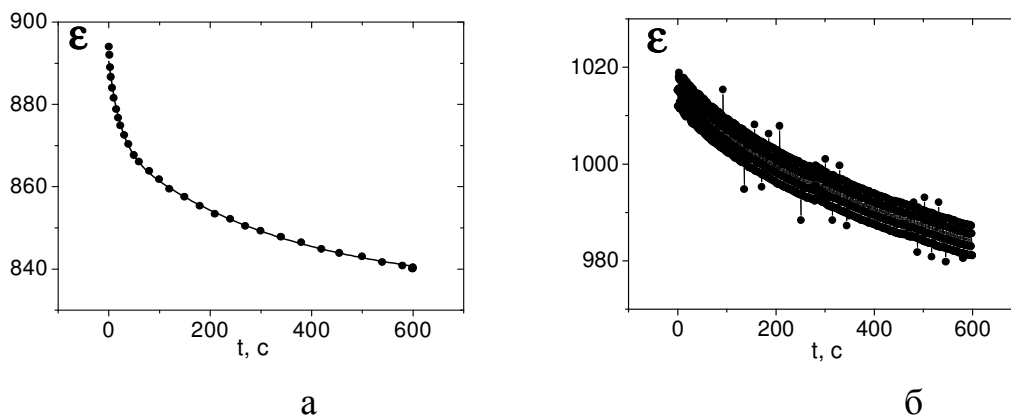


Рис.1. Релаксационные зависимости диэлектрической проницаемости пленки ЦТС: (а) точки – экспериментальные результаты; сплошная линия – аппроксимация суммой двух экспонент; (б) скачкообразные импульсы.

Из анализа релаксационных зависимостей (рис.1,а) видно, что процесс переключения поляризации характеризуется двумя временами релаксации τ_1 и τ_2 , соответствующими зародышеобразованию и движению доменных границ, причем в направлении естественной униполярности процесс переполаризации происходит быстрее. Так же стоит отметить тот факт, что при исследовании диэлектрической релаксации в больших измерительных полях обнаружены скачкообразные импульсы, сопровождающие перестройку доменной структуры (рис.1, б).

ПОЛУЧЕНИЕ И СВОЙСТВА ФЕРРИТОВ
НА ОСНОВЕ D-ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

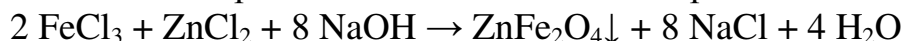
Руководитель Н.В. Веролайнен

Тверской Государственный университет

Кафедра органической химии

В последние годы интерес к магнитным суспензиям на основе ферритов неуклонно возрастает. Это связано с тем, что присутствию ионов переходных металлов в составе частиц дисперсной фазы повышает устойчивость этих частиц к окислению. А также вязкость таких суспензий может увеличиваться в 100 раз при увеличении магнитного поля в отличие от магнитных жидкостей, где вязкость увеличивается на 10-30%.

В настоящей работе феррит цинка получала методом химической конденсации высокодисперсного магнетита. Реакция протекала по схеме:



При получении сложного феррита ионы двухвалентного железа Fe^{3+} были полностью замещены ионами цинка Zn^{2+} ($\text{Fe}^{3+}/\text{Zn}^{2+}=2/1$). В синтезе использовали осушенную соль цинка (ZnCl_2), а в качестве осадителя – концентрированный раствор щелочи КОН для достижения наиболее полной сокристаллизации оксидов металлов.

Смешивали 2,2 г хлорида цинка () и 5,4 г хлорида железа () растворяли в воде и доводили до объема 300 мл при температуре 40°C.

Раствор гидроксида калия (5 г в 50 мл воды) при температуре 50°C приливали к раствору солей при интенсивном перемешивании, выпадал осадок черно-коричневого цвета. Раствор интенсивно перемешивали и давали отстояться.

Частички ZnFe_2O_4 оседали, светлую часть раствора удаляли с помощью разделительной воронки.

Образующийся в ходе реакции хлорид калия удаляли после многократного промывания большим количеством дистиллированной воды. Образовавшиеся магнитные частицы феррита цинка (ZnFe_2O_4) помещали в раствор олеата натрия для прохождения процесса адсорбции, затем полученную суспензию отфильтровывали. Далее проводили загущение системы с помощью ПЭГ-115 (30%). Полученную систему изучали методами седиментации. С помощью метода электронной микроскопии были получены электронные фотографии суспензии.

А.Д. Громова, П.С. Лихуша

ФЕРМЕНТАТИВНЫЕ СВОЙСТВА О-ДФО ЛЬНА В ХЛЕБОБУЛОЧНЫХ ИЗДЕЛИЯХ

Руководитель Г.П. Лапина

Тверской государственной университет

Кафедра физико-химической экспертизы биоорганических соединений

В производстве хлебобулочных изделий становится актуальным использование нетрадиционных для хлебопечения культур, содержащих значительное количество легкоусвояемых белков, витаминов и минеральных веществ. К такому сырью относится льняное семя и продукты его переработки. Белки льняного семени (20 – 25% массы) характеризуются высокой биологической ценностью и по аминокислотному составу напоминают белки сои, но с более высоким содержанием серосодержащих аминокислот. Однако параллельно с положительными эффектами этот новый компонент рецептуры может инициировать и некоторые негативные процессы со стороны ферментативных систем, сопровождаемые, например, снижением органолептических свойств. Ранее нами были изучены ферментативные параметры (определены и рассчитаны значения константы Михаэлиса (k_M) и константы каталитической (k_{kat}) о-ДФО 5-дневных проростков льна сорта Альфа р-1.

Нами определены кинетические параметры каталитической активности о-ДФО в 2-х системах, содержащих о-ДФО льна ($4,25 \cdot 10^{-5}$ М), пероксид водорода (0,882 М), при варьировании концентрации бензидина (10^{-3} М) 0,6 - 1,6, с добавлением отдельно ацетата натрия (0,882 М) и карбоната натрия (0,882 М). Выявлено, что значение k_M при добавлении ацетата натрия снижается в 3,9 раза, следовательно, сродство к субстрату повышается. Значение же k_{kat} снижается в 2,9 раз. При добавлении карбоната натрия значение k_M уменьшилось в 1,7 раза, значение k_{kat} также уменьшилось в 7,6 раз. Наблюдали псевдоактивацию фермента по типу Va. Основная способность реакций Va типа активации проявляется в снижении величин максимальных скоростей реакции ($V < V_{max}$) в присутствии таких активаторов при сохранении основного признака активации $Va > V_{max}$.

Итак, использование в рецептуре при изготовлении хлебобулочных изделий карбоната натрия считаем более предпочтительным в сравнении с ацетатом натрия, так как биокатализ в его присутствии ухудшается 2,6 раза.

ПОИАНИЛИН, КАК ЗАМЕДЛИТЕЛЬ КОРРОЗИИ СТАЛИ

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

В последнее время продолжается изучение физико-химических свойств электропроводного полимера – полианилина. Этот полимер получается из дешевого и доступного сырья, обладает интересными физико-химическими свойствами. На наш взгляд в литературе недостаточно уделено внимания его антикоррозийным свойствам. Поэтому целью настоящей работы была оценка антикоррозийных свойств полианилина.

В качестве материала подложки для проверки антикоррозийных свойств, мы решили использовать широко распространенную сталь-3. Синтез полианилина осуществляли по классической схеме, путём химической поликонденсации полианилина под действием окислителя. Реакция проводилась в водной среде, содержащей гидрохлорид анилина, HCl (1 М), в присутствии $\text{K}_2\text{S}_2\text{O}_8$. При этом полианилин получали в виде порошка темно-зеленого цвета, в форме соли эмеральдина. Отделяли центрифугированием. Отмывали от ионов хлора. Высушивали на воздухе.

Полианилин не растворяется и не плавится в обычных растворителях, но в литературе описано растворение полианилина в форме основания эмеральдина в N-пирролидоне. Поэтому, мы перевели полученную соль эмеральдина полианилина в основание, путем обработки его концентрированным раствором аммиака. Растворили в N-метилпирролидоне и получили раствор темно-фиолетового цвета. Для получения пленки полианилина на поверхности подложки, полученный раствор полианилина в N-пирролидоне наносили на подложку и высушивали при температуре 80°C . Таким образом, вся поверхность стали-3 была равномерно покрыта слоем полимера. Для антикоррозийных испытаний, обработанную таким образом пластину опускали на половину в 10% раствор NaCl . В качестве контрольного образца аналогичная пластинка стали-3, также помещалась в раствор NaCl . За коррозией следили гравиметрическим методом, а так же определением количества железа перешедшего в раствор в результате коррозии.

Было установлено, что полианилин со слоем покрытия, несмотря на то, что оно пористое, беспрепятственно пропускает раствор к поверхностям стальной пластинки, способен существенно замедлять коррозию. Механизм этого явления предстоит еще изучить, однако мы предполагаем, что он связан с пассивацией поверхности стали-3.

О.В. Долгасова, Е.М. Баранова, Н.В. Беличенко

ИЗМЕРЕНИЕ ВОДОРОДНОГО ПОКАЗАТЕЛЯ АТМОСФЕРНЫХ ОСАДКОВ

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

Рост числа промышленных предприятий и количества автотранспортных средств пагубно влияет на экологическую обстановку в регионе. В работе измеряли водородный показатель (рН) атмосферных осадков, собранных в черте города Твери и за его пределами с помощью иономера лабораторного И-160МИ.

Водородный показатель незагрязненной дождевой воды приблизительно равен 5,6, что определяется равновесной концентрацией растворенного диоксида углерода $\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_2\text{CO}_3$. В районе ДК Химволокно значение рН отобранных проб приближено к норме (5,54). К слабокислой относится дождевая вода, рН которой находится в пределах 4,86-5,54 (село Бурашево, которое расположено в 7 километрах от автомагистрали «Москва – Санкт-Петербург»).

Для снеговой воды (талой) характерен рН=6,85. Водородный показатель отобранных проб приближен к норме на берегах реки Тьмаки (6,77; 6,83) и в деревне Черногоубово (6,75). Значения рН талой воды ближе к кислотным наблюдались в промышленных районах города (в Юности – вблизи завода Центросвармаш и вагоностроительного завода, рН=5,27), а также с автомагистралями (на правом берегу Волги, рН=5,43). Значение водородного показателя талой воды смещено в кислую сторону, так как снег является природным адсорбентом [1]. Он образуется, когда микроскопические капли воды, с растворенным в них CO_2 , в облаках притягиваются к пылевым частицам и замерзают.

Проведенные нами исследования свидетельствуют о незначительных нарушениях экологической обстановки в промышленных районах города Твери [2].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. <https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A1%D0%BD%D0%B5%D0%B3>
2. Каплина С.П., Каманина И.З. Экологическое состояние окружающей среды урбанизированных территорий // Фундаментальные исследования. – 2014. - №6. – С. 760-764

А.В. Дрозд

КАЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ АРБУТИНА В РАСТИТЕЛЬНОМ СЫРЬЕ

Руководитель Темникова С.А.

Тверской государственный университет

Кафедра органической химии

В настоящее время препараты природного происхождения приобретают все больший вес в практической медицине. Одними из наиболее перспективных и часто используемых являются лекарственные растения, содержащие природные фенольные соединения, в том числе, флаваноиды [1].

Одной из основных групп фенольных соединений является фенолгликозид арбутин. Арбутин обуславливает антимикробное, противовоспалительное, диуретическое (мочегонное) действие [2].

В данной работе был осуществлен подбор условий для качественного определения арбутина в растительном сырье. В качестве исходного материала, содержащего арбутин в достаточных количествах, использовали листья толокнянки (6 %) и брусники (9 %), корневища бадана (22 %) [3].

Для извлечения сопутствующих веществ, использовали метод экстракции, были подобраны оптимальные условия для получения вытяжек. Известными качественными реакциями было подтверждено наличие арбутина в исходном растительном сырье.

Для идентификации арбутина был использован метод тонкослойной хроматографии. Анализ полученных хроматограмм подтвердил наличие арбутина в исследованных вытяжках.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Косман В.М. Идентификация фенольных соединений растительного происхождения методом обращено-фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии: автореф. дис. на соиск. учен. степ. канд. фарм. наук (15.00.02) / Косман Вера Михайловна; Санкт-Петербург, 1997. 24 с.
2. Смылова О.А. Исследования по идентификации и определению арбутина в уролитическом растительном сборе / О.А. Смылова / Современная медицина: актуальные вопросы. – 2015. № 3 (39). – С. 2 – 3.
3. Муравьева Д.А. Фармакогнозия: учебн. пособие для студентов фармацевтических вузов / Д.А. Муравьева, И.А. Самылина, Г.П. Яковлев. – 4-е изд., перераб. и доп. – Москва: изд. Медицина. –2002. – 659 с.

А.П. Дрынина

КОНСТАНТЫ КИСЛОТНОСТИ ЦЕФАЛОСОПРИНОВ: ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ

Руководитель В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Константы кислотно-основных равновесий в растворах цефалоспориновых антибиотиков цефазолина (Czl), цефуроксима (Cfur) и цефоперазона (Cpz) рассчитаны теоретически и определены экспериментально рН-метрическим методом. Для проведения теоретического расчета были использованы программы пакета Materials Science Suite (Schroedinger LLC). Модели были созданы в программе Maestro, оптимизированы методом молекулярной механики с использованием силового поля OPLS3 в программе Macro Model. Теоретические значения констант кислотности функциональных групп молекул были рассчитаны в программе Epik.

Экспериментальные значения констант кислотности карбоксильных групп молекул цефалоспоринов вычислены с использованием программы «Hyperquad» («Protonic Software») из кривых рН-метрического титрования 10^{-3} моль/л растворов натриевых солей антибиотиков 0.05 моль/л раствором HNO_3 на фоне 0.1 моль/л при 25 °С. В случае цефоперазона также было проведено титрование раствора его натриевой соли раствором NaOH для определения pK_a фенольной группы.

Результаты приведены в таблице. Интересно отметить, что теоретические константы, рассчитанные только лишь исходя из структурной формулы молекулы, достаточно хорошо согласуются с экспериментальными значениями. Полученные экспериментальные значения констант дополняют и уточняют имеющиеся немногочисленные литературные данные.

Равновесие	pK_a теоретический расчет	pK_a эксперимент
$\text{HCzl} \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{Czl}^-$	2.71 ± 0.86	2.49 ± 0.01
$\text{HCfur} \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{Cfur}^-$	2.43 ± 0.86	2.43 ± 0.01
$\text{H}_2\text{Cpz} \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{HCpz}^-$	2.69 ± 0.86	2.50 ± 0.01
$\text{HCpz}^- \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{Cpz}^{2-}$	9.80 ± 0.78	9.19 ± 0.02

В.С. Жихарев, М.В. Конкина, А.С. Семенев

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ ТЕРМОКАТАЛИТИЧЕСКОЙ ДЕСТРУКЦИИ КОСТРЫ ЛЬНА

Руководитель Ю.В. Луговой

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Для интенсификации методов термической переработки отходов биомассы направленных на получение энергии и полезных продуктов, часто применяются различные инициаторы и катализаторы [1]. Для количественного сравнения их активности используют экспериментально полученные кинетические параметры процесса [2].

Настоящая работа посвящена исследованию влияния хлоридов металлов подгруппы железа на кинетические параметры процесса термодеструкции костры льна. Для исследования влияния хлоридов металлов подгруппы железа на процесс термодеструкции костры льна были изготовлены образцы с 10% - ным содержанием. Исследование кинетики процесса термокаталитической деструкции костры льна было проведено на термовесах TG 209 F1 (NETZSCH) с различной скоростью нагрева (5, 10, 15 и 20°C/мин). По полученным термогравиметрическим кривым были рассчитаны кинетические параметры процесса термодеструкции в присутствии хлоридов металлов так и без их использования.

Было определено, что хлориды металлов подгруппы железа приводят к снижению термической устойчивости всех компонентов костры льна (гемицеллюлозы, целлюлозы и лигнина). Среди хлоридов металлов подгруппы железа наибольшей активностью обладает хлорид никеля. Данные масс-спектрометрического анализа газообразных продуктов термодеструкции костры льна показали, что в присутствии хлорида никеля существенно снижается молекулярная масса летучих продуктов, вероятно, за счет изменения механизма процесса термодеструкции. Использование хлорида никеля приводит к снижению энергии активации одной из стадий процесса термодеструкции костры льна на 38 ± 3 КДж/моль.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Huang, Y.F., et al. Bioresour. Technol. 2008, 99, 8252–8258.
2. M. E. Brown, et al. // Thermochimica Acta – 2000. – Vol. 355. – N 1-2. P. 125-143.

Е.А. Жукова, М.Н. Филяровская, Д.В. Аверкин

ПРОЦЕССЫ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ
В НИЗКОКОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ВОДНЫХ СИСТЕМАХ
НА ОСНОВЕ L-ЦИСТЕИНА И СОЛЕЙ КАДМИЯ

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

Тиолы (L-цистеин, N-ацетил-цистеин, глутатион – трипептид, содержащий L-цистеин) играют ключевую роль в защитном механизме клеток от неблагоприятного влияния ионов различных металлов благодаря высокой реакционной способности SH-группы. Ионы кадмия являются одним из природных поллютантов. На территориях с высоким содержанием ионов Cd(II) фиксируется повышенная заболеваемость, в том числе онкологических заболеваний. Ионы Cd(II) попадают в организм различными способами – с пищей, через кожу и т.д. В клетках соединения со свободными тиольными группами взаимодействуют с ионами Cd(II), связывая их, выполняя при этом функцию защитного антиоксиданта как внутри, так и вне клетки. Представляет интерес изучить взаимодействие различных солей кадмия – Cd(NO₃)₂ и Cd(Acet)₂ – с L-цистеином (L-Cys), глутатионом (Gly) и серином (Ser) с помощью УФ спектроскопии и динамического светорассеяния (ДСР). Для данного исследования были приготовлены серии растворов разных систем L-Cys–Cd(NO₃)₂, L-Cys–Cd(Acet)₂ и аналогичные системы на основе Gly и Ser с различной концентрацией исходных компонентов и их молярным соотношением. Растворы были приготовлены по методике синтеза цистеин-серебряного раствора (ЦСР)*. Концентрация L-Cys в исследованных образцах составляла 3,0 мМ, а молярное соотношение исходных компонентов Me²⁺/Cys варьировали в диапазоне 0,83-1,67. Электронные спектры образцов регистрировали сразу после смешивания исходных компонентов, а также через несколько дней. Установлено, что электронные спектры исследованных систем имеют существенные различия, поэтому можно предположить, что в некоторых системах протекают процессы комплексообразования, что подтверждается также данными ДСР. Однако в настоящий момент дать точную интерпретацию полученных результатов сложно, поскольку необходимы дальнейшие исследования.

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

А.О. Зайковская, Д.А. Абусуек

КАТАЛИЗАТОРЫ НА ОСНОВЕ НЕБЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ В
ПРОЦЕССЕ ГИДРИРОВАНИЯ ЛЕВУЛИНОВОЙ КИСЛОТЫ ДО
ГАММА-ВАЛЕРОЛАКТОНА

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

На фоне растущего мирового спроса на топливо и энергию, и сильной зависимости от нефтяных невозобновляемых ресурсов, идет поиск и изучение способов их замены на биотопливо. Благодаря этому, в последние годы повысилась ценность лигноцеллюлозной биомассы. Так, селективное гидрирование левоулиновой кислоты (ЛК), получаемой в ходе гидролиза целлюлозы, позволяет синтезировать гамма-валеролактон (ГВЛ), который находит широкое применение в качестве «зеленого» растворителя, а также служит исходным сырьем для получения компонентов жидких топлив [1]. Одной из основных проблем промышленного производства биотоплив является дороговизна катализаторов, содержащих благородные металлы. В связи с этим все большее внимание исследователей привлекают катализаторы на основе меди, никеля, железа и хрома. Использование данных металлов позволяет достичь высокой степени конверсии ЛК и селективности по ГВЛ [2]. Важно отметить, что выход ГВЛ при этом сильно зависит от таких факторов, как тип носителя, условия реакции (температура и давление) и природа растворителя. Ранее было показано, что синтезированные Ru-содержащие катализаторы на основе сверхсшитого полистирола (СПС) позволяют обеспечить высокие выходы ГВЛ (более 99%) [3]. Таким образом, СПС, как носитель, может использоваться и для стабилизации неблагородных металлов.

В рамках данной работы исследовалась возможность применения моно- и биметаллических катализаторов на основе Cu, Co, Fe и Ni, нанесенных на СПС, в реакции селективного гидрирования ЛК до ГВЛ.

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Tang X. [et al.] // Renewable and Sustainable Energy Reviews 2014. Vol. 40. P. 608.
2. Jiang K. [et al.] // Catalysis Today. 2016. V. 274. P. 55.
3. Проценко И. [и др.] // Вестник ТвГУ. 2015. № 4. P. 42.

ФОТОВОЛЬТАИЧЕСКИЕ ОТКЛИКИ И ВОЛЬТ-АМПЕРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЛЕНОК SiC

Руководители: А.В. Солнышкин, О.Н. Сергеева
Тверской государственной университет
Кафедра физики конденсированного состояния

В настоящей работе представлены результаты исследования фотовольтаических откликов (рис.1, а,в) и вольт-амперных характеристик (рис.1, б,г) пленок карбида кремния (SiC) толщиной порядка 100 нм, эпитаксиально выращенных методом твердофазного замещения на подложках кремния. Исследование фотовольтаического отклика проводилось динамическим методом при воздействии на гетероструктуру ИК-излучения длиной волны 980 нм и мощностью 220 мВт, модулированного импульсами прямоугольной формы с частотой 10 Гц. Полученный в результате светового воздействия сигнал регистрировался двухканальной платой сбора данных, подключенной к ПК, на второй канал которой подавался сигнал, воспроизводящий форму модулированного светового потока (опорный сигнал).

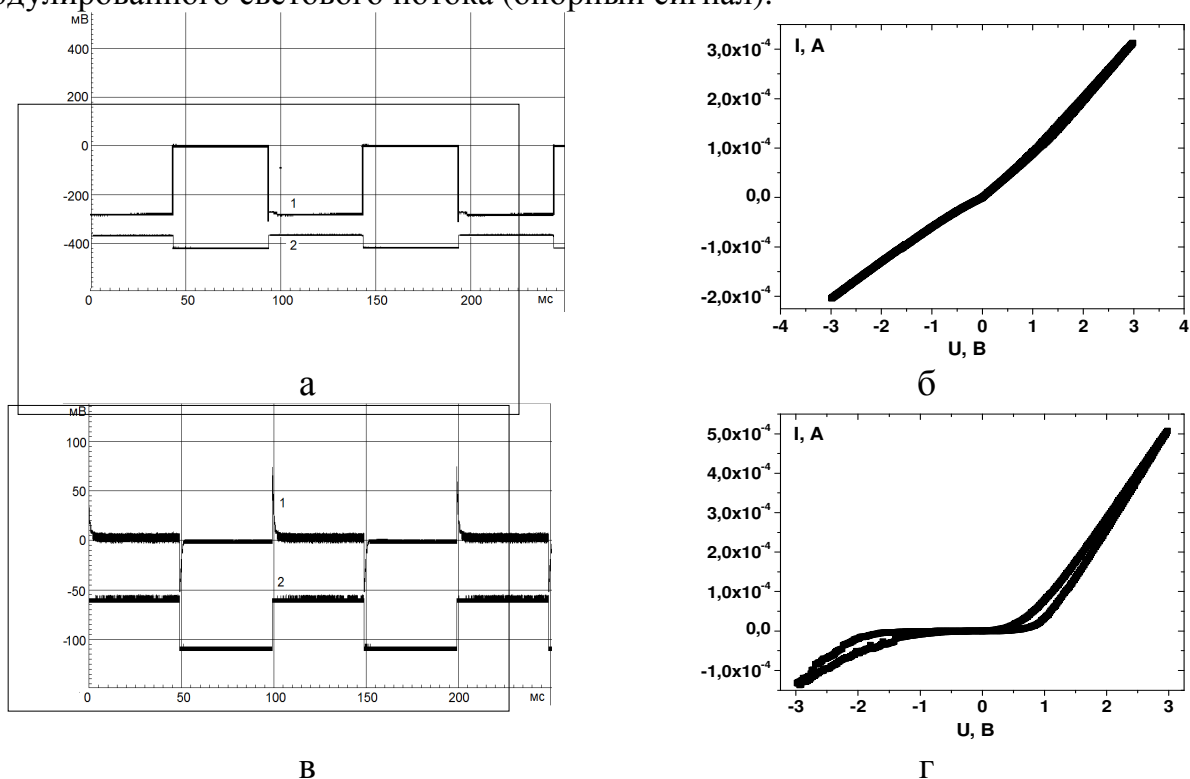


Рис. 1. Осциллограммы фотовольтаических откликов (а,в) пленочных гетероструктур SiC/Si с низкоомным (а,б) и высокоомным (в,г) слоями карбида кремния и соответствующие им вольт-амперные характеристики(б,г)

В работе показано, что формы фотовольтаических откликов зависят от удельного сопротивления карбида кремния, что наглядно демонстрируется различием в поведении проводимости при приложении смещающих электрических, определенной по вольтамперным характеристикам.

МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ ИНТЕГРАЛОВ МАТРИЦНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ГАМИЛЬТОНИАНА В БАЗИСЕ ФУНКЦИЙ МАТЬЕ

Руководители: Ю.Д. Орлов, А.Н. Белов
Тверской государственный университет
Кафедра общей физики

Задача определения характеристик внутреннего вращения молекул является одной из составляющей моделирования сложных молекулярных соединений. Было показано [Орлов Ю.Д., Туровцев В.В., Цирулев А.Н., 2015], что использование базиса, содержащего функции Матье, значительно оптимизирует численное решение торсионного уравнения Шредингера. Однако, такой подход требует вычисления интегралов, содержащих функции Матье и их производные. Например,

$$I = \int_0^{2\pi} \frac{\partial ce_m(q, \varphi)}{\partial \varphi} ce_k(q, \varphi) \frac{\partial ce_n(q, \varphi)}{\partial \varphi} d\varphi, \quad (1)$$

где $ce_n(q, \varphi)$, $se_n(q, \varphi)$ - функции Матье, n -их порядок, φ -двугранный угол внутреннего вращения, q -параметр, являющийся действительным числом. Интегрирование в аналитическом виде представляет значительные трудности. Функции Матье, входящие в (1) аппроксимируются рядами Фурье [Белов А.Н., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., 2016]. Численно интегралы вида (1) находятся как сумма произведений соответствующих коэффициентов Фурье-разложений [Белов А.Н., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., 2017]. Представленная работа посвящена автоматизации таких вычислений. В среде графического программирования LabVIEW создано приложение, позволяющее по загруженным коэффициентам Фурье-разложений вычислять интегралы вида (1). В перспективах – создание программы для автоматизированного вычисления элементов матрицы гамильтониана и поиска ее собственных значений.

РЕФРАКТОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
ВОДНЫХ РАСТВОРОВ 1-ДЕЦИЛПИРИДИНИЙ ХЛОРИДА

Руководитель Н. И. Белоцерковец

Тверской государственной университет

Кафедра физической химии

Исследование структуры и физических свойств ионных жидкостей ряда 1-алкилпиридиниевых солей в настоящее время относится к актуальным научным задачам. Одним из распространенных и экспериментально доступных структурных методов исследования является метод рефрактометрии.

В настоящей работе с помощью методов рефрактометрии и денситометрии определены экспериментальные значения молекулярной рефракции MR_D 1-децилпиридиний хлорида (10ПХ), хорошо согласующиеся с теоретическими, рассчитанными по аддитивной схеме.

Экспериментальные значения молекулярной рефракции MR_D рассчитывали по экспериментальным значениям показателя преломления n_D^{20} и плотности d_4^{20} по формуле [1]:

$$MR_D = r^* M,$$

где M – молярная масса вещества, г/моль; r – удельная рефракция, $\text{см}^3/\text{г}$, рассчитанная по формуле [2]:

$$r = \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \times \frac{1}{d}$$

Показатель преломления n серии водных растворов 10ПХ с различной концентрацией измерен на приборе ИРФ-454Б2М.

Плотность водных растворов d_4^{20} определена пикнометрическим методом в пикнометрах объемом 5,0 мл при 20°C [2].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Горбачев С. В., Практикум по физической химии. Учеб. пособие для вузов. Изд. 3-е, перераб.- М.: «Высш. школа», 1974 . – 496 с.
2. Гаузнер С.И., Кивилис С.С., Осокина А.П., Павловский А. Н. Измерение массы, объема, плотности. - М.: Издательство стандартов, 1972. – 623 с.

Н.Н. Иванов

КИСЛОРОДПЕРЕНОСЯЩИЕ КРОВЕЗАМЕНИТЕЛИ В СОВРЕМЕННОЙ МЕДИЦИНЕ

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

Кислородпереносящие кровезаменители делятся на искусственные растворы гемоглобина и перфтороуглеродные соединения. Они могут заменять функцию эритроцитов крови, то есть выполняют её транспортную функцию. Также они имеют дезинтоксикационные и пирогенные свойства.

Искусственные растворы гемоглобина прошли в своём развитии два поколения: первое и второе. Препараты первого поколения: гемоглобин, поперечно связанный диаспирином; человеческий рекомбинантный гемоглобин, синтезируемый *E. coli*; гемоглобин рафимер, полимеризованный человеческий гемоглобин; бычий гемоглобин, полимеризованный глутаровым альдегидом. В настоящее время используется только последний, так как данные препараты вызывали множество побочных эффектов и их использование приводило к смерти. Препараты второго поколения: гемоглобин, модифицированный малеимид-активированным полиэтиленгликолем; гемоглобин быка, подвергнутый внутримолекулярной сшивке *o*-аденозином в комбинации с восстановленным глутатионом и др. Они находятся на стадии преclinical или экспериментальных исследований. В России используются 2 препарата: «Эригем» (гемоглобин без стромы), «Галенпол» (создан на основе модифицированного полимеризованного гемоглобина).

Перфтороуглеродные соединения - биохимически инертные, густые жидкости, обладающие высокой способностью растворять газы и выполняющие функцию переноса и доставки кислорода без его химического связывания. Сейчас применяются в виде перфторана. Побочных эффектов при использовании не выявлено.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Усенко Л. В.// Перфторан в интенсивной терапии критических состояний. 1999, 56 с.
2. Селиванов Е.А. // Биомедицинский журнал MEDLINE. 2011. Т.12, С.990.

ВЛИЯНИЕ АГРОМЕЛИОРАТИВНЫХ ПРИЁМОВ ОБРАБОТКИ НА УРОЖАЙНОСТЬ КАРТОФЕЛЯ И СТРУКТУРУ УРОЖАЯ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии и земледелия

В данном опыте изучались способы и дозы внесения удобрений при грядовой технологии возделывания картофеля с запрограммированной урожайностью 40-45,0 т/га.

Урожайность картофеля на лучшем варианте при совместном внесении органических и минеральных удобрений перед формированием гряды составила 28,4 т/га. Прибавка урожая от удобрений составила 9,1 т/га или 48,5 % по сравнению с не удобрённым фоном (табл. 1). Прибавки урожая картофеля от применения КМН были более высокими, чем от эквивалентной дозы минеральных удобрений. Ленточное внесение органических и минеральных удобрений положительного результата не дало. Полученные результаты по урожайности подтверждаются данными по структуре урожая, наблюдениями за влажностью почвы, биологической активностью и минеральным азотом. Установлено, объемная масса почвы в период вегетации соответствовала оптимальным параметрам, а влажность почвы, в среднем за вегетацию, была ниже оптимального уровня – 44,9-50,5% от НВ (нижний предел оптимума – 60% от НВ). Наиболее низкая влажность почвы наблюдалась в фазу цветения картофеля – 31,7-34,3% от НВ. Дефицит влаги в почве в фазу клубнеобразования является основной причиной не получения запрограммированного урожая картофеля в этом году. В период клубнеобразования верхней границей оптимальной влажности почвы является влажность равная наименьшей влагоёмкости, а нижней 60-70 % этой величины. В связи с этим, несмотря на эффективность органических и минеральных удобрений, планируемый урожай ни на одном из вариантов достигнут не был.

Таблица 1. Урожайность картофеля в зависимости от видов, доз и способов внесения удобрений, 2016 г.

Вариант	Урожайность, т/га		Прибавка к контролю	
	Фактическая	Биологическая	т/га	%
1. Без удобрений (контроль)	18,4	20,3	-	100,0
2. КМН - 12 т/га	23,1	34,1	7,2	137,3
3. NPK – доза эквивалентная КМН	22,4	27,1	4,4	122,8
4. КМН (12 т/га) + NPK - планируемый урожай 45,0 т/га	23,5	32,0	7,7	139,9
5. КМН (12 т/га) + NPK – вар. 4 – внесение после посадки картофеля	26,0	32,1	9,1	148,5
6. КМН (9 т/га) + NPK – 75% от вар. 4	22,3	28,7	5,6	129,0
7. КМН (6 т/га) + NPK – 50% от вар. 4	21,4	25,9	3,9	120,2

Н.А. Калабин

ПРОГРАММНАЯ СИСТЕМА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ФОРМОВАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ВОЛОКОН

Руководитель А.Р. Хабаров

Тверской государственный технический университет

Кафедра ЭВМ

Стадия предпроектных исследований и расчетов является определяющей при разработке современных технологических процессов формования химических волокон. Реализовать и использовать математические модели технологических процессов формования химических волокон возможно только в программной системе. Основная функция разработанной программной системы ForcesResearch – моделирование и анализ сил, воздействующих на формируемое волокно при формованиях волокон из расплава с приемным устройством.

Приложение написано на языке Java (версия jre 1.7) в интегрированной среде разработки IntelliJIdea 13.1 CommunityEdition и представляет собой desktop-приложение. При разработке архитектуры приложения реализована концепция Model-view-controller (MVC, «модель-представление-поведение»). Приложение проектировалось в соответствии с основными принципами объектно-ориентированного программирования: инкапсуляция, наследование, полиморфизм.

Основные функции приложения:

1. Схематичное отображение схемы технологического процесса;
2. Хранение в базе данных программы значений по умолчанию всех элементов технологического процесса и расчетной схемы;
3. Редактирование параметров схемы;
4. Сохранение проекта в файл с целью последующей его загрузки;
5. Проведение моделирования по созданной модели.

Графический интерфейс пользователя проектировался таким образом, чтобы он пояснял технологическую схему процесса формования и показывал в условном виде связи между его элементами и их характеристиками.

Работоспособность разработанной программной системы предпроектных исследований технологических процессов формования химических волокон подтверждается результатами моделирования [1].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kalabin A.L., Udalov E.V. Dynamic characteristics of filament melt-spinning // Fibre Chemistry. 2013. 44. № 6. pp. 356-360.

А.И. Камшилина, А.В. Чагина

ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ ЧАЙНОГО ГРИБА

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

В настоящее время широко известен напиток, именуемый «Kombucha» или по-русски «Камбуча». Под таким заморским названием скрывается обычный чайный гриб, используемый нашими бабушками с древних времен для различных целей: употребляли внутрь ото всех недугов, с его помощью лечили разнообразные заболевания, делали примочки и просто наслаждались этим вкуснейшим напитком. Производители предлагают разнообразные вкусы этого лакомства, но самым распространенным является чайный гриб, заваренный в сладком чае.

Целью исследования является изучение влияния факторов культивирования на состав культуральной жидкости чайного гриба.

Перед началом экспериментов проводили микроскопирование исходного образца. Были обнаружены дрожжи и палочковидные бактерии. Для подтверждения гипотезы, что это уксуснокислые бактерии было произведено окрашивание мазка по Граму. Бактерии были окрашены в красный цвет, т.е. являются грам-отрицательными, как и уксуснокислые. Обнаружение уксусной кислоты в культуральной жидкости гриба свидетельствует о том, что в состав гриба входят уксуснокислые бактерии.

В ходе исследования было определено, что на поверхности гриба обитают уксуснокислые бактерии (*Acetobacter*), которые окисляют этиловый спирт в уксусную кислоту, с нижней стороны – дрожжи (*Saccharomyces*), сбраживающие сахар с образованием спирта. То есть чайный гриб представляет собой взаимовыгодные отношения бактерий и дрожжей. При этом соотношение дрожжей и уксуснокислых бактерий в плодовом теле медузомицета зависит от условий культивирования.

Объект исследования выращивали на различных сортах чая (черный, зеленый, с ароматом малины). При культивировании на зеленом чае и на малиновом чайный гриб терял свою активность и образовывал на поверхности раствора новую пленку уксуснокислых бактерий. При этом в культуральной жидкости увеличивалась концентрация спирта. Наибольший прирост биомассы медузомицета наблюдался на 3-4 неделе на черном чае.

Таким образом, состав питательной среды влияет на развитие медузомицета.

А.Ю. Картошкин

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ СЕГРЕГАЦИИ В НАНО ЧАСТИЦАХ Ni-Cu

Руководитель В.М. Самсонов

Тверской государственный университет

Кафедра общей физики

Термодинамический подход [1], предложенный для описания сегрегации границ зерен размером более 100нм, распространен на свободные бинарные наночастицы произвольного радиуса. На рис. 1 результаты термодинамического моделирования сравниваются с результатами молекулярно-динамического (МД) моделирования частиц Ni-Cu.

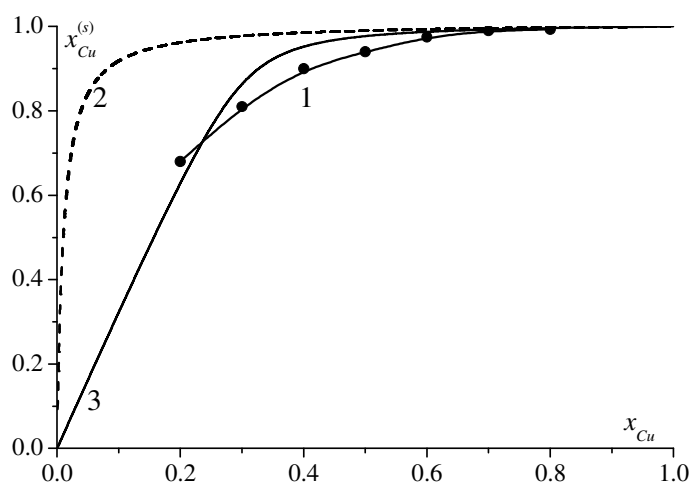


Рис.1 Зависимость атомных долей $x_{Cu}^{(s)}$ для Cu в поверхностных слоях бинарных наночастиц Ni-Cu, состоящих из 2000 атомов, от атомных долей x_{Cu} в начальных конфигурациях с однородным распределением компонентов: 1 - МД; 2 - теоретическая модель в приближении бесконечного резервуара сегрегирующегося компонента; 3 - термодинамические результаты, полученные в предположении о конечной природе источника атомов Cu.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kartay G. // J. Mater. Sci. 2016. V. 51. P. 1738.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОКТАДЕЦИЛАМИНА В РАБОЧЕМ ТРАКТЕ
АТОМНЫХ ЭЛЕКТРОСТАНЦИЙ ПРИ КОНСЕРВАЦИИ
ОБОРУДОВАНИЯ МЕТОДОМ СПЕКТРОФОТОМЕТРИИ

Руководитель М.А. Феофанова

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Многие атомные электростанции для защиты от коррозии оборудования используют разные водо-химические режимы среди которых можно выделить режим «октадециламин – гидразин». Для консервации оборудования в тракт дозируют октадециламин из расчета концентрации его от 300 до 500 мкг/дм³ (допустимая концентрация в трактах вод).

Для контроля концентрации реагента в данном процессе ведут количественное определение октадециламина с разных точек тракта, проверяя вхождение в интервал заданных концентраций. Определение основано на спектрофотометрическом измерении пробы при длине волны 440 нм, содержащей октадециламин и метиловый оранжевый, образующих комплекс. При этом важен момент извлечения комплекса из водной фазы в органическую. В качестве экстрагента по стандартной методике используют хлороформ.

В нашей работе хлороформ был заменён на другие органические экстрагенты с целью выбора альтернативных, более оптимальных условий, для спектрофотометрического определения октадециламина. Среди ряда реагентов нами были опробованы следующие: дихлорэтан, четырёххлористый углерод, дихлорметан, петролейный эфир, гексан.

Органические реагенты, которые были заменены в стандартной методике, дали альтернативную возможность количественно определить октадециламин в исследуемых пробах, получив удовлетворительные результаты.

ПРОЦЕССЫ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ МЕДЬ- И НИКЕЛЬСОДЕРЖАЩИХ
КРИСТАЛЛОВ ТРИГЛИЦИНСУЛЬФАТА

Руководитель Н.Н. Большакова
Тверской государственной университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Введение примесей в монокристаллы ТГС оказывает влияние на его процессы переполяризации, точку фазового перехода и диэлектрические свойства. Целью настоящей работы явилось получение информации о влиянии двойного легирования кристаллов триглицинсульфата ионами Cu^{2+} и Ni^{2+} на их диэлектрические свойства и процессы переполяризации. Емкость образцов измерена с помощью универсального моста Е7-4, диэлектрическая проницаемость (ϵ) рассчитана по формуле плоского конденсатора. Петли диэлектрического гистерезиса получены с помощью схемы Сойера – Тауэра.

Установлено, что для большинства исследованных составов ТГС: Cu^{2+} : Ni^{2+} петли диэлектрического гистерезиса прямоугольны и симметричны. Незначительные искажения наблюдаются для образцов, выращенных при $T_r=52$ °С и содержащих 3 мол. % примесей в растворе.

В случае кристаллов, выращенных при $T_r=35$ °С, величины диэлектрической проницаемости возрастают от 30 до 110 с ростом концентрации примесей в растворе, а для $T_r=52$ °С, значения ϵ уменьшаются от 50 до 20. Величины переключаемой поляризации уменьшаются, а коэффициента униполярности и коэрцитивного поля возрастают. С увеличением температуры роста кристалла ТГС: Cu^{2+} : Ni^{2+} и концентрации примесей положения максимумов кривых $\epsilon(T)$ смещаются в высокотемпературную область на (2-3) °С.

Поведение характеристик переключения и диэлектрических свойств кристаллов ТГС: Cu^{2+} : Ni^{2+} связаны с особенностями вхождения этих примесей в кристаллическую решетку кристаллов ТГС. Ионы меди создают незаряженный, планарный хелатный комплекс $[\text{CuGl}_2]^0$, а ионы никеля - заряженный комплекс $[\text{NiGl}_3]^{-1}$.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ СОПОЛИАМИДА-6Т

Руководитель Е.И. Лагусева

Тверской государственной технической университет
Кафедра технологии полимерных материалов

Полиамиды по объему производства занимают первое место среди конструкционных термопластов. Расширение марочного ассортимента и областей применения зависит от нового подхода к способам их синтеза.

Реакционное формование полиамидных фибридов – совмещенный процесс синтеза гетероцепных полимеров из мономеров газожидкостной поликонденсацией и одновременного формования фибридов непосредственно в реакционной камере реактора-фибридатора (без применения органического растворителя и осадителей).

Полиамидные фибриды, получаемые методом реакционного формования, обладают рядом преимуществ в сравнении с фибридами, получаемыми методом гидродинамического формования: повышенная связующая способность и пониженный расход в композициях бумаг и фильтрэлементов, возможность широкого варьирования размеров частиц, повышенная анизометричность и спиралевидная морфология волокон).

В данной работе проведен анализ пористости полиамида 6Т на анализаторе Beckman Coulter SA3100. Графическая интерпретация данных приведена на рисунке.

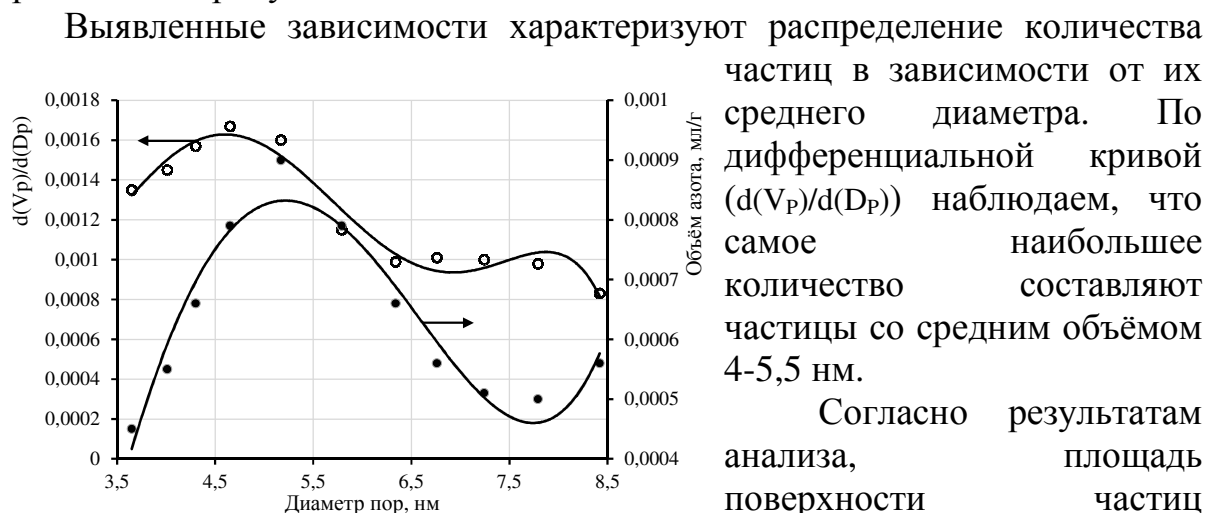


Рисунок – Зависимость объёма азота и соотношения $d(V_p)/d(D_p)$ от размера пор

Выявленные зависимости характеризуют распределение количества частиц в зависимости от их среднего диаметра. По дифференциальной кривой ($d(V_p)/d(D_p)$) наблюдаем, что самое наибольшее количество составляют частицы со средним объёмом 4-5,5 нм.

Согласно результатам анализа, площадь поверхности частиц составляет 10,768 м²/г, что говорит о том, что исследуемый полиамид 6Т –

мезопористый, для которого характерны поры с диаметром от 2 до 50 нм. Объём мезопор является лимитирующим параметром адсорбции на пористых адсорбентах.

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ПРОИЗВОДНЫХ N-БУТИЛМОРФОЛИНИЯ

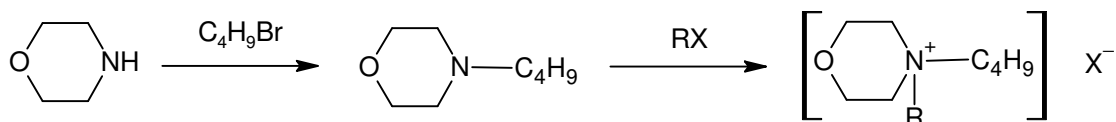
Руководитель Л.И. Ворончихина

Тверской государственной университет

Кафедра органической химии

К важнейшим шестичленным неароматическим циклам с двумя гетероатомами относится морфолин (тетрагидрооксазин), который по строению и свойствам является одновременно вторичным амином и циклическим эфиром. Гидрохлориды морфолина и четвертичные соли N-алкилморфолиния представляют интерес как антистатические препараты, бактерициды, ингибиторы коррозии.

В настоящей работе получены четвертичные соли N-бутилморфолиния содержащие длинноцепочечные радикалы и принадлежащие к классу катионных поверхностно-активных веществ (ПАВ). N-бутилморфолин получен алкилированием морфолина бутилбромидом (соотношении реагентов 2:1) без растворителя при 50-60°C в течение 6-8 часов; продукт реакции перегоняли в вакууме. Четвертичные соли N-бутилморфолиния получены кватернизацией высшими алкилгалогенидами при 60-70°C в течение 8-10 часов.



где: R = C₉H₁₉; C₁₀H₂₁; C₁₂H₂₅; C₁₆H₃₃

X = Br; I.

Четвертичные соли представляют собой кристаллические вещества; состав и строение подтверждены элементным анализом и ПМР-спектроскопией. Принадлежность к катионным ПАВ подтверждена тестом с бромфеноловым синим и перманганатной пробой. Изучены коллоидно-химические свойства водных растворов четвертичных солей N-алкилбутилморфолиния; снижение поверхностного натяжения воды, пенообразующая и смачивающая способности. Показано, что все исследованные соли принадлежат к мицеллообразующим ПАВ и снижают поверхностное натяжение воды до 48-32 мН/м в зависимости от длины гидрофобного радикала.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ
1- и 2-ФТОРЗАМЕЩЕННЫХ АЛКАНОВ

Руководитель Н.П. Русакова

Тверской государственный университет

Кафедра общей физики

Целью данной работы является исследование и сравнение индуктивного влияния фторов в соединениях 6-фторундекана, 6,6-дифторундекана, а так же структурных изомерах k -фтороктана (k -FC₈H₁₇) и k,k -дифтороктана (k,k -F₂C₈H₁₆), где k - это положение атомов фтора на углеводородной цепи, $1 \leq k \leq 8$.

Равновесная геометрия и распределение электронной плотности молекул исследованных молекул были получены с помощью программы GAUSSIAN 03 методом B3LYP/6-311++G(3df,3pd). Заряды q , энергии E и объемы V «топологических» атомов были вычислены в рамках «квантовой теории атомов в молекулах» QTAIM с использованием программы AIMALL и суммированы в параметры функциональных групп $q(R)$, $E(R)$ и $V(R)$. Погрешность расчёта парциальных зарядов составила не более 0,001 а.е. (1 а.е. заряда = $1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл), энергий – не более 0,1 кДж/моль, объемов – не более 0,1 Å³.

Сравнение $q(R)$, $E(R)$ и $V(R)$ для всех изученных соединений показало, что дальность индуктивного влияния от атомов F внутри углеводородного скелета – 2 группы CH₂ в каждую сторону (от фторсодержащего фрагмента -CHF- и -CF₂-). В результате сопоставления $q(R)$, $E(R)$ и $V(R)$ в рассмотренных рядах выделены электронные параметры переносимых групп. Соотнесение $q(R)$ так же позволило получить индивидуальные шкалы электроотрицательностей. Для монофторалканов: $\chi(\text{CH}_2) < \chi(\text{CH}_3) < \chi(\text{CH}_2\text{F}) < \chi(\text{CHF}) < \chi(\text{F})$, для дифторалканов: $\chi(\text{CH}_2) < \chi(\text{CH}_3) < \chi(\text{CHF}_2) < \chi(\text{CF}_2) < \chi(\text{F})$. Итоговая шкала электроотрицательности будет иметь вид: $\chi(\text{CH}_2) < \chi(\text{CH}_3) < \chi(\text{CH}_2\text{F}) < \chi(\text{CHF}) < \chi(\text{CHF}_2) < \chi(\text{CF}_2) < \chi(\text{F})$.

Статья выполнена в рамках выполнения научно исследовательской работы «Разработка программного комплекса для расчета термодинамических свойств органических соединений» по договору с Фондом содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере №9498ГУ/2015 от 28.12.2015

ОПРЕДЕЛЕНИЕ НЕКОТОРЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ КИСЛОТ ВО
ФРУКТОВЫХ СОКАХ МЕТОДОМ ТОНКОСЛОЙНОЙ
ХРОМАТОГРАФИИ

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

В последнее время участились случаи фальсификации фруктовых соков. В качестве основных ингредиентов недобросовестные производители используют различные органические кислоты: лимонную, яблочную, молочную. Наиболее простым методом определения этих соединений в сложных смесях без предварительного разделения является хроматографический метод, поэтому цель настоящей работы - изучение возможности использования метода тонкослойной хроматографии для определения указанных выше органических кислот.

На наш взгляд, наиболее перспективным для достижения поставленной цели является метод тонкослойной хроматографии, не требующий дорогостоящего оборудования и длительного времени, достаточно селективный. Тонкослойную хроматографию проводили на пластинках «silufol».

Основная сложность данной работы заключалась в подборе оптимального состава подвижной фазы и проявляющего агента. В качестве ускорителя в подвижной фазе чаще всего используется вода, в качестве замедлителя - различные спирты. В качестве стабилизатора рН мы решили использовать раствор аммиака. Предварительные эксперименты показали, что в качестве замедлителей возможно использовать этиловый, изопропиловый и другие спирты. Остановились на этиловом, и в результате эксперимента установили, что соотношение компонентов в подвижном растворителе составляет: аммиак(25%):H₂O:C₂H₅OH=7,5:2,5:25 по объёму. Для проявления хроматографической зоны мы использовали для окрашивания раствор на основе спирта, содержащий анилин, L-арабинозу. Количественную оценку производили по площади хроматографической зоны каждого компонента. Для этого полученные хроматограммы оцифровывались и обрабатывались при помощи программы «Хромоскан». Полученные результаты на модельных смесях дают возможность утверждать, что разработанная методика позволит определить наличие исследуемых кислот в минимальных количествах 0,02 мг/мл. Относительная погрешность не превышает 10%.

Т.о., разработанная методика была проверена на фруктовых соках с искусственно добавленными органическими кислотами и показала надёжные результаты.

М.В. Кротченко

МЕТОД ИК-СПЕКТРОСКОПИИ В АНАЛИЗЕ ЭФИРНЫХ МАСЕЛ

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

Эфирные масла активно используются в медицине и традиционной фармакологии. Они обладают широким спектром целебных свойств, таких как противовоспалительные, антибактериальные, противовирусные, тонизирующие, заживляющие и др. Поэтому натуральные эфирные масла становятся всё более популярными не только как лекарственное средство, но и как объект для исследований.

Целью данной работы является исследование состава эфирных масел с помощью ИК-спектроскопии, которая позволяет установить качественный состав исследуемого объекта. В работе изучались масла чайного дерева, лимона, жожоба, пименты, лаванды, розмарина, семян брокколи. Исследования проводились при помощи инфракрасного спектрофотометра с преобразованием Фурье IRPrestige-21 (Shimadzu) с приставкой диффузного отражения DRS-8000.

Анализ полученных в ходе исследования ИК-спектров проводился при помощи таблиц характеристических частот. На спектрах были зарегистрированы: пики (обычно не выше 3000 см^{-1}), соответствующие колебаниям углеродных связей, пики на частоте 1750 см^{-1} , которые могут подтверждать присутствие как карбонильных групп, так и эфирной С-О-С связи, пики в диапазоне $1480\text{-}1450\text{ см}^{-1}$, свидетельствующие о присутствии таких фрагментов органических соединений, как $-\text{CH}_3$ и $-\text{CH}_2-$. На каждом спектре присутствует особая область, называемая “областью отпечатков пальцев”, которая находится в диапазоне $1500\text{-}500\text{ см}^{-1}$. Например, у масла лаванды в этой области, в диапазоне $1450\text{-}1250\text{ см}^{-1}$, расположены колебания гидроксильной С-ОН группы, подтверждающие присутствие в числе компонентов терпенового спирта линалоола. На частотах $1420\text{-}1410\text{ см}^{-1}$, 905 см^{-1} , $1680\text{-}1620\text{ см}^{-1}$, $730\text{-}700\text{ см}^{-1}$, $1100\text{-}900\text{ см}^{-1}$ наблюдаются колебания неопределённых двойных связей.

В большинстве случаев состав масел подтвердился, при этом можно уверенно сказать, что целебные свойства таких масел будут соответствовать заявленным.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тарасевич Б.Н. ИК спектры основных классов органических соединений: справочные материалы; МГУ имени М.В. Ломоносова — Москва 2012.

ЭНЕРГИИ РАЗРЫВА СВЯЗИ ОЛОВООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

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

Целью настоящей работы является – установление количественных корреляций “структура – свойство” в оловоорганических соединениях.

Для достижения поставленной цели в работе решались следующие задачи:

4. Оценка составления и анализ экспериментальных данных по энергии разрыва связи в исследуемых соединениях.
5. Построение расчётных схем и проведение численных расчетов,
6. Построение и анализ графических зависимостей “эсвойство– степень замещения”.

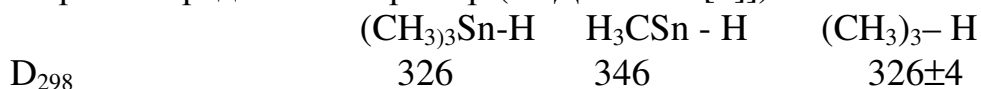
В работе применялись – феноменологические методы, основывающиеся на концепции попарных и более сложных взаимодействий атомов в молекуле.

В результате проделанной работы были проанализированы графические зависимости “свойство – степень замещения l ” оловоорганических соединений. Найдено, что они в общем случае нелинейны, однако линии замещения на одну и ту же группу симбатны между собой.

Данные зависимости также позволяют графическим путем получить недостающие значения свойств.

Также в работе были выявлены отдельные закономерности, связывающие энергию Гиббса со строением оловоорганических соединений.

1. Энергии разрыва связей D_{298} в выбранных соединениях изменяются в широких пределах. Например (в кДж/моль [1]):



2 Величины D_{298} с уменьшаются при увеличении степени замещения. Например (в кДж/моль [1]):



В результате проделанной работы проведена оценка состояния численных данных по энергиям разрыва связи оловоорганических соединений, выведены рабочие формулы по которым проведены численные расчёты, согласующиеся с экспериментом, получены новые данные.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЛАВЛЕНИЯ И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ В НАНОКЛАСТЕРАХ Pt

Руководитель В.М. Самсонов

Тверской государственной университет

Кафедра общей физики

В данной работе представлены размерные зависимости температур плавления и кристаллизации наночастиц платины (рис. 1), полученные с использованием потенциала сильной связи [1]. Результаты молекулярно-динамического моделирования свидетельствуют о достижении макроскопической температуры плавления 2045К при размере частицы, равном 2300 атомов, что свидетельствует о перегреве частицы. Большое различие температур плавления и кристаллизации также подтверждает сделанный вывод. На данном этапе уменьшение скорости изменения температуры осложнено ограниченными возможностями вычислительной техники.

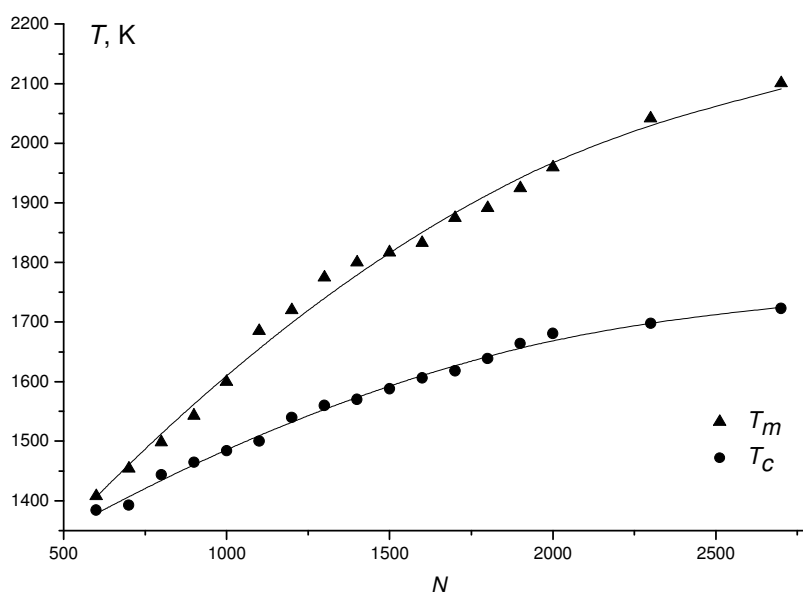


Рис. 1. Размерные зависимости температуры плавления T_m и температуры кристаллизации T_c для нанокластеров Pt.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Cleri. F., Rosato V. // Phys. Rev. B. 1993. V.48, №1. P. 22.

Д.С. Кутузов, Н.В. Айдинян, П.В. Иванова, М.П. Брызгина

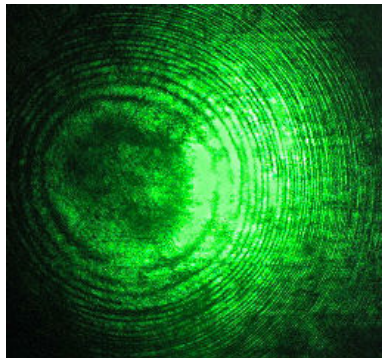
ПРИМЕНЕНИЕ ЛАЗЕРНОЙ КОНОСКОПИИ ДЛЯ ОБНАРУЖЕНИЯ ОПТИЧЕСКИХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ В ОДНООСНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Руководитель А.И. Колесников

Тверской государственный университет

Кафедра прикладной физики

Разработанный в последнее десятилетие метод лазерной коноскопии позволяет выявлять не только грубые аномалии в кристаллах, например, но и очень слабые искажения оптической индикатрисы, соответствующие малым вариациям показателей преломления обыкновенного $\Delta N_o/N_o$ и необыкновенного $\Delta N_e/N_e$ лучей – не более 10^{-5} . В настоящей работе технические преимущества лазерной коноскопии были дополнены использованием математического аппарата, предназначенного для сравнения экспериментально получаемых форм изохром в коноскопической картине кристалла с их теоретической формой для идеального кристалла. Целью исследований являлось определение неоднородностей показателей преломления в крупногабаритных булях монокристаллов парателлурифта и ниобата лития – важнейших материалах современной акустооптики. Для этого были рассчитаны с помощью специальной компьютерной программы теоретические формы изохром, по уравнению, записанному без обычно применяемых упрощений. При



сравнении теоретических и экспериментальных форм изохром, произведенным с использованием этой же компьютерной программы. В частности для коноскопической картины кристалла парателлурифта, представленной на рисунке, были получены вариации показателей преломления до $7 \cdot 10^{-6}$, что находится на уровне точности определения этих величин, задаваемым ГОСТом и ИСО, предусматривающими применение значительно более громоздкой и дорогостоящей аппаратуры, чем используемая в методе лазерной коноскопии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kolesnikov A.I., Tretiakov S.A., Grechiskin R.M., Morozova K.A., Yushka K.B., Molchanov V.Ya. Linde B.B.I. A Study of Optical Uniformity of Lithium Niobate and Paratellurite Crystals by the Method of Conoscopy // Acta Physica Polonica A. 2015. № 1. V. 127. P. 84-86.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА
ЛИСТЬЕВ *CONVALLARIA MAJALIS* L. В ФИТОЦЕНОЗАХ С
РАЗЛИЧНОЙ СТЕПЕНЬЮ РЕКРЕАЦИОННОЙ НАГРУЗКИ С
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ИК-ФУРЬЕ СПЕКТРОСКОПИИ

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

Целью настоящей работы явилось изучение химического состава листьев *Convallaria majalis* L. в фитоценозах в составе лесов Торжокского района Тверской области.

Выбор сырьевой базы для анализа растений был обусловлен наименьшей преобразованностью фитоценозов и разной их связью с рекреационной нагрузкой. Фоновым образцом послужила аптечная форма ландыша.

Для получения ИК спектров образцов листьев использовалась стандартная методика приготовления таблеток с бромидом калия (KBr).

Зарегистрированные ИК спектры образцов листьев *C. majalis* из разных мест сбора были интерпретированы по таблицам характеристичных колебательных частот органических соединений.

ИК-спектральный анализ показал, что во всех спектрах исследованных образцов обнаружены полосы поглощения, отражающие общий химический состав листьев ландыша.

Сравнительное рассмотрение спектров всех образцов листьев ландыша майского показало их статичное числовое положение в области валентных и деформационных колебаний на частотах: ~ 3410 , ~ 2922 , ~ 2853 , ~ 1736 , ~ 1636 , ~ 1516 , ~ 1405 см^{-1} . Указанная закономерность говорит о большой степени благоприятности условий для произрастания ландыша и об определенной устойчивости химического состава — в пределах указанного диапазона частот — растения к антропогенной нагрузке.

Особое внимание привлекает область валентных и деформационных колебаний на частотах ~ 1365 – 536 см^{-1} , поскольку именно в этой области установлены основные различия для ряда характеристических полос поглощения.

Обнаружено закономерное появление ряда сульфоновосодержащих групп, составляющим веществом которых является сернистый ангидрид — загрязнитель атмосферы.

В ходе спектрального анализа удалось установить корреляционную зависимость между интенсивностью поглощения и частотой полос спектров.

В.С. Лагусева, Е.А. Жукова, М.Н. Филяровская

ПОЛУЧЕНИЕ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ L-ЦИСТЕИНА И НИТРАТА СЕРЕБРА ОДНОСТАДИЙНЫМ СПОСОБОМ

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

Гидрогели широко используются в медицине, фармацевтике, тканевой инженерии, хроматографии и т.д. Особый интерес среди гелеобразующих систем представляют супрамолекулярные гели на основе низкомолекулярных соединений, таких как аминокислоты, пептиды. В данной работе изучаются низкоконцентрированные гелеобразующие системы, супрамолекулярные по своей природе, на основе аминокислоты L-цистеин и нитрата серебра. Инициатором гелеобразования в них является хлорид натрия. Цель исследования – получение гелей одностадийным методом путем одновременного смешивания всех исходных компонентов, включая инициатор, и изучение процессов структурирования с помощью различных методов.

В работе исследовано два типа образцов: в одних варьировалось содержание нитрата серебра, при этом молярное соотношение компонентов изменяли в интервале Ag^+/Cys 1,33 – 2,00, концентрация L-цистеин составляла 3,0 мМ; в других образцах изменяли содержание хлорида натрия в системах с молярным соотношением $Ag^+/Cys = 1,50$ и 1,67.

В результате проведенных исследований было установлено, что большей гелеобразующей способностью обладают образцы с молярным соотношением компонентов $Ag^+/Cys = 1,67 – 2,00$ и концентрацией NaCl 0,75 – 1,50 мМ. Полученные гели оказались достаточно устойчивы во времени. В электронных спектрах свежеприготовленных образцов, зарегистрированных на спектрофотометре «Evolution Array» фирмы «Thermo Scientific» USA, обнаружены полосы поглощения с максимумами ~340 нм и ~390 нм. Установлено, что с течением времени интенсивность этих полос несколько увеличивается, что может свидетельствовать об увеличении концентрации супрамолекулярных фрагментов формирующейся гель-сетки. Согласно данным динамического светорассеяния в системах присутствуют агрегаты, гидродинамический диаметр которых составляет около 80 нм.

Таким образом, удалось реализовать гелеобразование в системе L-цистеин - нитрат серебра с хлоридом натрия в одну стадию и получить устойчивые во времени гидрогели с различным содержанием нитрата серебра и хлорида натрия.

Г.А. Лебедев, А.Т. Дибердиева, Н.А. Беличенко

В.Ф. ВОЙНО-ЯСЕНЕЦКИЙ: РАБОТА НАД «ОЧЕРКАМИ ГНОЙНОЙ ХИРУРГИИ» В ГОДЫ ВЕЛИКОЙ ОТЕЧЕСТВЕННОЙ ВОЙНЫ

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

Одним из самых известных произведений святителя Луки (Войно-Ясенецкого) является фундаментальный труд «Очерки гнойной хирургии». Он был задуман еще в годы работы святителя в уездных больницах. Клинический материал В. Ф. Войно-Ясенецкий собирал более 20 лет. В нем обобщен мировой и огромный личный опыт в диагностике и лечении гнойно-септических заболеваний. Эта книга создавалась именно как пособие врачам и хирургам для оказания помощи больным в условиях полевой хирургии. Ценность книги тем выше, что выпуск её пришелся на то время, когда в ней нуждались как никогда. До неё никаких фундаментальных трудов по полевой гнойной хирургии не существовало.

Впервые книга была опубликована в 1934 году. За год до начала Великой Отечественной войны, летом и осенью 1940 года, епископ Лука начал работу над вторым изданием «Очерков». Это требовало серьезных усилий: нужно было восстанавливать то, что было уничтожено следователями, ведущими его уголовное дело осенью 1938 года. С началом Великой Отечественной войны епископ Лука ускорил подготовку второго издания, так как понимал, что уровень военно-медицинской помощи является важным критерием при том положении, в котором находилась Красная Армия. Епископ посылал запрос в Ташкентскую клиническую больницу для предоставления ему историй болезней, а также запрос в Ленинградскую публичную библиотеку на копии иностранных статей по хирургии. Он даже отправил письмо на имя маршала СССР К. Ворошилова с просьбой разрешить ему доступ к необходимым материалам, требуемым для работы по монографии. Осенью 1940 года святителю разрешили на два месяца поехать в Томск для работы в местной библиотеке медицинского факультета. За два месяца библиотечных занятий епископ Лука успел перечитать всю новейшую литературу по гнойной, в частности, военно-полевой хирургии на немецком, французском и английском языках и сделать все необходимые выписки. Это помогло успешно завершить работу над вторым изданием «Очерков», вышедших в 1946 году».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Никитин В. «Несгибаемый страстотерпец» журнал «Слово» №12 1990г.

ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ ЖИДКИХ УДОБРЕНИЙ НА ОСНОВЕ ТОРФА

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

В настоящее время производится большое количество торфяных удобрений, широко применяемых в сельском хозяйстве для повышения урожайности сельскохозяйственных культур и улучшения свойств почвы. Создан большой ассортимент твердых и жидких удобрений, однако многие из удобрений имеют существенные недостатки в химическом составе, физических и механических свойствах, что может стать причиной их негативного воздействия на окружающую среду и человека. Следовательно, интерес представляет более подробное изучение различных свойств торфяных удобрений.

Для исследования использовали жидкое гуминовое удобрение БоГум, получаемое во Всероссийском научно-исследовательском институте мелиорированных земель. Для удобрения БоГум исследовали следующие свойства: количественное содержание гуминовых веществ, количество подвижных форм фосфора, а также влияние данных удобрений на прорастание семян льна.

Для определения содержания гуминовых кислот использовали метод, основанный на способности гуминовых веществ растворяться в щелочных растворах ($\text{pH} > 7.0$) и осаждаться из растворов при подкислении до $\text{pH} < 2.0$. Было выявлено, что жидкое гуминовое удобрение БоГум содержит 9.47 г/л гуминовых веществ.

Для определения подвижных форм фосфора использовали метод, основанный на извлечении фосфора 0.05М раствором серной кислоты при отношении пробы к раствору 1:25 с последующим определением фосфора в виде синего фосфорно-молибденового комплекса на ФЭК. Количество подвижных форм фосфора составило 4 мг/л.

Также выясняли влияние гуминовых удобрений на прорастание семян. Для исследования использовали семена льна-долгунца сорта Альфа. Готовили разведения удобрения: 1:100, 1:200, 1:300, 1:400, 1:500. Обработку семян проводили в течение 10 минут. Анализ прироста биомассы проводили на 4 день после обработки удобрениями. Наибольший прирост биомассы наблюдался при обработке удобрением в разведении 1:100.

ИЗМЕНЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ОРГАНИЧЕСКОГО ВЕЩЕСТВА И ЕГО СОСТАВА ПОД ДЕЙСТВИЕМ УДОБРЕНИЙ

Руководитель проф. И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии и земледелия

Органическое вещество почвы оказывает многогранное влияние практически на все ее основные свойства, от которых зависит формирование урожая возделываемых сельскохозяйственных культур. Особое значение оно имеет на дерново-подзолистых почвах, ввиду низкого содержания в них. Основным поставщиком органического вещества в почву являются пожнивно-корневые остатки возделываемых культур и вносимые органические удобрения. Принято считать, что около половины минерализуемого в почве перегноя восстанавливается за счет растительных остатков, а вторая половина в результате разложения органических удобрений.

Мы исследовали сравнительное влияние ряда видов удобрений на содержание и состав органического вещества дерново-подзолистой супесчаной почвы. Из удобрений брали бесподстилочный навоз, торфяной компост (ТК), один вариант был с минеральными удобрениями. Все варианты выравнивали по наличию в них NPK (N240P140K240). Контролем служили делянки без удобрений. Удобрения внесли под картофель. Агротехника культуры включала такие операции, как двукратное окучивание и двухразовую обработку против фитофтороза. Наиболее высокую прибавку углерода органического вещества (+0,09%) в конце вегетационного периода обеспечил ТК, от навоза прибавка составила 0,06%, а от минеральных удобрений она практически отсутствовала. В вариантах с внесением навоза и ТК отмечено как абсолютное, так и относительное содержание гуминовых кислот. Если на контроле на долю этих соединений в составе гумуса пришлось 24,2%, то при внесении ТК- 27,9%. Органическое вещество почвы вариантов с навозом и ТК имело более широкое отношение ГК:ФК (0,88-0,90), по сравнению с контрольными делянками (0,78), или с минеральными удобрениями (0,75). Полученная на опыте урожайность и качество картофеля свидетельствуют, что наиболее высокий урожай получен на фоне навоза, на втором месте от применения ТК и на третьем от минеральных удобрений (табл.1).

Таблица 1. Влияние удобрений на урожайность и качество клубней картофеля, сорт Скарб

Вариант опыта	Урожайность, клубни, т/га	Фракции, %		Содержание	
		крупная	мелкая	крахмал, %	нитратов, мг/кг
1.Контроль, без удобрений	13,5	93	7	14,8	60,4
2.Навоз-60 т/га	24,6	97	3	14,2	88,5
3.Торфяной компост-60 т/га	22,8	96	4	15,0	80,6
4. N240P140K240	25,0	95	5	14,7	99,5
НСР _{0,05} т/га	1,12	-	-	-	-

ПОЛУЧЕНИЕ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА С ПРИМЕНЕНИЕМ
ЭКСТРАКТА ДРОЖЖЕЙ ВИДА *SACCHAROMYCES CEREVISIAE*

Руководитель Л.Ж. Никошвили
Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии и химии

В последние годы интерес ученых вызывает группа методов получения металлических наночастиц с использованием биологических объектов (растений, водорослей, бактерий, мицелиальных грибов, клеток животных и дрожжей), которая получила название «зеленый» синтез и является простой и эффективной альтернативой классическим методам [1]. Необходимо отметить, что грибы, по сравнению с другими микроорганизмами, которые используются для синтеза наночастиц металлов, обладают рядом преимуществ, среди которых особо следует подчеркнуть способность выделять повышенное количество белков, что благоприятствует получению наночастиц [1, 2]. При этом существует ограниченное число исследований, посвященных использованию дрожжей-сахаромицетов для синтеза наночастиц металлов [3].

В данной работе изучалась возможность получения наночастиц золота с использованием экстракта дрожжей *Saccharomyces cerevisiae*. Была проведена серия опытов при варьировании концентрации прекурсора золота. Наночастицы идентифицировали по окраске коллоидных растворов, а также методом спектрофотометрии в УФ и видимой области, по наличию в спектрах поглощения максимумов (при длинах волн 525-565 нм). Было показано, что дрожжи могут использоваться для синтеза наночастиц золота диаметром порядка 50 нм. Данный способ является относительно простым и позволяет получать коллоидные растворы наночастиц Au, предположительно, сферической формы, стабильные в течение шести суток.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sangappa M., Thiagarajan P. // International Journal of life science biotechnology and pharma research. 2012. Vol. 1. P. 282.
2. Pantidos N., Horsfall L. // Nanomedicine & Nanotechnology. 2014. Vol. 5.
3. Saravanan M., Amelash T. // International Journal of Research in Pharmaceutical and Biomedical Sciences. 2013. Vol. 4. P. 822.

Моделирование процессов гелеобразования в цистеин-серебряном растворе

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

Изучение гелей и гелеобразного состояния вызывает большой интерес, который объясняется их широким распространением в повседневной практике и использованием в технологических процессах. Одной из систем, способных к образованию геля после введения соли инициатора при достаточно малом содержании реагентов, является водный раствор цистеина и нитрата серебра (ЦСР).

В докладе рассматривается построение мезоскопической модели ЦСР с целью изучения формирования волокон гель-сетки. Для ее реализации используется метод диссипативной динамики частиц (ДДЧ). В основе модели заложен экспериментально установленный факт, что на этапе созревания ЦСР в нем формируются кластеры и более крупные агрегаты из молекул меркаптида серебра (МС). Для корректного построения модели созревшего ЦСР, было выполнено изучение морфологии кластеров МС в рамках методов молекулярной механики и квантовой химии. Посредством пошагового построения кластеров из 2-22 молекул МС установлено, что построенные агрегаты стабилизируются в результате формирования тиол-серебряных олигомерных цепочек, а также перекрестным связыванием amino- и карбоксильных групп молекул МС. Оценка числа свободных функциональных групп на поверхности кластеров подтвердила наши предположения, что агрегаты из МС могут выступать в роли супрамономеров при формировании пространственных волокон гель-сетки. Изучение взаимодействия функциональных групп цистеина с ионом металла (как модели введения соли инициатора) позволило установить, что ион металла может одновременно координировать как отдельные, так и одновременно все функциональные группы МС. Это может приводить к снижению водорастворимости кластеров и тем самым провоцировать их самосборку в волокна гель-сетки. Этот факт в модели ЦСР учитывался введением дифференциации взаимодействия молекул МС (координированных и некоординированных ионом металла) с растворителем. Построенная модель использовалась для изучения влияния концентрации МС и соли инициатора на фазовое состояние системы.

Работа выполнена в рамках НИР по заданию Министерства образования и науки РФ на 2017-2019 (№ 4.2246.217/ПЧ). Авторы так же выражают благодарность МСЦ РАН за предоставление вычислительных ресурсов кластера МВС-100k.

Co/SiO₂ В СИНТЕЗЕ ФИШЕРА-ТРОПША

Руководители: Э.М. Сульман, А.А. Степачева
Тверской Государственный Университет
Региональный технологический центр

Синтез Фишера-Тропша (СФТ) представляет собой процесс каталитического гидрирования оксида углерода с образованием широкого спектра газообразных, жидких и твердых углеводородов [1]. Кобальтовые катализаторы обладают высокой активностью в СФТ. Наиболее часто их используют при давлении 1-50 атм и температуре 180 - 250 °С. В данных условиях кобальтовые катализаторы отличаются высокой селективностью к линейным парафинам, низкой селективностью к олефинам и оксигенатам, и большей устойчивостью к деактивации [2].

В последнее время большое внимание уделяется синтезу катализаторов в суб- и сверхкритических условиях. Данная технология позволяет получать материалы с установленными характеристиками (размер, морфология, структура и состав частиц), обладающие уникальными физическими и химическими свойствами [3].

В данной работе использовались кобальтсодержащие катализаторы с расчетным содержанием Co 10%(масс.) на основе оксида кремния, синтезированные в среде субкритической воды, субкритического изопропанола (ИПС), сверхкритического CO₂. Для сравнения использовался кобальтовый катализатор, синтезированный методом пропитки в этиленгликоле (ЭГ). Катализаторы исследовали методами РФС и БЭТ.

Синтезированные катализаторы были протестированы в жидкофазном низкотемпературном синтезе ФТ. В качестве синтез-газа использовалась смесь CO и H₂ в объемном соотношении 1:6. Температура проведения процесса составляла 200 °С, общее давление в реакторе – 2 МПа. Было выявлено, что катализаторы, полученные в сверхкритических условиях, позволяют увеличить выход углеводородов бензиновой фракции, при этом наблюдается высокая селективность к линейным и разветвленным алканам.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Крылова А.Ю. Козюков Е.А. // Газохимия. 2008. № 1. С. 65
2. Хенрици-Оливэ Г. Химия каталитического гидрирования СО // Москва «Мир» 1987
3. Aumonier C. // J. of Supercritical Fluids. 2006. Vol. 38. P. 242.

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ АККУМУЛЯТОР НА ОСНОВЕ ПОИАНИЛИНА

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

В настоящее время интенсивно развиваются технологии создания электрического аккумулятора повышенной емкости. Основной упор при этом делается на поиск новых перспективных материалов для катодов и анодов этих электрических источников тока. В настоящее время в качестве электродных материалов, для этих целей, начинают изучаться различные электропроводные полимеры, поэтому целью настоящей работы является изучение возможности использовать полианилин в качестве материала для создания аккумулятора.

Известно, что полианилин под действием электрического тока может обратимо окисляться и восстанавливаться, таким образом, появляется возможность использования его в качестве электродного материала аккумулятора. Электрохимический синтез осуществляли в потенциостатическом режиме, при потенциале 800 мВ, относительно хлорсеребряного электрода в среде анилина 0,25 М, в качестве подложки использовали платину. В целом экспериментальный аккумулятор представляет собой два электрода из платины покрытых слоем полианилина. Таким образом, и катод, и анод представляют собой одинаковую конструкцию. Это возможно вследствие того, что окисленная форма полианилина может служить отрицательным полюсом аккумулятора, а восстановленная – положительным. Предварительные эксперименты показали, что электролитом для такой конструкции может служить децимолярный раствор соляной кислоты. Изучение свойств данного прототипа аккумулятора показало, что зарядка его может осуществляться очень быстро (не более 10с.). Аккумулятор не боится «переплюсовки» так как и положительный, и отрицательный электроды имеют абсолютно одинаковую конструкцию. Максимальное ЭДС изготовленного аккумулятора составило 0,6 В (эта величина ниже чем у используемых, в настоящее время, аккумуляторов, однако используя батарею таких аккумуляторов можно получить нужное значение ЭДС). При заряде и разряде КПД близок к 100%.

Доступность, дешевизна исходного вещества для синтеза полианилина, простота конструкции дают основание, на мой взгляд, считать полианилин перспективным материалом для создания электрического аккумулятора.

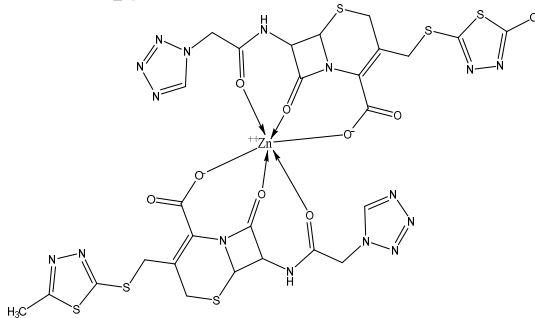
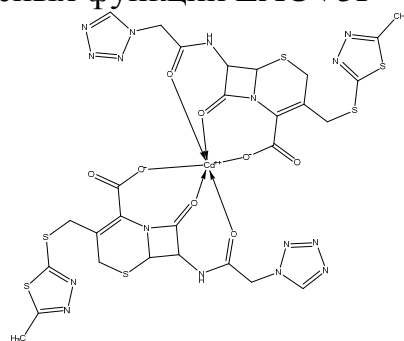
ИССЛЕДОВАНИЕ ЦИНКОВЫХ И КАДМИЕВЫХ КОМПЛЕКСОВ
ЦЕФАЛОСПОРИНОВ

Руководитель В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Задачей последних десятилетий фармацевтической и координационной химии является создание лекарственных препаратов, которые представляют собой металлокомплексы биологически активных органических молекул. Особое внимание уделяется работе с антибиотиками в качестве биолигандов, в настоящее время уже созданы и прошли испытания подобные препараты на основе тетрациклиновых, хинолоновых, аминогликозидных, протеиновых антибиотиков. С каждым годом всё активнее развиваются исследования по получению и исследованию структуры комплексных соединений бета-лактамных антибиотиков с катионами металлов.

В работе получены твердые цинковые и кадмиевые комплексы комплексы цефазолина, цефотаксима, цефтриаксона и цефтазидима. Проведено исследование полученных образцов с использованием комплекса физических методов: электронно-зондового анализа (INCA Energy 350, JEOL JSM-6610LV), синхронного термического анализа (Netzsch STA 449 F3 Jupiter), ИК спектроскопии (Brucker Equinox 55). Квантовохимические расчеты выполнены методом DFT с использованием гибридного функционала B3LYP и набора базисных функций LACV3P**+.

Комплекс [Zn(Czl)₂]Комплекс [Cd(Czl)₂]

ВЫДЕЛЕНИЕ МЕЛАНИНОВ ИЗ ЛУЗГИ ПОДСОЛНЕЧНИКА

Руководитель Е.А. Прутенская

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Подсолнечник масличный (*Helianthus ánnuus*) – основная масличная культура России. Средняя величина валового сбора за последние 5 лет достигла 9,3 млн т в год. Лузга отделяется при подготовке семян подсолнечника к извлечению масла в процессе обрушивания. При выделении ядра подсолнечника на маслопрессовых заводах образуется большое количество лузги – около 14% от общего количества семян.

Лузга подсолнечника является перспективным сырьем для выделения БАВ, одним из которых являются меланины.

Меланины – группа высокомолекулярных пигментов, широко встречающаяся в природе, и ответственные за черную, коричневую, красную и желтую окраску. Меланины бывают растительного и животного происхождения, а также они встречаются у микроорганизмов и грибов. Меланин также известен за способность абсорбировать электромагнитное излучение в диапазоне от УФ до ближнего ИК. Помимо этого, меланины ведут себя как полупроводники, что позволяет применять его в разработке химических сенсоров, солнечных батарей следующего поколения, и многих других детекторов.

Целью нашей работы было выделение меланинов из растительного сырья и определение их свойств.

В качестве сырья использовали измельченную лузгу подсолнечника. Для выделения меланинов использовали их способность переходить в раствор в щелочной среде, и выпадать в осадок при подкислении раствора.

В ходе исследований были подобраны оптимальные параметры выделения меланинов из сырья (соотношение экстрагент: сырье, количество осадителя, температура экстракции). Было выявлено, что при повышении температуры свыше 70⁰С происходит увеличение количества меланинов за счет омыления жиров.

ПОЛУЧЕНИЕ ВЫСОКОНАПОЛНЕННЫХ КОМПОЗИТОВ

Руководитель Л.И. Ворончихина

Тверской государственный университет

Кафедра органической химии

Процесс получения высоконаполненных полимерных композиций связан с совмещением твердой гидрофильной высокоэнергетической дисперсной фазы (минеральной, органической или металлической), с полимерным связующим, представляющим собой гидрофобную низкоэнергетическую систему.

Большинство применяемых наполнителей малоактивны или неактивны вследствие гидрофильных свойств поверхности частиц и низкой дисперсности. Вследствие этого процесс модифицирования наполнителей (т.е. придания им гидрофобных свойств) приобретает особое значение при получении высоконаполненных композиционных материалов и улучшении их физико-механических свойств.

В настоящей работе исследована возможность применения ПАВ различной структуры для адсорбционной модификации наполнителя - карбонильного железа марки Р-10 с целью получения высоконаполненных магнитоэлектрических материалов с улучшенными физико-механическими свойствами. В качестве связующего использовали кремнийорганический полимер «Лестосил», сшивающим агентом служил метилсилазан.

В качестве ПАВ были исследованы неионогенные, катионные и анионные ПАВ. Как следует из проведенных исследований применение указанных ПАВ для целей адсорбционного модифицирования карбонильного железа во всех случаях в большей или меньшей степени улучшает физико-механические характеристики композита, повышает плотность и позволяет ввести до 80 объемных частей наполнителя в связующее. Выяснение закономерностей модификации карбонильного железа, а также влияния этой модификации на совмещение полимера и наполнителя позволит расширить и углубить представления о взаимодействии полимер - наполнитель - ПАВ и может способствовать решению практических задач получения композиционных материалов с улучшенными физико-механическими свойствами.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИРОДЫ КАТАЛИТИЧЕСКИ АКТИВНОЙ ФАЗЫ В РЕАКЦИИ СУЗУКИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ БЕЗЛИГАНДНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ СВЕРХСШИТОГО ПОЛИСТИРОЛА

Руководитель Э.М. Сульман

Тверской государственный университет
Региональный технологический центр

В настоящее время наиболее перспективными катализаторами для проведения реакции кросс-сочетания Сузуки являются безлигандные системы на основе наночастиц или комплексов палладия, стабилизированных полимерами [1, 2]. В случае безлигандных каталитических систем ведутся споры о том, какой тип Pd (растворимые комплексы, кластеры, наночастицы) отвечает за каталитическую активность, так как было обнаружено, что имеет место вымывание Pd в раствор в виде гомогенных комплексов с исходными веществами и его рекристаллизация на массивный Pd или на носитель.

Данная работа посвящена изучению палладиевых катализаторов на основе сверхсшитого полистирола (СПС) в реакции кросс-сочетания Сузуки 4-броманизола и фенилбороновой кислоты. В рамках данного исследования был синтезирован ряд катализаторов с различным содержанием металла, типом СПС и природой прекурсора (PdCl_2 , $\text{PdCl}_2(\text{CH}_3\text{CN})_2$, $\text{PdCl}_2(\text{C}_6\text{H}_5\text{CN})_2$). Было обнаружено, что использование данных катализаторов позволяет достичь высоких значений конверсии 4-броманизола (> 98% в течение 1 часа), при этом выход 4-метоксибифенила составляет более 93%. Кроме того, было установлено, что независимо от природы прекурсора, в случае невозстановленных катализаторов активность коррелирует с содержанием Pd(II) на поверхности. Для образцов, предварительно восстановленных в токе водорода, использование СПС в качестве носителя привело к формированию большого количества наночастиц и кластеров Pd, которые отвечали за наблюдаемую активность. Однако и в этом случае был предположен гомогенный механизм, так как было обнаружено, что в ходе повторного использования восстановленных катализаторов имеет место Оствальдовское созревание наночастиц.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hajipour A.R. // J. Chem. Sci. 2014. № 126. P. 83.
2. Astruc D. // Coord. Chem. Rev. 2013. № 257. P. 2317.

12-КОНСТАНТНАЯ ГРАФОВАЯ МОДЕЛЬ РАСЧЕТА ЭНТАЛЬПИИ АТОМИЗАЦИИ 92 МЕТИЛ- И ЭТИЛЗАМЕЩЕННЫХ БЕНЗОЛА

Руководители Ю.Г. Папулов, В.М. Смоляков
Тверской государственной университет
Кафедра физической химии

В работе сформирован ряд 92 метил-, этил- и метиэтилзамещенных бензола. Получена 12-константная графовая схема оценки термодинамических свойств метил-, этил- и метиэтилзамещенных бензола. По 24 опытным данным для $\Delta H_{\text{ат. газ}}$ (кДж/моль) из ряда бензолов впервые рассчитаны энтальпии атомизации $\Delta H_{\text{ат. газ}}$ 92 бензолов, среди которых 68 не изучены экспериментально. Для расчета свойства P 92 метил- и этилзамещенных бензола получена 12-константная формула с представлением структурных фрагментов (орто-, мета-, пара-) молекулы бензола графами (граф молекулы – совокупность точек и ребер):

$$P = n_0\rho_0 + n_x\rho_x + n_y\rho_y + n_{xho}\rho_{xho} + n_{xhm}\rho_{xhm} + n_{xhp}\rho_{xhp} + n_{xyo}\rho_{xyo} + n_{xym}\rho_{xym} + n_{xyp}\rho_{xyp} + n_{yuo}\rho_{yuo} + n_{yum}\rho_{yum} + n_{yup}\rho_{yup} \quad (1)$$

Здесь $\rho_0, \rho_x, \rho_y, \dots, \rho_{yup}, \rho_{yup}$ – параметры схемы (1), а $n_0, n_x, n_y, \dots, n_{yup}$ – их числа.

По 24 опытным данным $\Delta H_{\text{ат. газ}}$ для 92 метил- и этилзамещенных бензола определены числовые значения параметров аддитивной схемы (1). Для расчета энтальпии атомизации $\Delta H_{\text{ат. газ}}$ 92 метил- и этилзамещенных бензола (в графах) по опытным данным параметры схемы (1) найдены методом наименьших квадратов (мнк) следующими (см. табл. 1).

Таблица 1. Числовые значения 12 параметров графовой схемы (1) для расчета энтальпии атомизации $\Delta H_{\text{ат. газ}}$ 92 метил- и этилзамещенных бензола, в кДж/моль.

Подграф	Значение	Подграф	Значение
C_6H_6	5525,405	1,2- C_6H_4XY	-2,780
C_6H_5X	1185,065	1,3- C_6H_4XY	-0,037
C_6H_5Y	2357,975	1,4- C_6H_4XY	0,349
1,2- $C_6H_4X_2$	-2,374	1,2- $C_6H_4Y_2$	-3,606
1,3- $C_6H_4X_2$	0,596	1,3- $C_6H_4Y_2$	-0,716
1,4- $C_6H_4X_2$	0,910	1,4- $C_6H_4Y_2$	-0,296
Статистические характеристики расчета энтальпии атомизации $\Delta H_{\text{ат. газ}}$			
N – число опытных данных	24		
R – коэффициент корреляции	0,9999		
S_{abs} – среднеабсолютное отклонение	0,3415		
ϵ_{max} – максимальное отклонение в точке 1,2- $C_6H_4X_2$ (1,2-Диметилбензол)	1,2781 кДж/моль		

Полученную в работе 12-константную схему можно использовать для оценки других свойств ХУ-изомеров замещения бензола.

Автор благодарит профессора Ю.Г.Папулова и профессора П.М. Пахомова за ценные замечания и интерес к работе.

ПЕСТРОТА АГРОХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЧВ ООО «КОРАЛЛ»

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии и земледелия

Характерной генетической особенностью дерново-подзолистых почв считается сильная пестрота выраженности их основных физико-химических свойств. Это является одной из причин того, что на таких землях не удается получать высокие урожаи возделываемых культур, даже если применяются достаточно высокие дозы удобрений. Большое значение данный фактор имеет применительно к почвам, на которые предполагается вносить весьма высокие дозы жидких органических удобрений. Они, обычно находятся в пределах крупных животноводческих комплексов, где с целью утилизации навоза допускается его внесение до 400 и более т/га. Однако, не на всех участках поля такое количество жидкого органического сырья способно впитаться в почву, в результате чего оно будет стекать по поверхности поля в рядом расположенные водоприемники, приводя к загрязнению окружающей природную среду. Мы исследовали пестроту трех полей ООО «Коралл» Бежецкого района, которые в настоящее время подготавливаются для внесения в них накапливаемого в лагунах жидкого навоза свиней. Все почвы дерново-подзолистые глееватые, сформированы на моренном карбонатном суглинке. Полученные данные показали, что их перегнойные горизонты заметно отличаются по содержанию гумуса (1,88 и 2,33%), подвижного фосфора, обменной кислотности (рН 4,9 и 5,5), и в меньшей степени по насыщенности их основаниями (V -87 и 89%) и наличию обменного калия.

Таблица 1. Агрохимические показатели осваиваемых залежных почв

Горизонт	Глубина	Гумус,%	рН	V,%	P ₂ O ₅	K ₂ O
					мг/кг почвы	
Участок № 185, почва дерново-слабоподзолистая супесчаная на моренном суглинке						
A ₁	0-19	1,88	5,3	89	114	88
A ₂ B	19-26	0,28	4,6	82	41	25
B ₁	26-54	0,20	4,3	85	24	7
B ₂	54-99	0,20	5,2	86	22	6
Участок № 197, почва дерново-слабоподзолистая легкосуглинистая на моренном суглинке						
A ₁	0-20	2,33	5,5	87	103	89
A ₂	20-35	0,20	4,2	80	32	21
B ₁	35-68	0,18	4,8	86	21	8
B ₂	68-102	0,15	5,4	90	18	7
Участок № 198, почва дерново-слабоподзолистая супесчаная на моренном суглинке						
A ₁	0-20	2,33	4,9	87	79	85
A ₂	20-35	0,20	4,2	80	32	21
B ₁	35-68	0,18	4,8	86	21	8
B ₂	68-102	0,15	5,4	90	18	7

ТЕРМИЧЕСКАЯ ДЕСТРУКЦИЯ ПОЛИЭТИЛЕНА В РАЗНЫХ
ТЕМПЕРАТУРНЫХ ДИАПАЗОНАХ

Руководитель К.В. Чалов

Тверской государственной технический университет

Кафедра технологии полимерных материалов

Одним из эффективных способов переработки полимерных отходов является пиролиз. Процесс представляет термическое разложение пластмасс под действием высоких температур в отсутствие кислорода. При помощи пиролиза получают: печное топливо, синтез-газ, тепловую энергию и жидкие топлива (аналог дизельного топлива). Можно добиться снижения объемов захоронения мусора, и получить ощутимый экономический эффект в результате использования газообразные и жидкие продукты пиролиза с высокой теплотой сгорания.

Для проведения экспериментов разработана лабораторная установка и аналитический комплекс для анализа образующихся газообразных продуктов. В ходе работы на пиролизной установке, были выполнены опыты в диапазоне температур 450 – 550°C. Жидкие и твердые продукты пиролиза были исследованы методом ИК-спектроскопии. Состав газообразных продуктов определялся методом газовой хроматографии.

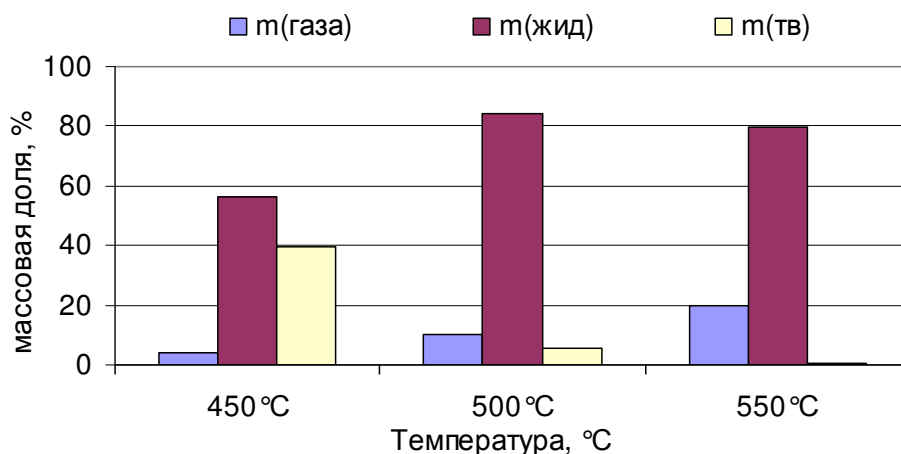


Рисунок. Зависимость выхода продуктов пиролиза полиэтилена от температуры

Преимущества данного метода:

а) замкнутый цикл процесса переработки характеризуется снижением выбросов в окружающую среду;

б) применение новых методов пиролиза с использованием катализаторов способствует увеличению качества получаемых продуктов и снижению энергоемкости проведения процесса.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЭКСТРАКТОВ ДРЕВЕСНОЙ ЗЕЛЕНИ ХВОЙНЫХ РАСТЕНИЙ В КАЧЕСТВЕ СТИМУЛЯТОРОВ РОСТА РАСТЕНИЙ

Руководитель Е.В. Ожимкова

Тверской государственной технической университет
Кафедра биотехнологии и химии

В условиях Центральной России, в том числе Тверской области, древесная зелень хвойных растений может служить прекрасным сырьем для производства биологически активных веществ (БАВ) – стимуляторов роста растений. Причем эффективность стимуляторов роста растений высокая, а затраты труда, сырья, средств на их производство и применение значительно ниже, чем при использовании, например, органических удобрений [1]. Применение биологически активных веществ позволяет значительно повысить адаптационные свойства и иммунитет сельскохозяйственных культур, увеличив тем самым их урожай и качество продукции. Приоритетом в этой области обладают экологически безопасные, нетоксичные фиторегуляторы и индукторы устойчивости растений [2]. Источником стимуляторов роста растений могут служить хвойные растения семейства *Pinaceae*, продуцирующие множество полезных веществ, таких как пинитол, ГАМК, мио-инозитол и др. Отходы переработки биомассы дерева обычно не утилизируются. Однако эти отходы являются ценным возобновляемым сырьем для производства биоактивных концентратов [3]. В работе представлено исследование ростстимулирующей активности экстрактов хвои ели европейской и сосны обыкновенной. Первоначально получают водные экстракты из древесной зелени (хвои). Для всех полученных экстрактов определяется содержание а.с.в, а также исследуется химический состав экстрактов методом ВЭЖХ и хроматомасс-спектрометрии.

Для исследования ростстимулирующей активности использовали семена льна культурного. В серии экспериментов чашки Петри выстилают фильтровальной бумагой и пропитывают раствором соответствующего стимулятора. В каждую чашку помещают пробу семян (20 шт.), после чего чашки Петри помещают в термостат с температурой $23 \pm 1^\circ\text{C}$ и оставляют для проращивания семян на 7 дней. Ежедневно проверяют состояние увлажненности ложа, а также открывают чашки Петри для обеспечения газообмена. В каждой серии экспериментов определяют такие параметры как всхожесть и энергия прорастания семян, средняя длина ростков, прирост биомассы. В качестве контрольного опыта проводят проращивание семян в аналогичных условиях, но с поливом водой. Анализ результатов проведенных экспериментов подтверждает ростстимулирующую активность разбавленных экстрактов хвои, в то время как концентрированные экстракты оказывают сильное ингибирующее действие на рост семян льна.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Калиниченко М.С. // Сибирский НИИ СХиТ, 2006. – С.13
2. Фатеева Е.В. // Вестник Мордовского университета. – 2013. – № 3-4. – С. 138-140
3. Левин Э.Д. // Лесная промышленность, 1984. – 120 с.

СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ КОФЕЙНОГО И ЧАЙНОГО НАПИТКОВ ИЗ ТОПИНАМБУРА

Руководитель З.И.Усанова

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

Кофе и чай – одни из самых распространенных напитков. Однако из-за содержания кофеина их потребление противопоказано для некоторых групп населения. В связи с этим актуальным становится увеличение производства напитков, альтернативных кофе и чаю. Ценным сырьем для их получения является топинамбур – высокопродуктивная, экологически пластичная культура, источник биологически активных веществ, в частности - инулина. В процессе обжарки клубней происходят реакции карамелизации и меланоидинообразования, что придает напитку соответствующий кофейный вкус и аромат, но снижает содержание сахаров. Соцветия содержат жёлто-оранжевый пигмент каротин – провитамин А, придающий золотистую окраску чайному напитку.

В 2016 году из клубней сортов топинамбура (Скороспелка и Интерес) на двух фонах минерального питания (без удобрения и расчетная доза на урожайность 40 т/га клубней) нами были получены образцы кофейного напитка из топинамбура путем мойки, нарезки, высушивания и последующей обжарки при разной температуре. Выявлено что увеличение температуры обжарки снижает выход продукта. Лучшим является вариант выращивания сорта Скороспелка с внесением удобрений на запрограммированную урожайность. При этом можно получить 9,0 т/га при слабой обжарке и 6,9 т/га сухого продукта (кофейного напитка) – при сильной. Содержание сахаров в продукте при этом составляет 60,8 и 10,1 % соответственно. По изученным физико – химическим показателям все образцы напитка соответствуют ГОСТ Р 50364-92. По органолептическим показателям при слабой обжарке напиток имеет светло-коричневый цвет, кофейный с карамельным оттенком аромат, кофейный сладковатый вкус, при сильной обжарке - темно-коричневый цвет, кофейный аромат, и кофейный горький с кислинкой вкус.

В условиях Верхневолжья соцветия получены только у сорта Скороспелка. Путем сушки при комнатной (20-25 °С) температуре получены образцы чайного напитка. Наибольший его выход (376,2 кг/га) составил при внесении расчетных доз удобрений. При этом он содержал: каротина - 23,09 мг/100 г и водорастворимых экстрактивных веществ - 24,98 %.

ФОРМИРОВАНИЕ УРОЖАЙНОСТИ ТОПИНАМБУРА СОРТА ИНТЕРЕС В ЗАВИСИМОСТИ ОТ РЕЖИМА ЗАТЕНЕНИЯ И УДОБРЕНИЙ

Руководитель З.И.Усанова

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

Топинамбур (*Helianthus tuberosus* L.) - высокопродуктивная культура многостороннего использования с ценным химическим составом клубней. В них содержится до 21-25% сахаров, в составе которых 60-65% приходится на долю растворимого биополимера инулина.

В 2015 – 2016 гг. нами изучено влияние фона минерального питания и режимов сокращения светового дня на продуктивность топинамбура сорта Интерес. Схема опыта включала факторы: А - фон минерального питания: А₁ - по эффективному плодородию (без удобрения), А₂ - расчетная доза НРК на урожайность 40 т/га клубней с соответствующим количеством ботвы; В - срок затенения: 1.на 10-й день после всходов; 2.на 20-й день после всходов; С – продолжительность затенения: 1 - контроль (без затенения); 2 - 10 дней; 3 - 20 дней; 4 - 30 дней, 5 – 40 дней. Световой день при затенении – 10 часов (с 7 утра до 17 часов вечера). Затенение проводили путем связывания 5-7 верхних листьев над точкой роста.

Выявлено, что сорт Интерес характеризуется высоким урожаем сырой биомассы (до 80,5 т/га), главным образом за счет ботвы (до 58,7 т/га). Фон и режим светового дня оказали влияние на продуктивность данного сорта. Удобрение, в среднем за 2 года, повысило урожайность ботвы на 23,3 т/га (65,8 %), клубней на 4,8 т/га (28,5%); общего сбора биомассы - на 28,1 т/га (53,8%).

Позднеспелый сорт Интерес сильно реагирует на сокращение фотопериода. Он ускоряет развитие (до бутонизации), максимум, на 57 дней при более продолжительном затенении (40 дней) на 20-й день после всходов. Однако наибольшая прибавка урожая клубней (4,1 т/га или 19,3%) получена при меньшей продолжительности затенения (10 дней) при том же сроке, а максимальная прибавка урожая ботвы (7,6 т/га – 12,3 %) и сырой биомассы (10,1 т/га – 12,1 %) при 20-и дневном затенении на 10-й день после всходов.

Полноценные семена (семянки) сорт Интерес формирует при сокращении светового дня на 20-й день после всходов в течение 30-40 дней.

ВЛИЯНИЕ ФОНА МИНЕРАЛЬНОГО ПИТАНИЯ И ФОТОПЕРИОДИЗМА НА УРОЖАЙНОСТЬ ТОПИНАМБУРА СОРТА СКОРОСПЕЛКА

Руководитель З.И.Усанова

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

Повышение общей и клубневой продуктивности топинамбура, качества зеленой массы и клубней имеет большое значение в получении диетических продуктов питания, в создании сырьевых зон для промышленной переработки и увеличении производства кормов.

Изучено влияние фотопериодизма на формирование урожайности топинамбура сорта Скороспелка на двух фонах минерального питания (без удобрения и расчетная доза на урожайность 40 т/га клубней с соответствующим количеством ботвы) в трехфакторном полевом опыте на опытном поле Тверской ГСХА в 2015 - 2016 гг. Исследованы два срока затенения (на 10-й и на 20-й день после всходов) в течение 10, 20, 30 и 40 дней, контроль – без затенения. Искусственно создавали 10-и часовой световой день (с 7 часов утра до 17 часов вечера) путем связывания 5-7 верхних листьев над точкой роста.

Выявлено, что в урожае данного сорта преобладают клубни. Соотношение ботва:клубни в вариантах без затенения на неудобренном фоне составило 1:1,53, на удобренном 1:1,43.

Удобрение позволило увеличить урожай ботвы и клубней, в большей степени, в более влажном 2016 г. При этом на неудобренном фоне в среднем за два года и по вариантам затенения сформирована урожайность 18,9 т/га зеленой массы и 30,0 т/га клубней, а на удобренном – 31,9 и 46,7 т/га.

Сорт обладает слабой реакцией на сокращение длины дня. Он ускоряет развитие растений до бутонизации, максимум, на 10 дней. Реакция растений неоднозначна по годам. В 2015 г. на удобренном фоне максимальные прибавки урожая клубней получены при затенении на 10 день после всходов в течении 30 дней (5,3 т/га - 10 %) и на 20-й день в течении 10 дней (5,4 т/га - 11 %); зеленой массы - при затенении на 20 день после всходов в течении 10 дней (2,7 т/га - 10 %). В 2016 г. сокращение светового дня тормозило рост растений в высоту и не способствовало повышению урожайности.

Выращивание сорта Скороспелка на искусственно сокращенном дне (до 10 часов) позволяет увеличить сбор полноценных семян (семянки), пригодных для воспроизводства.

НАХОЖДЕНИЕ ОРГАНИЧЕСКИХ КИСЛОТ В СУХИХ СТОЛОВЫХ И ПЛОДОВО-ЯГОДНЫХ ВИН МЕТОДОМ ТОНКОСЛОЙНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

Руководитель

Тверской государственный университет
Кафедра аналитической химии

Случаи фальсификации столовых сухих виноградных и плодово-ягодных вин в последнее время сильно участились. Недобросовестные производители в качестве основных ингредиентов используют спирт, воду, сахарозаменители и искусственные красители. При фальсификации вин уменьшается R_f органических кислот которые там присудствуют, например: винной, лимонной, яблочной, молочной, шавелевой, янтарной, адипиновой и гликолевой кислот, наиболее простым методом определения этих соединений в сложных смесях без разделения является хроматографический метод, поэтому цель работы было изучение возможности использования метода тонкослойной хроматографии для определения указанных органических кислот.

Проводила метод хроматографии на пластинках «Silufol». В качестве ускорителя в подвижной фазе использовала воду, в качестве замедлителя - различные спирты. Важно для данной системы стабилизировать значение рН, поэтому анализируемые компоненты обладают кислотными свойствами. В качестве стабилизатора рН я использовала раствор аммиака.

Предварительные эксперименты показали, что в качестве замедлителей, возможно, использовать этиловый, изопропиловый и другие спирты. Остановилась на этиловом, как наиболее эффективном. В результате эксперимента я установила, что соотношение компонентов в подвижном растворителе составляет: аммиак(25%): H_2O : C_2H_5OH =7,5:2,5:25 по объёму. Для проявления хроматографической зоны использовала пары йода, на основе спирта, содержащий анилин, L-арабинозу. Полученные хроматограммы оцифровывались и обрабатывались при помощи программы хромоскан.

Данные результаты на модельных смесях позволяют утверждать, что разработанная методика позволит определить наличие исследуемых кислот в минимальных количествах 0,02 мг/мл, а также определить R_f каждой кислоты найденной в винах.

ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА ЧАЯ РАЗЛИЧНЫХ ТОРГОВЫХ МАРОК

Руководитель Андрианова Е.В.

ФГБОУ ВО Тверской ГМУ Минздрава России, г. Тверь

Кафедра биохимии, с курсом КЛД ФДПО, интернатуры и ординатуры

Целью данной работы является проведение сравнительного анализа состава чая торговых марок «Нури», «Greenfield» (компания Орими-трейд) и «Riston». В качестве исследуемых образцов были выбраны следующие торговые марки чая: «Нури» (чёрный, листовый), «Greenfield» (чёрный и зелёный, листовый и пакетированный), «Riston» (чёрный, листовый). Были проведены качественные реакции на наличие в чае витамина В₆, витамина А, Витамина Е, танина, кофеина и белков.

В ходе работы, витамин В₆ и танин были выявлены во всех образцах. При добавлении азотной кислоты к растворам чая, подтвердили наличие витамина Е во всех образцах, кроме «Нури», а в зелёном листовом чае «Greenfield» наблюдалось наиболее интенсивное окрашивание. Для выявления кофеина использовали реактив Бушара, в присутствии кислоты хлористоводородной разведенной, с последующим растворением осадка щёлочью. Для более точного результата и оценки количества кофеина в разных образцах проба была произведена трижды. В итоге, однократная положительная реакция была у образцов «Riston» чёрный, «Greenfield» чёрный листовый, «Greenfield» чёрный пакетированный и «Нури» (чёрный, листовый). Двукратная положительная реакция была только у «Greenfield» зелёный листовый. Все пробы положительны у образца пакетированного зелёного чая марки «Greenfield». При добавлении анилинового реактива зелёный листовый чай Greenfield не изменил окраски, в образцах «Greenfield» зелёный пакетированный, «Greenfield» чёрный пакетированный, «Riston» чёрный листовый выпал жёлтый осадок. В образцах «Greenfield» чёрный листовый и «Нури» выпал наиболее интенсивный темно-зеленый осадок, что свидетельствует о наличии большего количества витамина А.

Наименьшее содержание витаминов и других веществ показал образец чёрного листового чая «Нури» (компания Орими-трейд). В то же время, разница между чаем премиум класса «Riston» и чаем средней ценовой категории «Greenfield» незначительна. «Greenfield» компании Орими-трейд содержит большее количество витамина А. Большее влияние на содержание витаминов и кофеина оказывает форма выпуска чая и его тип (чёрный или зелёный). Так чёрный листовый чай содержит больше витамина А, чем пакетированный, но меньше витамина Е и кофеина, чем зелёный чай. В заварном зелёном чае обнаружено наибольшее содержание витамина Е по сравнению с другими образцами, но отсутствие витамина А. Однако пакетированный зелёный чай содержит максимальное количество кофеина.

ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЕ НИЗКОКОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ L-ЦИСТЕИНА И НИТРИТА СЕРЕБРА

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

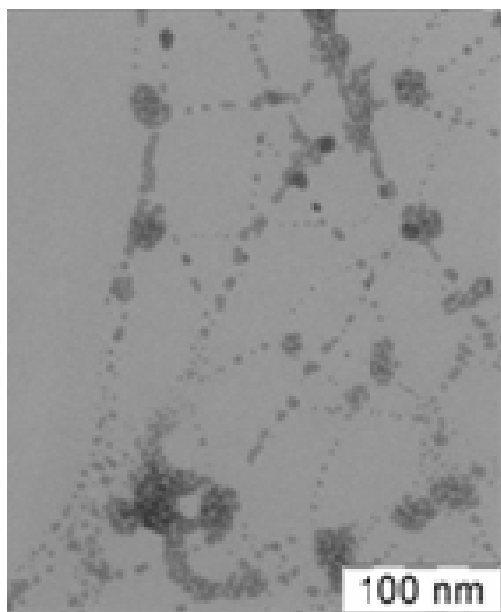


Рис. ПЭМ микрофотография образца геля на основе $\text{Cys}-\text{AgNO}_2$ (1.0:1.0).0

Гелеобразование на основе низкомолекулярных соединений - аминокислот и их производных – редкое явление. Авторами обнаружено гелеобразование с участием низкомолекулярных соединений – аминокислоты L-цистеин и нитрира серебра (AgNO_2) при соотношениях компонентов 1.0:1.0 и 1.00:1.25.

Целью настоящей работы является дальнейшее изучение процессов самоорганизации в этих системах, с привлечением более широкого комплекса инструментальных методов анализа: вискозиметрии, рН-метрии, динамического светорассеяния, измерения Z-потенциала, просвечивающей электронной микроскопии, УФ и Фурье-ИК спектроскопии.

Измерения показали, что значения вязкости и скорость гелеобразования для двух систем оказались различными. Структурирование системы при молярном соотношении «цистеин-нитрит» (1.0:1.0) происходит быстрее, но в то же время образовавшийся гидрогель оказался менее прочным, чем гель с избытком серебра. Общий заряд частицы оказался положительным, а Z-потенциал в среднем составил 30 милливольт. Исследование величины рН в рассматриваемых системах показало, что наблюдается тенденция к увеличению значения рН для образцов с избыточным содержанием серебра в растворе.

Авторами предложен механизм гелеобразования, заключающийся в формировании супрамолекулярных цепей и фрактальных кластеров из молекул меркаптида серебра с последующим построением из этих фрагментов пространственной гель-сетки (рис.)

А.И. Петрова

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА НАКОПЛЕНИЯ ГЛЮКОЗЫ В
ГИДРОЛИЗАТЕ ТОРФА, ПОЛУЧЕННОГО С ПОМОЩЬЮ ФЕРМЕНТОВ
КУЛЬТУРЫ ГРИБОВ *PENICILLIUM VERRUCULOSUM*

Руководитель В.Ю. Долуда

Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии и химии

Для биотехнологического производства и получения многих биологически активных продуктов используют растительное сырье, которое, подвергаясь предварительной обработке или действию ферментов, является хорошим субстратом для микроорганизмов [2, с. 6].

В России широко используется коммерческий ферментный препарат «АГРОЦЕЛЛ», продуцентом которого является штамм гриба *Penicillium verruculosum*. Основным компонентом данного препарата является целлюлаза, участвующая в разрушении клеточных стенок растений посредством ферментативного гидролиза гликозидных связей некрахмальных полисахаридов. [1, с.69-71].

В настоящем исследовании были проведены эксперименты по определению содержания моносахаридов в торфе с помощью ферментов культуры грибов *Penicillium verruculosum*, входящей в состав препарата «АГРОЦЕЛЛ».

Данные эксперимента показали, что происходит постепенное накопление моносахарида на протяжении всего эксперимента. В гидролизате торфа накопилось 14 мг глюкозы за 24 часов проведения процесса, что не является пределом для данного процесса.

Актуальность дальнейших исследований состоит в последующем определении редуцирующих веществ в более широком интервале времени с целью получения максимального выхода моносахаридов с помощью ферментных систем различных культур микроорганизмов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гречишников В. Приоритет ферментного производства возвращается в Россию [Текст] / В. Гречишников [и др.] // Комбикорма: производство и использование научно-технический и производственный журнал /– Москва – 2014 – № 6 – С.69–71.
2. Сушкова В.И. Воробьева Г.И. Безотходная конверсия растительного сырья в биологически активные вещества [Текст] / В.И. Сушкова, Г.И. Воробьева.– Киров, –. 2007 – С. 6, 55-65.

УДОБРИТЕЛЬНЫЕ СМЕСИ НА ОСНОВЕ ОСАДКА СТОЧНЫХ ВОД И ИХ ВЛИЯНИЕ НА АГРОХИМИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ ПОЧВЫ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии и земледелия

Осадок сточных вод (ОСВ) является побочным продуктом при очистке городских канализационных вод. Вместе с тем он содержит большое количество химических веществ, являющихся питательными для растений. Однако в составе ОСВ могут находиться в избыточном количестве тяжелые металлы, которые пагубно влияют на живые организмы.

Цель наших исследований – изучить влияние удобрительных смесей на основе ОСВ на плодородие и продуктивность дерново-подзолистой почвы. Для этого на экспериментальном участке Тверской государственной сельскохозяйственной академии заложен полевой опыт с участием смесей ОСВ-опилки, ОСВ-торф, ОСВ-солома с разными соотношениями компонентов (1:1, 1:2, 1:3). Кроме того имеется вариант опыта с применением готового компоста на основе ОСВ, а также без использования каких-либо удобрений.

Результаты эксперимента показали, что все удобрительные смеси и компост оказали значительное влияние на исследуемую систему. В год прямого действия удобрений на их фоне содержание подвижных форм аммиачного азота возрастает на 1,9-5,6 мг/кг по сравнению с контрольным вариантом (9,0 мг/кг), нитратного азота на 3,2-7,0 мг/кг (контроль – 2,0 мг/кг), подвижного фосфора на 5,2-28,9 мг/кг (контроль – 230,8 мг/кг) и обменного калия на 9,3-40,9 мг/кг (контроль – 119,3 мг/кг). Удобрительные смеси обеспечили прибавку органического вещества в почве на 1,5-0,08% относительно контрольного варианта. Отмечен пролонгирующий эффект – в год последствия удобрений агрохимические показатели остаются заметно выше по сравнению с вариантом опыта без удобрений. Содержание тяжелых металлов в почве не превысило ПДК.

Исследуемые удобрения вызвали увеличение урожайности опытных культур (вико-овсяной смеси - в год прямого действия, озимой ржи - в год последствия) в среднем за 2 года на 65-148 ц/га з.е. по отношению к контролю (268 ц/га з.е.).

Более эффективными оказались смеси, в составе которых ОСВ и наполнитель находятся в соотношении 1:1. Среди них особенно выделяется ОСВ-торф и ОСВ-солома.

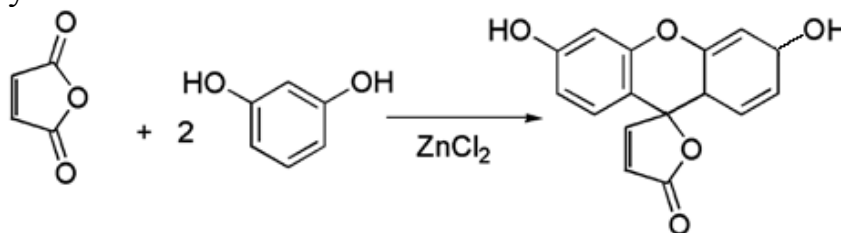
СИНТЕЗ БИСФЕНОЛА НА ОСНОВЕ РЕЗОРЦИНА И МАЛЕИНОВОГО АНГИДРИДА И ПОЛИАРИЛАТА НА ЕГО ОСНОВЕ

Руководитель Б.К. Крупцов

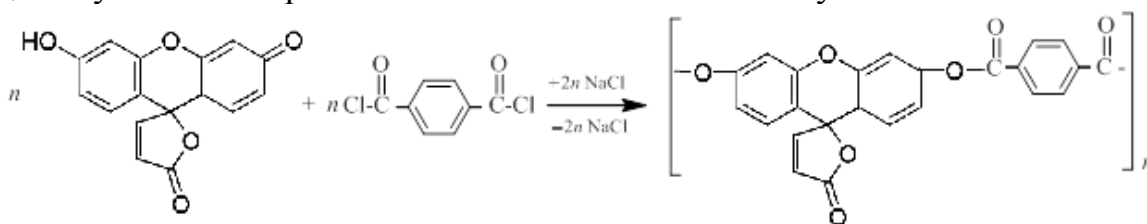
Тверской Государственный технический университет

Кафедра технологии полимерных материалов

Проведены работы по получению бисфенола конденсацией резорцина с малеиновым ангидридом. Наилучшие выходы наблюдались при соотношении компонентов 5 : 3 температуре 125-135 °С, время конденсации не менее 6 часов, в качестве катализатора наилучшие выходы наблюдались при использовании $ZnCl_2$. Полученный продукт представляет собой порошок оранжевого цвета, с температурой плавления выше 300°С (с разложением), растворимый в спиртах, и щелочных растворах. В щелочной среде дает желто-оранжевую окраску в кислой среде – красную.



Проведены пробные синтезы полимера полиарилата, межфазной поликонденсацией бисфенола с терефталойлхлоридом. К 0,1 М водному щелочному раствору бисфенола, при интенсивном перемешивании прибавляли раствор хлорангидрида в четыреххлористом углероде. Реакционную смесь перемешивали в течении 20-30 минут.



Получают полимер в виде порошка бежевого цвета, температура размягчения 290°С. Полимер растворим в хлорированных углеводородах.

Работа продолжается. Планируется в дальнейшем получение и изучение свойств смешанных полиарилатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Webster and Kamstra, Proc. S. D. Acad. Sci., 30, 40 (1951).
2. В.В. Коршак, С.В. Виноградова. *Полиарилаты*. Наука, Москва, 1964

ГАЗОВЫЕ СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ ГЕТЕРОПОЛИСОЕДИНЕНИЙ И ПЛЕНОК ДИОКСИДА КРЕМНИЯ

Руководитель М.А. Феофанова

Тверской государственной университет

Кафедра аналитической химии

Разработка селективных и высокочувствительных физико-химических методов анализа в связи со сложной экологической обстановкой является на сегодняшний день актуальной задачей. Экспрессно проводить контроль загрязнений атмосферы позволяют современные газовые сенсоры, работа которых основана на различных механизмах. Наиболее перспективные являются сенсоры химического типа, электрофизические характеристики которых изменяются в зависимости от концентрации регистрируемого компонента атмосферы. При этом аналитический процесс включает адсорбцию на чувствительном слое молекул определяемого вещества и последовательность взаимообусловленных химически реакций с их участием. Основным требованием к первой стадии является условие селективности и обеспечения отсутствия отклика на другие компоненты. Вторая стадия должна быть высокочувствительной на продукт первой и приводить к изменению числа или вида носителей заряда. Третья стадия должна возвращать систему в исходное состояние при снижении концентрации определяемого компонента до нуля.

В качестве первой стадии могут быть выбраны, в зависимости от природы анализируемого компонента, самые разнообразные реакции: комплексообразование, гидролиз, окисление-восстановление и т.д. Критерием их выбора может быть, например, изменение окислительного потенциала системы. В качестве второй стадии пригодно меньшее число реакций. Здесь оптимально использовать реакции с гетерополисоединениями и другими соединениями, которые дают возможность протекания многопротонных и многоэлектронных реакций, реакций обмена и вторичного комплексообразования. Они также позволяют плавно регулировать реакционную способность путем модификации состава лигандной сферы. В качестве третьей стадии могут служить электролиз, окисление кислородом воздуха, диссоциация образующегося комплекса при нагревании и других подходящих воздействий, после которых может происходить десорбция.

На сегодняшний день нами проводятся исследования в области допирования тонких пленок диоксида кремния гетерополисоединениями, которые проявляют способность к высокочувствительным химически обратимым реакциям, в ходе которых меняется число носителей заряда при контакте с анализируемыми газообразными компонентами, в результате чего происходит изменение проводимости в зависимости от концентраций реагента. Подбор различных видов гетерополисоединений с различными лигандами, обеспечивает специфичность реакции к разным компонентам и дает возможность определения наличия низких концентраций аммиака в сложных газовых смесях.

С.С. Рыбина, С.Ю. Козинков, Н.В. Айдинян, П.В. Иванова, В.О. Ерофеева

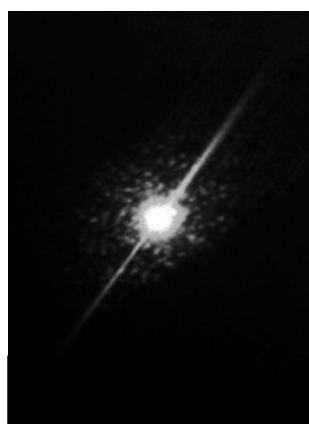
АНИЗОТРОПНОЕ ОТРАЖЕНИЕ СВЕТА ПОЛИРОВАННЫМИ ПОВЕРХНОСТЯМИ КРИСТАЛЛОВ

Руководитель А.И. Колесников

Тверской государственный университет

Кафедра прикладной физики

В настоящей работе обсуждается известный, возможно, практически, но не изученный и не отмеченный в научной литературе оптический эффект. Он состоит в том, что при отражении лазерного света видимого



диапазона от поверхностей монокристаллов, отполированных по максимальным классам чистоты и имеющих минимальную шероховатость, на экране наблюдаются резкие максимумы в виде ярких узких полос (бликов), отходящих от центрального пятна, соответствующего правильному отражению, и окруженного округлой небольшой областью со спеклами, изображенными на рисунке. Экспериментально показано, что количество и взаимное расположение полос зависит от кристаллографической ориентации плоскости

поверхности, от угла падения лазерного луча и его направления относительно осей элементарной ячейки кристалла. Эффект отмечен на кристаллах всех исследованных типов – парателлурита (α - TeO_2), германия и кварца. При поворотах кристаллов вокруг оси, совпадающей с нормалью к поверхности, узкие блики поворачиваются в точном соответствии с вращением кристалла. Методами атомно-силовой микроскопии и интерференционной профилометрии показано, что явление связано с ориентацией по плоскостям спайности неровностей рельефа нанометрового масштаба (10...40 нм), остающихся после полировки, от которых отражение света происходит в рамках приближения геометрической оптики.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Колесников А.И., Каплунов И.А., Морозова К.А., Третьяков С.А. Влияние рельефа поверхности на отражение и пропускание электромагнитного излучения // Аннотированный сборник материалов Всероссийской научно-технической конференции «Расплетинские чтения - 2016». М.: ПАО НПО «Алмаз». 2015. С. 103.

ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЕ В РАСТВОРАХ L-ЦИСТЕИНА И ПЕРХЛОРАТА СЕРЕБРА

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

Получение и изучение свойств супрамолекулярных гидрогелей на основе L-цистеина и солей серебра является актуальной задачей в связи с возможностью их использования в медицине и косметологии. Поэтому целью работы являлся синтез новой гелеобразующей с использованием L-цистеина и перхлората серебра (AgClO_4). Объектами исследования являлись низкоконцентрированные водные цистеинсеребряные растворы (ЦСР) указанных соединений (табл.). Растворы и гидрогели изучали методами УФ спектроскопии на спектрометре «Thermo Scientific Evolution Array UV-VIS», динамического светорассеяния (ДСР) на приборе «Zetasizer ZS», просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) «LEO 912 AB OMEGA» и вискозиметрии на лепестковом вискозиметре «SV-10».

Таблица. Концентрационные условия приготовления образцов

№	1	2	3	4
C_{Cys}	$3 \cdot 10^{-3} \text{M}$			
C_{AgClO_4}	$4,5 \cdot 10^{-3} \text{M}$	$5,0 \cdot 10^{-3} \text{M}$	$5,3 \cdot 10^{-3} \text{M}$	$5,5 \cdot 10^{-3} \text{M}$
Ag/Cys	1,50	1,67	1,75	1,83
Электролит (NaCl , Na_2SO_4)	$7,5 \cdot 10^{-4} \text{M}$			

При сливании водных растворов L-цистеина и перхлората серебра образуется сразу прозрачный раствор, вязкость которого возрастала для образцов №1 и 2 в течение 30 мин, примерно в 2 раза, для образцов №3 и 4 в течение 1 суток, примерно в 1,5 раза. Далее в ЦСР вводили электролит. Обнаружено, что ЦСР при добавлении NaCl или Na_2SO_4 при соотношении компонентов (1,50 – 1,83) образуют супрамолекулярные гели. Однако при введении NaCl , так же как и для образцов №1 и 2, образуются более устойчивые и прочные гидрогели. Таким образом, для синтеза наиболее прочных гелей предпочтительно использовать NaCl при соотношении Ag/Cys от 1,50 до 1,67. При соотношении Ag/Cys меньше, чем 1,50, выпадал осадок, а при большем, чем 1,83 сам раствор мутнел и при введении электролита выпадал осадок.

Согласно данным УФ спектроскопии в исследуемых образцах наблюдается увеличение интенсивности двух полос поглощения 330 и 405 нм, что связано с образованием супрамолекулярных цепочек. Методом ДСР обнаружено, что в ЦСР образуются несколько групп агрегатов, из которых формируется пространственная сетка при введении электролитов. Таким образом, изучаемая супрамолекулярная система является перспективной для изучения явлений самоорганизации и практического использования.

ГИДРИРОВАНИЕ ФУРФУРОЛА С ПОМОЩЬЮ ПАЛЛАДИЕВЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ НА РАЗЛИЧНЫХ НОСИТЕЛЯХ

Руководитель В.Г. Матвеев

Тверской Государственный Технический Университет

Кафедра биотехнологии и химии

В последние десятилетия разрабатываются технологии преобразования исходной биомассы в современные и удобные для использования виды энергоносителей. Наиболее часто встречающимся компонентом пиролизной жидкости являются фурфурол и его производные.

Фурфурол является одним из соединений для производства разнообразных добавок для топлива, таких как фуран, фурфуриловый спирт, тетрагидрофурфуриловый спирт, 2-метилфуран, 2-метилтетрагидрофуран и тетрагидрофуран.

Палладиевые катализаторы наиболее часто используются в гидрировании, дезоксигенировании и других процессах.

Тестирование палладиевых катализаторов в процессе гидрирования фурфурола проводилось в реакторе Series 5000 (USA) Multiple Reactor System (MRS) при варьировании таких параметров, как концентрация фурфурола, природа и количество катализатора, температура, природа растворителя и давление водорода. Получены данные о влиянии параметров проведения процесса на конверсию фурфурола и селективность по основным продуктам.

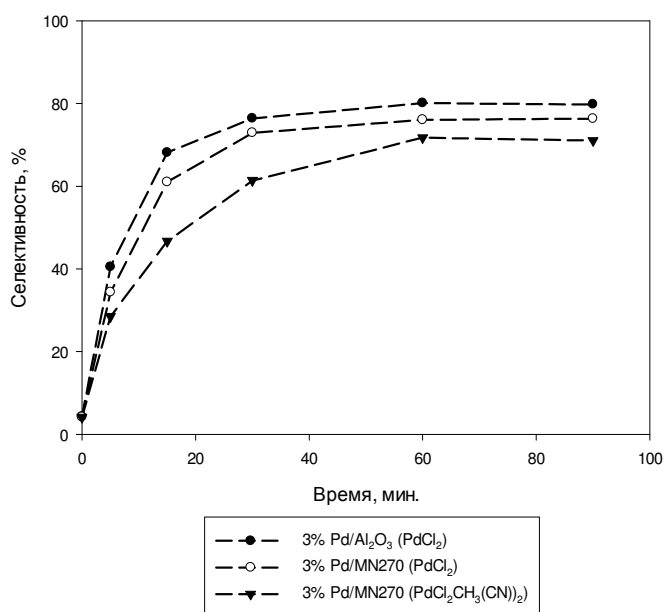


Рис. Зависимость селективности по фурфуриловому спирту от времени в присутствии различных палладиевых катализаторов

Е.В. Семёнова, Н.А. Немыгина

ПРИМЕНЕНИЕ Au- и Pd-СОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ СВЕРХСШИТОГО ПОЛИСТИРОЛА В РЕАКЦИИ КРОСС-СОЧЕТАНИЯ СУЗУКИ

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

Реакция кросс-сочетания Сузуки между арилбороновыми кислотами и арилгалидами является очень распространенным методом синтеза биариллов, которые очень часто используются в синтезе фармацевтических препаратов [1]. Преимущественно реакцию Сузуки проводят с помощью монометаллических палладиевых катализаторов. Однако, в последнее время огромное внимание уделяют и моно- и биметаллическим катализаторам, содержащим золото, которое также способно катализировать реакцию Сузуки, но с меньшим выходом продукта. Например, было показано [2], что наночастицы золота, нанесенные на оксиды щелочноземельных металлов, особенно на MgO или CaO проявили высокую активность (выход продукта 89-93%) в реакции Сузуки в присутствии K_2CO_3 в качестве основания и использованием диметилформамида как растворителя. При использовании биметаллических (Au-Pd) катализаторов отмечалось заметное увеличение каталитической активности по сравнению с монометаллическими аналогами. Улучшение активности катализатора при добавлении золота вероятнее всего связано с изменением электронной структуры каталитически активного металла (Pd), а также с формированием маленьких наночастиц палладия и структурными изменениями в катализаторе [1].

В рамках данной работы был синтезирован ряд моно- (Au, Pd) и биметаллических (Au-Pd) катализаторов на основе сверхсшитого полистирола (СПС) при варьировании содержания палладия и способа восстановления. Полученные катализаторы были протестированы в реакции кросс-сочетания 4-броманизола и фенилбороновой кислоты. Было обнаружено, что использование биметаллических Au-содержащих катализаторов позволяет повысить выход 4-метоксибифенила до > 97%, что существенно выше показателей, достигаемых с применением монометаллических катализаторов на основе СПС.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Speziali M. G. // Applied Catalysis A: General. 2013. № 462-463. P. 39.
2. Dumbre D.K. // Journal of Catalysis. 2013. № 301. P. 134.

ТЕРМОИНДУЦИРОВАННЫЕ ПРОЦЕССЫ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ
МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ PIN-PMN-PT

Руководитель Н.Н.Большакова

Тверской государственной университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Настоящая работа поставлена с целью получения информации о термоиндуцированных импульсных процессах и стабильности поляризованного состояния тройных систем свинецсодержащих монокристаллических твердых растворов (PIN-PMN-PT) в широком температурном диапазоне, включающем точку Кюри. Исследования проведены в интервале температур (10-200)°С методом теплового эффекта Баркгаузена (ТЭБ). Температура образцов изменялась непрерывно, со скоростью $0,2 \text{ K}\cdot\text{c}^{-1}$ и контролировалась медьконстантановой термопарой с погрешностью, не превышающей 5%.

Установлено, что поляризованные кристаллы PIN-PMN-PT сохраняют устойчивую униполярность при изменении их температуры в области сегнетоэлектрических фаз. Однократное нагревание образцов выше точки Кюри вызывает их частичную деполяризацию. Приложение к образцам внешнего электрического поля $E > 120 \text{ В}\cdot\text{см}^{-1}$ вызывает появление импульсов, полярность которых свидетельствует о формировании в процессе поляризации кристалла внутреннего электрического поля. С увеличением напряженности поля, приложенного к образцу, наблюдается увеличение скорости и расширение температурного диапазона следования скачков переключения, что свидетельствует об интенсификации процессов перестройки доменной структуры. Интегральная зависимость числа скачков переключения от температуры носит монотонный характер и выходит на насыщение при температурах, превышающих 80°С. Температурная зависимость скорости следования скачков переполаризации имеет ряд аномалий, наиболее заметные из которых соответствуют температурам 80°С и 128°С.

Полученные закономерности можно проанализировать на основании литературных данных о доменной структуре исследованных кристаллов. Обнаружены два типа доменов: в ромбоэдрической фазе сегнетоэлектрические-сегнетоэластические 71°– и 109° – домены, в тетрагональной фазе: 90° и 180° –сегнетоэлектрические. В ромбоэдрической фазе процессы перестройки доменной структуры кристаллов PIN-PMN-PT происходят более интенсивно, чем в тетрагональной фазе.

ТЕХНОЛОГИИ ПЕРЕРАБОТКИ И УТИЛИЗАЦИИ ПОЛИМЕРНЫХ ОТХОДОВ

Руководитель К.В. Чалов

Тверской государственный технический университет
Кафедра технологии полимерных материалов

С каждым годом обостряется проблема утилизации и переработки отходов полимеров для повторного использования. Одной из основных задач является снижение количества полимерных отходов.

Основную долю отходов составляют полиэтилен, полипропилен, полиэтилентерефталат (ПЭТФ), поливинилхлорид (ПВХ). Но только небольшая часть (около 20–25 %) пластиковых отходов подвергается переработке, а остальные складываются на полигонах.

Среди современных технологий утилизации и переработки полимерных отходов можно выделить основные: захоронение твердых бытовых отходов (ТБО), термические способы (прямое сжигание, пиролиз, и т.д.), гидролиз, гликолиз, метанолиз, радиодеструкция, механический рециклинг (измельчение, плавление, грануляция).

Наиболее рациональными ресурсосберегающими способами переработки ТБО являются термические способы. Наиболее перспективный из них – пиролиз. Он позволяет перерабатывать пластики различного химического состава без предварительной подготовки и получать ценные газообразные и жидкие продукты.

В данной работе были рассмотрены различные методы утилизации полимерных отходов, а пиролиз был выделен среди них как наиболее эффективный и экологически безопасный. Исследование процесса пиролиза проводилось на экспериментальной установке, состоящей из стационарного реактора, электропечи и сборников жидких и газообразных продуктов.

Использование в процессе катализаторов позволяет снизить энергозатраты процесса и повысить выход газообразных и жидких горючих углеводородов. Поэтому, поиск дешевых и доступных катализаторов для утилизации полимерных отходов методом пиролиза является актуальным направлением для научных исследований.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Арашкевич Д.А. // Пластические массы. 2003. № 5. С. 12.
2. Зезин А.Б. Полимеры и окружающая среда // Соросовский образовательный журнал. 1996. № 2. С. 57–64.

А.И. Сергеева

СИНТЕЗ И ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫЕ СВОЙСТВА АЛКИЛПОЛИГЛИКОЗИДОВ

Руководитель Н.В. Веролайнен

Тверской Государственный университет

Кафедра органической химии

В настоящее время отмечается большой интерес к исследованию алкилполигликозидов (АПГ) в связи с перспективами их широкого использования. Главная притягательность АПГ заключается в их благоприятных экологических свойствах: они нетоксичны для водоемов и характеризуются высокими скоростями биоразложения. АПГ проявляют хорошие очищающие и моющие свойства. В дополнении ко всему алкилполигликозиды оказывают мягкое действие на кожу, что делает эти неионогенные поверхностно-активные вещества очень привлекательными для получения продуктов личной гигиены и косметологии. Данный продукт хорошо совместим с катионными антисептиками, эффективен в отношении патогенной микрофлоры, имеет улучшенный вкус и не имеет послевкуся.

В настоящей работе алкилполигликозиды с C_{10} , C_{12} получали по модифицированной методике:

В трехгорлую колбу, объемом 250 мл, помещали 0,7 моль децилового или додецилового спирта, смешанного с 0,005 моль серной кислоты, смесь нагревали при перемешивании до температуры 90 °С. Затем добавляли 0,025 моль сильной органической кислоты (п-толуолсульфокислоту) и 0,5 моль тонко измельченной безводной глюкозы. Создавали в системе вакуум (остаточное давление 10-20 мм рт.ст.) и вели процесс при температуре 90-100 °С в течение 3-4 часов при интенсивном перемешивании реакционной массы до полного удаления реакционной воды. По окончании процесса катализатор нейтрализовали гидроксидом натрия.

Полученные децил- и додецилполигликозиды в виде вязкой прозрачной массы исследованы методом ИК-спектроскопии и анализированы как неионогенные поверхностно-активные вещества.

ИССЛЕДОВАНИЕ БЕЛКОВЫХ ИНГИБИТОРОВ α -АМИЛАЗЫ ИЗ РАСТИТЕЛЬНОГО МАТЕРИАЛА

Руководитель Е.А. Прутенская
Тверской государственной технической университет
Кафедра Биотехнологии и Химии

Ингибиторами пищеварительных ферментов являются вещества, способные замедлять, либо полностью тормозить активность некоторых ферментов.

В работе рассматриваются белковые ингибиторы α -амилазы, выделенные из бобовой культуры. Обоснован выбор объекта исследования, изучены свойства и физико-химические характеристики. Подобраны оптимальные условия (экстрагент, гидромодуль, органические осадители) выделения ингибиторов, получены целевые продукты технологии выделения, изучен химический состав и проведено определение амилолитической активности.

В качестве объекта изучения была выбрана темно-красная фасоль Кидни. Семена белкового типа содержат пептиды, ферменты, ингибиторы протеаз (трипсина и химотрипсина) и лектины. Было определено содержание зольных веществ, этот показатель равен 3.24%. Липидные фракции составили 1.53%. Таким образом, фасоль содержит достаточное количество ингибиторов белкового происхождения, но и большое количество различных примесей.

Для выделения ингибиторов ферментов из сырья был использован фосфатный буфер с $pH=8$, так как при его использовании выход белковых веществ был максимальным. Затем проводили фильтрацию и фильтрат исследовали на анализаторе размера частиц. Эффективный диаметр белковых частиц был равен 179.2 нм, показатель полидисперсности - 0.269. Было выяснено, что в фильтрате находилось три фракции, две из которых преобладали.

Для осаждения обычно используется растворитель, который должен полностью смешиваться с водой, не реагировать с белками и обладать хорошим осаждающим действием. Поэтому были выбраны ацетон и этанол. Ацетон обладает меньшим денатурирующим действием, чем этанол. Он также более летуч, что позволяет легко удалять его из растворенного осадка при пониженном давлении.

Для определения амилолитической активности использовали бактериальную α -амилазу из грибов *Aspergillus oryzae*. Амилолитическую активность проверяли, воздействуя на субстрат – крахмал. При добавлении ингибиторов в раствор активность амилазы снижалась в среднем на 7.7 %. Механизм ингибирования не определяли.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ ФОРМЫ РАССЕИВАЮЩИХ ЧАСТИЦ ВНУТРИ ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЫ

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

Для придания полимерным материалам необходимых свойств в полимерную матрицу вводят частицы наполнителя или создают поры различной геометрической формы. В зависимости от концентрации и размера частиц наполнителя (пор), их геометрической формы, а в случае анизометричных (анизодиаметричных) частиц, их ориентации в полимерной матрице, можно существенно варьировать указанные свойства.

Целью настоящей работы являлась разработка спектроскопического метода для оценки анизотрии и ориентации рассеивающих частиц в полимерных пористых материалах и композитах.

В работе в качестве объектов исследования выбраны различные материалы: трековые мембраны; пористые пленки полистирола (ПС) на подложке из полипропилена (ПП); полимерные композиты с наполнителями различной природы.

Представляет интерес рассмотрение характера упругого рассеяния для пленок с анизометричной формой рассеивающих частиц. К таким рассеивающим частицам можно отнести крейзы (поры), образующиеся при ориентационном вытягивании ПЭ.

Полученная из спектров пропускания угловая зависимость интенсивности рассеяния свидетельствует о том, что поры в исследуемой пленке имеют форму далекую от сферической и ориентированы перпендикулярно оси ориентационной вытяжки.

Другим примером полимерного материала с анизометричной формой рассеивающих частиц является пленка полимерного композита на основе ПП, наполненного углеродными нановолокнами (УНВ). Угловая зависимость интенсивности рассеяния от частиц наполнителя свидетельствует о том, что рассеивающие частицы имеют вытянутую форму и ориентированы в направлении фильерной вытяжки. Микрофотография такого образца демонстрирует аналогичную картину, показывает,

Таким образом, записывая оптические спектры пропускания при вращении образца можно оценивать анизотрию формы рассеивающих центров (пор или частиц наполнителя) и их ориентацию внутри полимерной матрицы.

ВЫДЕЛЕНИЕ КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ($\text{Na}_2[\text{FeHepPro}]$, $\text{Na}_2[\text{MnHepPro}]$, $\text{Na}_3[\text{ZnHepPro}]$, $\text{Na}_2[\text{ZnHepPro}]$) ИЗ ИХ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ

Руководитель М.А.Феофанова

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Гепарин – биополимер класса гликозаминогликанов, синтезируется в печени и легких животных. В форме натриевой или кальциевой соли гепарин широко используется в медицине как антикоагулянт прямого действия.

Для получения необходимых комплексных соединений (FeHepPro^{2-} , MnHepPro^{3-} , ZnHepPro^{3-} , ZnHepPro^{2-}) был применен метод математического моделирования, использующий данные рН-метрического исследования систем: $\text{Fe}^{3+} - \text{Na}_4\text{Hep} - \text{Pro}^-$, $\text{Mn}^{2+} - \text{Na}_4\text{Hep} - \text{Pro}^-$, $\text{Zn}^{2+} - \text{Na}_4\text{Hep} - \text{Pro}^-$, где соотношение компонентов (ион металла : гепарин : аминокислота) в растворе было определено, как 1 : 1 : 1.

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

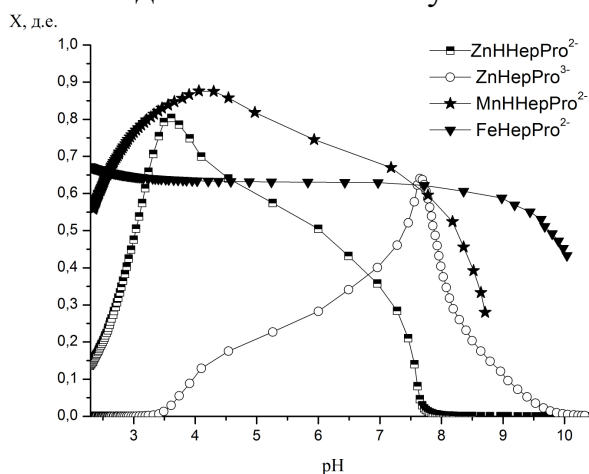


Рис.1. Концентрационная диаграмма распределения комплексных форм (FeHepPro^{2-} , MnHepPro^{3-} , ZnHepPro^{3-} , ZnHepPro^{2-}).

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

И.А. Скрыпникова

КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ АСКОРБИНОВОЙ КИСЛОТЫ В ЯГОДАХ ГОДЖИ

Руководитель Н.В. Баранова

Тверской государственный университет

Кафедра аналитической химии

Аскорбиновая кислота является важным элементом питания и присутствует в составе многих продуктов питания, а также фармацевтических и косметических препаратов [1]. Аскорбиновая кислота относится к числу наиболее важных витаминов, поддерживающих нормальное функционирование человеческого организма и участвующих во многих метаболических процессах, поэтому определение содержания аскорбиновой кислоты в различных препаратах является важной аналитической задачей.

Известно, что в состав ягод годжи входят такие вещества, как: 21 минерал, 18 аминокислот, 6 жирных кислот, 4 полисахарида, линолевая кислота, углеводы, жиры, протеины, клетчатка и витамины (С, В₁, В₂, В₆, Е). Для количественного определения содержания аскорбиновой кислоты был выбран метод окислительно-восстановительного титрования [1]. Титрование проводили двумя способами (йодатным и йодометрическим). В качестве титранта брали два вещества: КЮ₃ и I₂ в КИ. При титровании первым способом содержание кислоты составило 16,138 мг в 10 г ягодах, а во втором случае – 17,612 мг. Согласно теоретическим данным на 10 г ягод приходится 14,8 мг аскорбиновой кислоты. Из результата анализа видно, что экспериментальные результаты согласуются с теоретическими данными [1]. Поэтому рекомендуется употребление ягод годжи для исключения дефицита аскорбиновой кислоты в организме.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лавренов С.Н. L-аскорбиновая кислота. Свойства и методы химической модификации / С.Н. Лавренов, М.Н. Преображенская // Химико-фарм. журн. – Т. 39. – №5. – 2005 – С. 26-38.

ВЛИЯНИЕ УДОБРИТЕЛЬНЫХ СМЕСЕЙ С УЧАСТИЕМ ОСВ НА УРОЖАЙНОСТЬ И КАЧЕСТВО ОЗИМОЙ РЖИ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии и земледелия

Происходящий в нашей стране процесс урбанизации сопровождается не только увеличением численности городского населения, но и весьма заметным ростом разного рода бытовых выбросов. По-видимому, не случайно 2017 год объявлен годом экологии, поскольку накапливаемое в крупных населенных пунктах количество бытового мусора не полностью вывозится на полигоны для его хранения, а значительная часть оседает в городах и других поселениях, приводя к их загрязнению. Не являются исключением и осадки сточных вод (ОСВ), получаемые в процессе очистки сточных канализационных вод г. Твери. В ОСВ содержится большое количество углерода, азота, многих зольных элементов, используемых растениями при их росте и развитии. По ряду причин ОСВ непосредственно под растения вносить не рекомендуется. С их участием готовят компосты, используя разные органические наполнители. Однако широкого распространения такие компосты в производстве не нашли. Мы исследовали удобриельные смеси, составленные из ОСВ и наполнителей, в качестве которых применили опилки, торф и солому.

С этой целью был заложен полевой мелкоделяночный опыт на дерново-подзолистой супесчаной почве, имеющей средний уровень плодородия. Дозы внесения составляли из расчета 60 т/га, с учетом пролонгации смесей в течение 4-5 лет. В данном сообщении представлены данные по влиянию смесей на урожайность и качество зерна. Все смеси на второй год их действия повысили урожайность озимой ржи на 26-57%, по отношению к контролю. Одновременно в зерне удобренных вариантов содержалось больше сырого протеина, зольных элементов, а также нитратного азота (табл.1).

Таблица 1. Влияние удобриельных смесей и компоста на качество зерна

№ № п/ п	Вариант	Сырой протеин, %	Клетчатка , %	Зола, %	Фосфор, %	Кальций, %	Нитратны й азот, %
1	Контроль	90,8	40,8	21,2	4,1	0,6	42
2	ОСВ:опилки 1:1	99,6	48,4	24,0	4,8	0,8	52
3	ОСВ:опилки 1:2	98,9	42,0	23,6	4,5	0,7	50
4	ОСВ:опилки 1:3	96,2	36,5	23,1	4,3	0,6	44
5	ОСВ:торф 1:1	99,3	47,9	24,6	4,6	0,7	55
6	ОСВ:торф 1:2	98,4	43,1	23,3	4,4	0,7	53
7	ОСВ:торф 1:3	97,1	38,2	22,2	4,3	0,6	49
8	ОСВ:солома 1:1	97,5	46,4	23,8	4,7	0,7	50
9	ОСВ:солома 1:2	95,6	45,8	22,9	4,5	0,6	48
10	ОСВ:солома 1:3	93,2	45,1	21,6	4,5	0,6	43

ИССЛЕДОВАНИЕ ФЕНОЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ВЫСШИХ РАСТЕНИЙ В УСЛОВИЯХ УРБАНИЗИРОВАННОЙ СРЕДЫ МЕТОДОМ УФ СПЕКТРОСКОПИИ

Руководители П.М. Пахомов

Тверской государственной университет

Кафедра физической химии

При действии неблагоприятных факторов среды, зачастую антропогенного характера, растения могут испытывать стресс. Такое состояние растительного организма сопровождается изменениями в его физиологических и биохимических процессах, в том числе наиболее опасным последствием негативного воздействия среды является избыточное образование активных форм кислорода. В настоящее время к числу активных форм кислорода относят производные кислорода радикальной природы. Среди ингибиторов радикалов в биологических системах важное место занимают фенольные соединения, содержание которых в растении может увеличиваться в ответ на изменившиеся условия среды. Ввиду этого актуальным является изучение ответных реакций живых организмов и, в первую очередь, растений, на влияние антропогенных факторов и стрессовых условий. Поскольку вещества фенольного типа поглощают в УФ области электромагнитного спектра, то рационально использовать метод УФ спектроскопии для анализа количественного содержания фенольных веществ, а также их антиоксидантной активности. Используя метод УФ спектроскопии, в России и за рубежом проводятся исследования антиоксидантной активности растительных полифенолов на основе их взаимодействия со свободным стабильным радикаломДФПГ (1,1-дифенил-2-пикрилгидразила). Кроме того, помимо существующих методов количественного определения растительных фенолов (методы Левенталя, ВЭЖХ, фотоколориметрический метод Фолина-Чикольте и др.), исследование кинетики взаимодействия радикалаДФПГ с антиоксидантами растения в УФ диапазоне позволяет оценить их концентрацию. В данной работе были проведен анализ содержания фенольных соединений в некоторых высших растений, а также их антиоксидантной активности по отношению к свободному радикалуДФПГ. Таким образом, посредством изучения поведения фенольных соединений в системе биохимического защитного механизма становится возможным оценить реакцию растительных объектов на изменяющиеся условия среды, что позволяет осуществить экологический контроль.

УПРОЧНЕНИЕ СТРУКТУРЫ
СВЕРХВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛИЭТИЛЕНА,
ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ ГЕЛЬ – ФОРМОВАНИЯ
ВОЛОКОН, В ПРОЦЕССЕ ОРИЕНТАЦИОННОГО
ВЫТЯГИВАНИЯ

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

Повышение упруго-прочностных характеристик волокон из гибкоцепных полимеров является актуальной задачей. Целью настоящей работы являлось изучение строения и свойств волокон из сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ), полученных методом гель-формования. Волокна СВМПЭ получали на опытно-промышленной установке ВНИИСВ в три стадии ориентационного вытягивания. Упруго-прочностные характеристики волокон оценивали с помощью разрывной машины Instron 1122. Поляризационные ИК спектры волокон (в двух поляризациях: 0° и 90°) записывали на ИК-Фурье спектрометре «Vertex 70», а микрофотографии получали на электронном сканирующем микроскопе «JEOL JSM». Методом ИК спектроскопии оценивали степень ориентации выпрямленных транс-сегментов цепей в кристаллических ($730, \text{см}^{-1}$) и аморфных областях волокон ($720, \text{см}^{-1}$) по формуле:

$$\langle \cos^2\theta \rangle = (2 - R)/(2 + R),$$

где $R = D_{\parallel}/D_{\perp}$ – дихроичное соотношение, D_{\parallel} и D_{\perp} – оптические плотности соответствующих полос поглощения при параллельно и перпендикулярно поляризованном свете. Полученные данные свидетельствуют о том, что при ориентационном вытягивании на первой стадии происходит формирование слабо ориентированной фибриллярной структуры. На второй стадии вытяжки наблюдается основной рост молекулярной ориентации и упруго-прочностных показателей, при этом фибриллы уже хорошо ориентированы вдоль направления вытяжки. Вытягивание волокон на третьем этапе ведет к дальнейшему, но незначительному, по сравнению со второй стадией, увеличению прочности и модуля упругости, а также молекулярной ориентации. На микрофотографиях таких образцов обнаружено появление продольных трещин, приводящих, в конечном счете, к разрушению образца. Задачей наших дальнейших исследований является подбор оптимальных условий ориентационного вытягивания, особенно на третьей стадии, с целью предотвращения явления фибриллизации (продольного расщепления) волокон и, тем самым, повышения их упруго-прочностных свойств.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СИСТЕМЕ ЗОЛОТО – ТИОЦИАНАТ – ТИОМОЧЕВИНА – ЖЕЛЕЗО(III) МЕТОДОМ ОТРАЖАТЕЛЬНОЙ FTIR – СПЕКТРОСКОПИИ

Руководитель Ю.В. Чурсанов

Тверской государственный технический университет

Кафедра химии

Окислительное растворение золота в присутствии тиоцианатов SCN^- , тиомочевины $\text{SC}(\text{NH}_2)_2$ и окислителя ионов железа(III) сопровождается образованием однородных и разнолигандных комплексов: $[\text{Au}(\text{SCN})_2]^-$, $[\text{Au}(\text{SCN}_2\text{H}_4)_2]^+$, $[\text{Au}(\text{SCN})(\text{SCN}_2\text{H}_4)_2]$. Растворение протекает в смешанном гидродинамическом режиме, при котором константы скорости кинетической и диффузионной стадий сравнимы по величине [1]. Причем, диффузионное торможение обусловлено образованием твердых продуктов реакции на поверхности металла. В присутствии только тиоцианата на поверхности образуется пленка тиоцианата золота AuSCN . В данной работе изучено состояние поверхности золота методом отражательной (скользящей) спектроскопии. Спектры снимали на FTIR- спектрофотометре ФСМ 2201 ООО «Инфраспек» с использованием приставки с углом 80° , спектральное разрешение 4 см^{-1} .

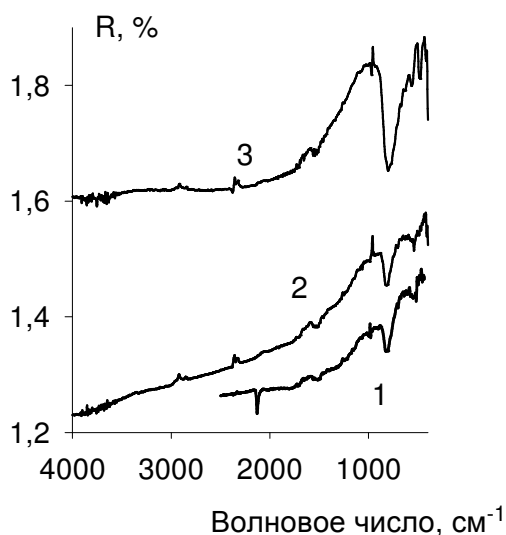


Рис. ИК-спектры отражения поверхности Au после растворения 1 – KNCS; 2 – $\text{SC}(\text{NH}_2)_2$; 3 – смесь KNCS и $\text{SC}(\text{NH}_2)_2$.

На рисунке приведены спектры отражения, полученные после растворения пластинки золота в тиоцианате, тиомочевине и смешанной системе, во всех случаях концентрация лигандов составляла $0,25 \text{ M}$, окислителя $0,1 \text{ M}$, температура 298 K . Анализ спектров позволяет определить состав твердых продуктов реакции и соединений, адсорбируемых поверхностью образца. Для тиоцианата наблюдается полоса при 2129 см^{-1} , которая относится к валентным колебаниям связи CN иона тиоцианата, координированного через серу. На всех спектрах присутствует полоса в диапазоне $884 - 792 \text{ см}^{-1}$, которая соответствует валентным колебаниям связи CS лигандов, адсорбированных на поверхности золота.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Чурсанов Ю.В., Луцик В.И., Старовойтов А.В., Поташников Ю.М. // Вестник ТвГУ. Серия: Химия. 2015. № 2. С. 52–60.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЙОГУРТОВ ТОГРОВЫХ МАРОК
«АГУША», «ТЁМА», «BIO MAX», «САВУШКИН», «DANONE
«АКТИВИА», «САМПИНА «НЕЖНЫЙ»

Руководитель Е.В. Андрианова
Тверской государственной медицинской университет
Кафедра биохимии, с курсом КЛД ФДПО, интернатуры и ординатуры

В работе были исследованы «Детский творог «Агуша» классический», «Биотворог классический 4,5% «Тёма», «Биойогурт классический BIO MAX», «Йогурт Оптималь 2% «Савушкин», «Биойогурт Danone «Активиа», «Продукт йогуртный пастеризованный «САМПИНА «Нежный» 2.9% натуральный вкус». Целью настоящей работы является сравнительный анализ йогуртов разных марок, проведение качественных реакций на наличие крахмала, сахарозы и белка в йогуртах, определение водородного показателя, а также проведение опроса среди студентов II курса ТГМУ, для определения йогурта, пользующегося наибольшим спросом, среди исследуемых образцов.

Водородный показатель указывает на кислую среду, что говорит о наличии молочнокислых организмов ($pH = 4-5$) и соответствует норме. Был обнаружен крахмал в образцах «Биойогурт классический BIO MAX», «Йогурт Оптималь 2% «Савушкин», «Продукт йогуртный пастеризованный САМПИНА «Нежный» 2.9% натуральный вкус», стоит отметить, что в первых двух образцах крахмал не был указан в составе. Подтвердили наличие белка во всех образцах. Окрашивание обусловлено взаимодействием пептидных связей белка со свежесожденным гидроксидом меди. Сахароза была обнаружена в образцах торговых марок «Агуша», «BIO MAX», «Савушкин», «САМПИНА «Нежный». Плесень появилась на 3 день исследований в образце «Продукт йогуртный пастеризованный САМПИНА «Нежный» 2.9% натуральный вкус», на 4 день в образцах «Биойогурт классический BIO MAX», «Йогурт Оптималь 2% «Савушкин» и на 5 день в образцах «Детский творог «Агуша» классический», «Биотворог классический 4,5% «Тёма», «Биойогурт Danone «Активиа». По результатам опроса йогурт торговой марки «Danone «Активиа» выбрали 38% опрошенных, йогурт «САМПИНА «Нежный» - 28%, йогурт «Агуша» - 23%, йогурты торговых марок «Тёма», «BIO MAX» и «Савушкин» - 7%, 3% и 1% соответственно.

ПЕРЕКРЕСТНАЯ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ТЕТРАЦИКЛИНОВОГО
ЭЛЕКТРОДА К ДРУГИМ АНТИБИОТИКАМ

Руководитель С.С. Рясенский

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Определение тетрациклина возможно с использованием экспериментального твердоконтактного ионоселективного электрода. Возникает вопрос: будет ли экспериментальный электрод селективно определять тетрациклин в присутствии близких аналогов этого антибиотика? Целью настоящей работы было определить селективность экспериментального твердоконтактного электрода, а также ионоселективного электрода с внутренним электродом сравнения по отношению к структурным аналогам тетрациклина. Твердоконтактный ИСЭ был изготовлен из полианилинового трансдьюсера, включающего в себя полианилин, ПВХ и ДБФ в соотношении 35:40:25. Электрод классического типа были изготовлен из ионоселективной мембраны, состоящей из ПВХ, ДБФ и электрод активного вещества (ионный ассоциат катиона тетрациклина и молибдодокремниевой кислоты) в соотношении 5:40:55. После подтверждения работоспособности изготовленных электродов в интервале рС 1-5 провели исследования по перекрёстной чувствительности относительно структурных аналогов тетрациклина: диксициклина, окситетрациклина и метациклина. Определения коэффициентов селективности проводилось методом смешанных растворов и методом отдельного раствора. Твердоконтактный и классический ИСЭ обладают удовлетворительно селективностью по отношению к мешающим компонентам. Коэффициенты селективности перечисленных выше антибиотиков находятся в диапазоне 0,1-0,01, причём коэффициенты селективности для твердоконтактного ИСЭ были чуть ниже, чем для классического. Время стабилизации потенциала твердоконтактного ИСЭ в растворе, содержащем мешающий катион, не более 40 сек, а в случае классического ИСЭ – 70 сек. Таким образом, использование твердоконтактного ИСЭ для определения тетрациклина в присутствии его близких аналогов предпочтительнее, по сравнению с классическим электродом. В целом, найденные закономерности перекрестной селективности и коэффициентов селективности позволяют утверждать, что возможно использование экспериментальных ИСЭ для определения тетрациклина в присутствии диксициклина, окситетрациклина и метациклина. Причем твердоконтактный ИСЭ предпочтительнее. Сравнительно высокая селективность позволяет использовать данные ИСЭ для обнаружения фальсификации лекарственных форм в тех случаях, когда один антибиотик неправомерно заменяется другим.

А.А. Трушкина, Д.С. Агапова

ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЕ В НИЗКОКОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ВОДНЫХ РАСТВОРАХ НА ОСНОВЕ L-ЦИСТЕИНА И АЦЕТАТА СЕРЕБРА В ПРИСУТСТВИИ ГАЛОГЕНИДОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ

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

Гидрогели на основе биомолекул (аминокислот, пептидов) используются в регенеративной медицине, инженерии тканей, при изготовлении биоимплантов. Этим объясняется повышенное внимание к их исследованию. Как правило, такие гидрогели состоят из супрамолекул, образованных в результате самосборки низкомолекулярных желаторов, к которым относится и аминокислота L-цистеин (L-Cys), содержащая три функциональных группы – тиольную, амино-, карбоксильную. Цель этой работы – изучение условий гелеобразования в системе на основе L-Cys и ацетата серебра (AgAcet) под действием бромида и иодида калия.

Известно, что L-Cys реагирует с Ag(I), образуя $(-Ag-S(R)-)_n$ супрамолекулярный полимер, формирование геля из которого возможно под действием различных солей, например, сульфатов или хлоридов различных металлов. Константы устойчивости галогенидов серебра AgX (где X=Cl⁻, Br⁻, I⁻) соответственно равны $1,05 \cdot 10^{10}$, $1,35 \cdot 10^{11}$, $1,08 \cdot 10^{16} \text{ M}^{-1}$, поэтому можно предположить, что скорость формирования гелей с галогенид-анионами и стабильность гель-образцов во времени будет заметно различаться. Эти анионы будут вступать в конкурирующую реакцию с серебром и разрушать с разной скоростью супрамолекулярную цепочку, замещая в ней фрагменты -S(R)-.

Для исследований были приготовлены низкоконцентрированные системы на основе AgAcet и L-Cys ($C_{\text{Cys}}=3,0 \text{ mM}$) с молярным соотношением компонентов $Ag^+/L-Cys=1,25$ и различным содержанием солей KBr и KI. С помощью УФ спектроскопии (спектрометр “Evolution Array”, “Thermo Scientific”) регистрировали изменения в электронных спектрах образцов после добавления электролита для определения критической концентрации каждого аниона, при которой в спектрах исчезают полосы поглощения с максимумами ~ 312 и $\sim 390 \text{ nm}$. Реологические испытания, выполненные на вибровискозиметре SV-10, (“A&D”), показали, что образцы на основе L-Cys-AgAcet при одинаковой концентрации бромида и иодида обладают разными прочностными свойствами и устойчивостью во времени.

ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ГИДРИРОВАНИЯ
НИТРОБЕНЗОЛА НА NI СОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРАХ

Руководитель М.Г. Сульман

Тверской государственной технической университет
Кафедра стандартизации и сертификации

Процесс получения анилина восстановлением нитробензола открыл путь создания современной промышленности органических красителей. Кроме того, анилин используется в качестве полупродукта в синтезе полиуретанов, резины, фармацевтических препаратов, пестицидов и гербицидов.

Работа посвящена гидрированию нитробензола в метаноле с использованием Ni/СПС катализатора при различной температуре. Для исследования процесса гидрирования нитробензола был использован катализатор, содержащий 0.34% Ni импрегнированный в матрицу сверхсшитого полистирола. На рисунке 1 представлены кривые зависимости влияния температуры на конверсию нитробензола. Качественная и количественная идентификация полупродуктов синтеза проводилась методом газожидкостной хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием веществ.

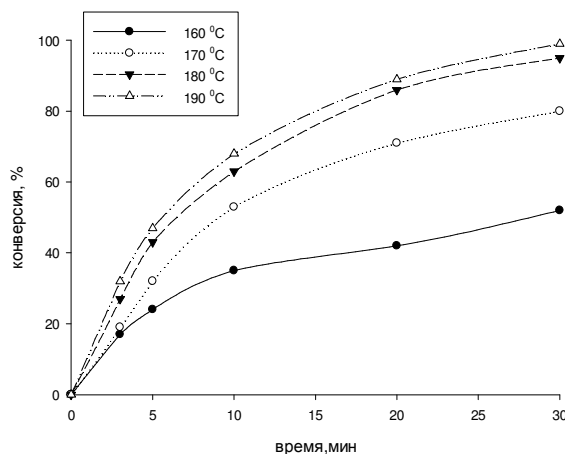


Рисунок 1. Влияние температуры на конверсию нитробензола

Реакции гидрирования нитробензола до анилина в большинстве случаев протекают в мягких условиях, поэтому в процесс был проведен при критических температурах. В результате исследования наблюдалось значительное ускорение процесса гидрирования нитробензола при использовании повышенных температур при прочих равных условиях.

ЭНЕРГИЯ ГИББСА АЛКЕНОВ

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

Цель данной работы - установление количественных корреляций «структура – энергия Гиббса» в алкенах с помощью феноменологических методов, основывающихся на концепции попарных и более сложных взаимодействий атомов в молекуле.

Для достижения поставленной цели в работе решались следующие задачи:

7. Оценка составления численных данных по энергии Гиббса.
8. Анализ экспериментальных данных.
9. Проведение численных расчетов,
10. Построение и анализ графических зависимостей “энергия Гиббса – число углеродных атомов”, “энергия Гиббса – степень замещения”.

В результате проделанной работы были проанализированы графические зависимости свойство вещества - степень замещения l . Найдено, что они в общем случае нелинейны, однако линии замещения на одну и ту же группу симбатны между собой.

Данные зависимости служат ценным дополнением к расчетно-аналитическому исследованию. Они наглядно позволяют оценить влияние вида и числа разных заместителей, а также графическим путем получить недостающие значения свойств.

В работе также выведены расчётные формулы и проведены численные расчеты по энергии Гиббса алкенов.

Например:

$$R_{C_nH_{2n}} = h_{cc}p_{cc} + h'_{cc} p'_{cc} + h_{c=c} p'_{c=c} + h'_{cc} p'_{ch} + x_{cc1} \Gamma_{cc} + x_{cc2} \Gamma_{cs} + x_{ccc1} \Delta_{ccc} + x_{cc1} \Delta'_{ccs} + x_{cc2} \tau_{cc} + x_{cc2} \tau_{cs} + x_{cc3} \omega_{cc} + x_{cc3} \omega_{cs} + p_5 V_{cc} + p'_5 V_{cs}$$

Где C' – атом углерода у двойной связи; Γ_{cc} -и Γ'_{cc} -эффективные взаимодействия пар атомов C через один атом соответственно во фрагментах $C-C-C$ и $C=C-C$, Δ_{ccc} и Δ'_{ccs} – соответствующие эффективные взаимодействия троек атомов C через один атом и т.д.

Рассчитанные величины вполне согласуются с экспериментальными, и позволяют предсказать в пределах ошибок опыта недостающие значения.

ПОЛУЧЕНИЕ ЭКОЛОГИЧЕСКИ ЧИСТОЙ ПРОДУКЦИИ
РАСТЕНИЕВОДСТВА

Руководитель А.А. Акимов

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии и земледелия

Важнейшей задачей современного земледелия является производство экологически чистой и безопасной продукции растениеводства. Экологические продукты растениеводства производят без применения минеральных удобрений и химических средств защиты. В связи с этим на передний план выходят методы биологизации земледелия за счет применения сидерации, заправки соломы, использования биологических препаратов и пр. Поэтому цель нашей работы – получение экологически чистой продукции растениеводства с использованием сидерации и биологического препарата Байкал ЭМ-1. Для достижения этой цели был заложен и проведен трехфакторный полевой опыт по следующей схеме: Фактор А: 1 – горчица белая, 2 – горчица белая + вика посевная; Фактор В: 1 – использование на зеленый корм, 2 – использование на зеленое удобрение; Фактор С: 1 – без подкормки, 2 – Байкал-ЭМ-1 (концентрация 1:1000), 3 – Байкал-ЭМ-1 (концентрация 1:2000). Исследования проводились в звене севооборота: пар занятый – озимая рожь+пожнивню горчица белая на сидерат – ячмень.

В результате проведенных исследований в 2014-2015 гг. выявлено, что использование горчицы на зеленое удобрение как в смеси с викой посевной, так и без нее при прямом действии приводит к увеличению урожайности озимой ржи на 8,0-6,8%, а ячменя в последствии на 5,4-27,1% соответственно. При этом большая эффективность зеленого удобрения, в среднем, проявляется в последствии – 16,2%, что связано с пополнением почвы свежим органическим веществом и его дальнейшей минерализацией и высвобождением питательных веществ из сидерата. Действие биологического препарата Байкал ЭМ-1 на посевах озимой ржи проявлялось слабее, чем на ячмене. Так, прибавка урожайности озимой ржи в лучших вариантах опыта составила 10,2-16,8%. При заделке соломы озимой ржи и поступлении большого количества органического вещества в почву изменилась и ее биологическая активность на следующий год при возделывании ячменя. При обработке посевов ячменя биопрепаратом Байкал ЭМ-1 большая прибавка урожая была получена при концентрации раствора 1:1000 независимо от вариантов опыта и изменялась от 21,9 до 63,6%.

В целом, большей продуктивностью обладало звено с использованием горчицы белой и вики посевной на зеленый корм при применении биопрепарата Байкал ЭМ-1 в концентрации 1:1000.

Л.В. Фимушкина

**РОЛЬ НЕКОРНЕВЫХ ПОДКОРМОК
В ПОВЫШЕНИИ УРОЖАЙНОСТИ ОЗИМОЙ РЖИ**

Руководитель А.А. Акимов

Тверская государственная сельскохозяйственная академия
Кафедра агрохимии и земледелия

Озимая рожь среди других зерновых культур наиболее зимостойка и, имея мощную коневую систему, лучше использует влагу во время осенней и весенней вегетации, а также обладает меньшей требовательностью к почвенному плодородию. При этом она дает высокие урожаи на хорошо оструктуренных и удобренных почвах при правильном подборе предшественников. В современных условиях при недостаточном обеспечении пашни минеральными удобрениями и их дороговизне необходимо изыскивать новые пути повышения урожайности традиционной для Нечерноземной зоны культуры. В последнее время широко используются для улучшения питательного режима некорневые подкормки органоминеральными и наноудобрениями, которые в своем составе имеют макро- и микроэлементы. Использование этих удобрений более эффективно на высоких агрофонах, которые создаются при правильном выборе предшественников. Важную роль играют занятые пары, продукцию которых используют на зеленое удобрение и зеленый корм.

В связи с этим нами поставлена цель – изучить влияние некорневых подкормок в звеньях севооборота с различными способами использования предшественников озимой ржи.

Для этого на опытном поле Тверской ГСХА был заложен полевой трехфакторный опыт по следующей схеме: **Фактор А** (парозанимаемая культура): 1 – горчица белая, 2 – горчица белая + вика посевная; **Фактор В** (вид занятого пара): 1 – сплошной занятый пар, 2 – сидеральный занятый пар; **Фактор С** (некорневая подкормка): 1 – без подкормки (контроль), 2 – Макс Супер-Гумат Форте (МСГФ) (2,5% раствор), 3 – Nagro (1 л/га).

В результате исследований выявлено, что урожайность озимой ржи в условиях вегетационного периода 2015-2016 гг. колебалась от 24,9 до 36,7 ц/га, наибольшая (33,7 ц/га) она была получена при возделывании озимой ржи после сидерального пара (горчица белая+вика посевная), что было выше по сравнению с аналогичным вариантом использования одновидового сидерата (горчица белая) на 5,7 ц/га или на 20,4%. Наибольшую прибавку от применения некорневых подкормок озимой ржи в фазу кущения обеспечило нано-удобрение Nagro, которое увеличивало урожайность независимо от предшественника и способа его использования на 2,4-5,4 ц/га или 9,2-17,2%. Действие удобрения эффективнее при использовании предшественников на зеленое удобрения – 4,5 и 5,4 ц/га и 17,4 и 17,2% соответственно.

ВЛИЯНИЕ КАЛИНИНСКОЙ АТОМНОЙ СТАНЦИИ НА АГРОЭКОЛОГИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ ПРИЛЕГАЮЩИХ ПОЧВ

Руководитель И.Н. Барановский

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии и земледелия

Калининская атомная станция (КАЭС) расположена в Удомельском районе Тверской области. Традиционно данный район считался сельскохозяйственным. Достаточно сказать, что в нем практически первой в области появилась сельскохозяйственная коммуна (1928 г.), которую в тот период возглавил 18 летний юноша Евгений Петров, впоследствии успешно руководивший данным хозяйством свыше 50 лет.

Построенная в пределах района КАЭС считается безопасной, поскольку при ее возведении использованы новейшие технические разработки. Для выявления влияния КАЭС на расположенные вокруг нее земли, постоянно проводится мониторинг их загрязнения. Определяется содержание в почве тяжелых металлов и радионуклидов. Нами проведены исследования по содержанию тяжелых металлов в почвах, расположенных в 30-и километровой зоне вокруг КАЭС. Полученные показатели свидетельствуют, что лишь по наличию в почве хрома некоторое превышение отмечено в СПК «Заречье» и «Каскад», составившее соответственно 0,3 и 0,1 мг/кг почвы (табл.1). По всем остальным исследуемым элементам их превышения относительно ПДК не выявлено.

Таблица 1. Содержание тяжелых металлов в почвах контрольных участков в пределах зоны наблюдения вокруг Калининской АЭС, 2012 г.

Место отбора	Содержание валовых форм ,мг/кг								
	свинец	кадмий	ртуть	медь	цинк	железо	марганец	никель	хром
Удомельский, С1Ж «Заречье» д.Марьино	4,50	0,10	0.025	4,00 ^	21.70	6829,0	393,0	8,30	6,30
Удомельский, СГ1К «Венецианово» д. Шишелово	4,83	0,15	0.010	5,80	23.20	4979.0	200,0	9.70	4.50
Удомельский, СГПС «Каскад», д. Едутино	5,81	0.20	0.025	6,20	36.00	6320,0	290.5	13,70	6,10
Вышневолоцкий. СПК «Мир» д.Лукино	4.77	0.10	0.010	4,40	40.70	6125.0	157,8	7.30	3,90
Удомельский, СПК «Заря». д.Зарьково	5.36	0,10	0.010	1 5,70	24,30	8002.0	190.0	9.70	4,80
Удомельский, ООСТО «Мичурина» д. Мшпнево	3,40	0,08	0.010	5.10	15.20	5900,0	153,4	7,60	5,30
Удомельский, СПК «Никольское». д.Сосновицы	4.48	0.10	0.010	5.20 /	26.80	8038.0	193,0	9,506	5,00
ПДК в почве	32	0,5	2,1	33	55	-	400	20	6

ЗАЩИТНОЕ ДЕЙСТВИЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЛОЕВ
ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

Руководитель Л.И. Ворончихина

Тверской государственный университет

Кафедра органической химии

Согласно современным представлениям действие поверхностно-активными веществ (ПАВ) как гидрофобизаторов, антистатиков, ингибиторов коррозии обусловлено их адсорбцией на твердой поверхности, т.е. заменой полярной поверхности на неполярную, обладающую малым силовым полем и слабовзаимодействующую. ПАВ обладают уникальной способностью образовывать на поверхности упорядоченные структуры, моно- или бимолекулярные, которые соизмеримы с размерами атомов и молекул. По-существу, адсорбированные ПАВ представляют собой наноструктурированные слои, и эффективность действия ПАВ во многом будет определяться прочностью связи ПАВ с поверхностью подложки.

В работе исследовано формирование защитного наноструктурированного слоя катионных ПАВ на Ст.3 при их адсорбции из водных растворов ($C=10^{-3}$ моль/л, время установления адсорбционного равновесия составляет 1,5 часа при комнатной температуре). Молекулы ПАВ различаются природой гидрофильного центра (при одинаковой длине гидрофобного радикала): цетилпиридиний бромид, цетилтриметиламмоний бромид.

Поверхность образцов исследована методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС). Величины энергии связи N1s электронов были сопоставлены с данными краевых углов смачивания, характеризующих гидрофобность защитного слоя и со степенью защиты Z (%) Ст.3.в растворах HCl.

Специфическое взаимодействие полярной группы (катиона ПАВ) с поверхностью металла зависит от природы радикалов, связанных с атомом азота (их донорностью или акцепторностью), со стерической доступностью, что в свою очередь определяет энергию взаимодействия с поверхностью, прочность закрепления молекул на поверхности, и их защитное действие.

Установлено, что в случае солей пиридиния энергия взаимодействия (401 эВ) превышает таковую для аммониевых солей.

ВЛИЯНИЕ МАТРИЦ НА ФОТОХРОМНЫЙ ЭФФЕКТ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИЙ

Руководитель И.И. Осовская

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

Исследуется возможность, и обсуждаются перспективы усиления фотохромного эффекта для создания композиций с улучшенными фотохромными характеристиками: фотостабильности, высокой светочувствительности, расширения рабочего диапазона длин волн и интенсивности потемнения. Целью данного исследования является сравнительный анализ влияния различных матриц (полиметилметакрилата (ПММА), полистирола (ПС) и поливинилацетата (ПВА)) на фотохромные характеристики. В качестве пигмента использован нафтопиран желтый. Важную роль при составлении фотохромной композиции имеет растворитель, основными требованиями к которому являются его хорошая совместимость с матрицей и пигментом и время растворения. Оптимизацию выбора растворителей для данных полимеров проводили по методу Хансена. Существует математическая связь параметров растворимости Хансена и Гильдебранда, из которой можно рассчитать длину «радиуса - вектора» $HSP^2 = dD^2 + dP^2 + dH^2$. Из этого уравнения находили параметр растворимости Хансена (HSP). Выявлено влияние растворителей на фотохромные свойства полученных образцов. Плёнки исследовали на кинетику потемнения и релаксации. Результаты эксперимента показали наибольший эффект потемнения у плёнки с ПВА показатель потемнения составляет 59 %, для ПС – 57 %, для ПММА – 42 %. Установлено оптимальное содержание пигмента в полимерной композиции. Перспективы дальнейших исследований в раскрытии механизма взаимодействия компонентов и в замене дорогостоящего импортного нафтопирана отечественным пигментом.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Коновалова А.А., Крежевских О.С., Лейман В.И., Осовская И.И. // Ж. Химические волокна. СПб, 2015, № 4. С.53-57.
2. Céu M. Sousa, Jerome Berthet, Stephanie Delbaere, André Polónia, and Paulo J. Coelho//J. Org. Chem., 2015, 80 (24), pp 12177–12181.
3. Smirnova A.V., Osovskaya I.I., Leyman V.I.//MODERN PROBLEMS OF POLYMER SCIENCE. Saint-Petersburg, 2016. 152 p.
4. Khamitova G.Y., Osovskaya I.I., Leyman V.I.//MODERN PROBLEMS OF POLYMER SCIENCE. Saint-Petersburg, 2016. 152 p.

А.Н. Хренков

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОДУКТОВ БАКТЕРИАЛЬНОЙ ДЕСТРУКЦИИ
САЛИЦИЛАТА НАТРИЯ МЕТОДОМ ТОНКОСЛОЙНОЙ
ХРОМАТОГРАФИИРуководители Е.В. Вихарева, И.И. Мишенина
Пермская государственная фармацевтическая академия
Кафедра аналитической химии

Цель исследований – идентификация продуктов бактериальной деструкции салицилата натрия в культуральных жидкостях родококков методом тонкослойной хроматографии. Эксперименты по биодеструкции салицилата натрия (0,2%) проводили в условиях периодического культивирования родококков в минеральной среде RS в колбах Эрленмейера вместимостью 250 мл (160 об/мин) при температуре 28° С и рН=6,8. В работе использовали штамм *Rhodococcus opacus* ИЭГМ 261 из Региональной профилированной коллекции алканотрофных микроорганизмов. Продолжительность экспериментов составляла 25 сут. Образцы культуральных жидкостей для анализа центрифугировали при 10000 об/мин в течение 10 мин. При разработке методики идентификации продуктов биодеструкции салицилата натрия методом ТСХ апробировали шесть хроматографических систем [1]. Хроматографирование проводили на пластинах «Сорбфил» ПТСХ-П-В-УФ; объем анализируемых проб и свидетелей составлял 10 мкл. В качестве последних использовали этанольные растворы салицилата натрия и предполагаемых продуктов его разложения в концентрации 10 мг/мл. Детекцию исследуемых веществ осуществляли облучением УФ светом при $\lambda=254$ нм и обработкой 30% раствором хлорида железа (III). По нашим данным, удовлетворительное разделение веществ происходит в системе хлороформ – этилацетат – уксусная кислота (50:50:1). В культуральной жидкости родококков обнаружены пирокатехин ($R_f=0,81$), муконовая кислота ($R_f=0,93$) и два неидентифицированных вещества с $R_f=0,57$ и $R_f=0,71$. Гидрохинон и салицилат натрия в культуральной жидкости не обнаружены. Присутствие муконовой кислоты свидетельствует о раскрытии ароматического кольца салицилата натрия [2]. Таким образом, штамм *R. opacus* ИЭГМ 261 является эффективным биодеструктором данного вещества.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Верниковская Н.А., Темердашев З.А. // Аналитика и контроль. 2012. Т.16, № 2. С. 188.
2. Warhyst A.M., Fewson C.A. // Critical Reviews in Biotechnology. 1994. V.14, № 1. P. 29.

ПРИМЕНЕНИЕ Au-СОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРОВ В РЕАКЦИИ СЕЛЕКТИВНОГО ГИДРИРОВАНИЯ АЛКИНОЛОВ

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

Реакция селективного гидрирования ацетиленовых спиртов является одним из наиболее изученных и широко распространенных каталитических процессов. Так, гидрирование тройной связи 2-метил-3-бутин-2-ола (МБИ) до соответствующего спирта с двойной связью 2-метил-3-бутен-2-ола – одна из ключевых стадий получения синтетических душистых веществ (например, линалоола), а также изофитола и жирорастворимых витаминов [1].

Наибольшее распространение в реакциях гидрирования тройной $-C\equiv C-$ связи алкинолов получили гетерогенные палладиевые катализаторы. Однако, каталитические системы на основе Pt, Cu, Ni также проявляют активность в реакциях данного типа [2]. Кроме того, в качестве модификаторов часто используются такие металлы, как Co, Zn и Au, которые способны образовывать с палладием сплавы и оказывать значительное влияние на его каталитические свойства [3]. Большой интерес вызывают биметаллические катализаторы селективного гидрирования на основе золота [4, 5].

В рамках данной работы, были исследованы каталитические свойства моно- (Au, Pd) и биметаллических (Pd-Au) катализаторов на основе сверхсшитого полистирола марки MN100 в реакции каталитического гидрирования МБИ.

В результате проведенных исследований было выявлено, что Au-содержащий катализатор (предварительно восстановленный в токе водорода) проявляет высокую селективность (96%), в отличие от монометаллического палладиевого катализатора, для которого селективность составила 93%. Проблему низкой селективности Pd-содержащего катализатора можно решить, используя биметаллические каталитические системы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bonrath W. [et al // Catal. Today. 2007. Vol.121. P.45.
2. Kennedy D.R [et al.] // Appl. Catal. A-Gen. 2004. Vol. 259. P.109.
3. Zhang Y. [et al.] // Appl. Catal. A-Gen. 2014. Vol.469. P.419.
4. Nikolaev S.A. // Russ. Chem. Rev. 2009. Vol.78. P.231.
5. Kittisakmontree P. // J. Catal. 2013. Vol.297. P.155.

ХРОМАТОГРАФИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ КИСЛОТ ДЛЯ УСТАНОВЛЕНИЯ НАТУРАЛЬНОСТИ СОКОВ

Руководитель Феофанова М.А.

Тверской государственной технической университет

Кафедра неорганической и аналитической химии

В настоящее время на продуктовый рынок поступает разнообразная винопродукция всех новых неизвестных марок в эффектно оформленных бутылках, зачастую являющаяся суррогатом или выжимочным вином. Соки- это базовое сырье для виноделия и наиболее востребованный в современном мире продукт питания, уникальный источник необходимых человеку биологически активных веществ в наиболее приемлимом для усвоения виде. Внушительные экономические показатели сокового производства и еще более внушительные показатели винодельческой промышленности обуславливают появление большого количества контрафактной (фальсифицированной) продукции. [1]

Целью данной работы является выявление кислот в соках для определения их натуральности. Благодаря простоте и доступности метод тонкослойной хроматографии остается одним из самых популярных экспресс- методов анализа в органической химии. Преимущества метода перед другими- это большая скорость анализа, более высокое качество разделения, и возможность выбора одной из неподвижных фаз, обладающей наиболее подходящими свойствами, поэтому остановились именно на этом методе. [2]

Для анализа были выбраны янтарная, гликолевая, щавелевая, винная. Известно, что янтарная, щавелевая, винная и гликолевая кислоты содержатся в зеленом винограде. [3] Использовали свежесжатые соки. Были подобраны оптимальные условия для проведения эксперимента.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Аникина Н.С., Гержикова В.Г., Погорелов Д.Ю., Жилякова Т.А. // Напитки. Технологии и инновации- науч.-метод.журн.-2015- Режим доступа: <http://techdrinks.info/ru>. -(Дата обращения: 15.10.16)
2. Березкин В.Г., Бочков А.С. // Количественная тонкослойная хроматография - М.:Наука, 1980 – 183 с.
3. Захарова А.М. Карцова Л.А., Гринштейн. И.Л. // Аналитика и контроль –Санкт – Петербург: ООО «Анолит», Т.17, №2, 2013-С.204.

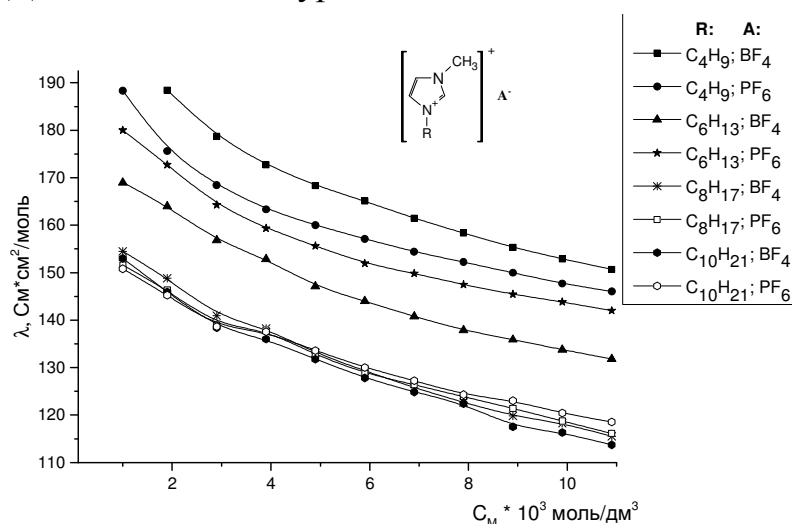
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ ПРОИЗВОДНЫХ 1-МЕТИЛ-3-АЛКИЛИМИДАЗОЛИЯ С РАЗЛИЧНЫМИ НЕОРГАНИЧЕСКИМИ АНИОНАМИ

Руководитель О.Е. Журавлев

Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

Ионные жидкости (ИЖ) – это класс низкотемпературных расплавов солей, для которых характерны низкие температуры плавления (как правило $<100^{\circ}\text{C}$). В настоящее время ионные жидкости находят широкое применение в качестве экстрагентов, растворителей, в синтезе электропроводящих полимеров и др.

В настоящей работе в качестве объектов исследования были выбраны ИЖ с катионом 1-метил-3-алкилимидазолия и различными неорганическими анионами (Br^- , BF_4^- , PF_6^-). Длина алкильного заместителя варьировалась от C_4 до C_{12} . Для изучения поведения ИЖ в растворах нами проведено кондуктометрическое исследование растворов ИЖ в ацетонитриле. На основе кондуктометрических измерений, были построены зависимости эквивалентной электропроводности (ЭП) от концентрации. Были рассчитаны константы ионной ассоциации (K_a), предельные молярные ЭП (λ_0), а также энергия Гиббса ассоциации (ΔG). Для расчета этих параметров использовалось второе приближение теории Дебая-Хюккеля и уравнение Ли-Уитона.



Установлено, что зависимость ЭП растворов ИЖ в ацетонитриле от концентрации схожа с таковой для водных растворов сильных электролитов. Наиболее ассоциированной ИЖ из изученных нами является тетрафторборат 1-метил-3-октилимидазолия.

А.А. Черняк

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ КОЛЛАПСА ГИДРОГЕЛЯ НА ОСНОВЕ
СОПОЛИМЕРА АКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ И АКРИЛАМИДА В
ВОДНЫХ РАСТВОРАХ СОЛЕЙ ПОЛИВАЛЕНТНЫХ МЕТАЛЛОВ

Руководитель В.Е. Ситникова

Университет ИТМО
Кафедра ИТТЭК

Полимерные гидрогели представляют собой набухающие в воде редкосшитые полимерные сети с химическими или физическими сшивками. В заряженных или полиэлектролитных гелях, в отличие от незаряженных, движущей силой набухания является электростатическое отталкивание между зарядами на цепях полимерной цепи. Набухание и коллапс полиэлектролитных гелей может быть вызван с помощью таких факторов как изменение рН, ионной силы раствора, температуры, излучения и т.п.

Широко изучены рН-чувствительные гидрогели и их применение, когда влагопоглощающие свойства гидрогеля, имеющего кислотные или основные функциональные группы, зависят от рН среды. Менее изучено влияние концентрации соли или ионной силы раствора на набухание и коллапс полиэлектролитных гидрогелей, в частности, акрилатных, хотя этот вопрос является не менее востребованным в свете расширяющихся областей применения этих материалов.

Полиэлектролитный гидрогель был синтезирован методом радикальной полимеризации в водном растворе акрилата натрия и акриламида. Степень нейтрализации варьировалась от 0,5 до 1. N,N-метиленисакриламид был использован для увеличения плотности сшивки гидрогеля.

В ходе работы были исследованы явления набухания и коллапса гидрогелей на основе сополимера акриловой кислоты и акриламида с различной степенью нейтрализации акриловой кислоты в водных растворах солей поливалентных металлов. Природа ионов исследуемых электролитов незначительно влияет на свойства набухания и десорбции полиэлектролитных композитов. Для описания кинетических зависимостей процессов была использована кинетическая модель Пелега. Проведенные исследования говорят о перспективности использования гидрогелей на основе сополимера акриловой кислоты и акриламида в качестве сенсорных материалов для определения ионов поливалентных металлов в водных растворах.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАЗМЕРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ТЕМПЕРАТУР ПЛАВЛЕНИЯ И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НАНОЧАСТИЦ СВИНЦА

Руководитель В.М. Самсонов

Тверской государственный университет

Кафедра общей физики

Размерные зависимости температур фазовых переходов представляют интерес как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. Наночастицы свинца представляют особый интерес в связи с тем, что для них имеются некоторые экспериментальные данные [1], тогда как для частиц большинства других металлов такие экспериментальные данные отсутствуют. В данной работе размерные зависимости температуры плавления T_m и температуры кристаллизации T_c изучались с использованием компьютерного молекулярно-динамического (МД) эксперимента и потенциала сильной связи [2]. Полученные результаты представлены на рис. 1 в виде зависимостей T_m и T_c от $N^{-1/3}$, где N число атомов, содержащихся в нанокластере. Как видно из рисунка, наши МД результаты удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными [1], хотя линейные корреляции 1 и 3 существенно отличаются наклоном.

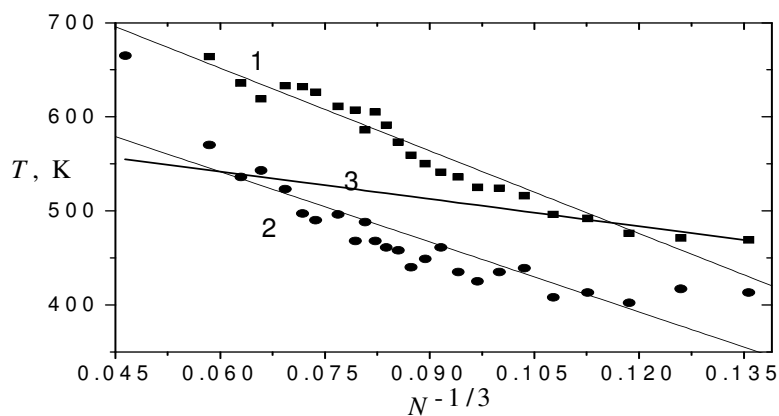


Рис. 1. Сравнение размерных зависимостей температур плавления T_m (прямая 1) и кристаллизации T_c (прямая 2), полученных в наших МД экспериментах с экспериментальными данными [1] (прямая 3) для температуры плавления.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Peters K.F. et al. // Phys. Rev. B. 1998. V. 57, №21. P.13430.
2. Cleri F., Rosato. V. // Phys. Rev. B. 1993. V. 48, №1. P.22.

ВЛИЯНИЕ УДОБРЕНИЙ НА ОСНОВЕ КУРИНОГО ПОМЕТА И ГЕРБИЦИДОВ НА ЧИСЛЕННОСТЬ И МАССУ ДОЖДЕВЫХ ЧЕРВЕЙ

Руководитель А.А. Акимов

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии и земледелия

Биологическая активность почвы является одним из факторов биологических свойств почвы, обуславливающая ее плодородие и зависящая от состава и количества почвенных организмов. Понятие биологической активности почвы очень широкое, оно отражает целый комплекс биологических процессов, протекающих в почве. В данной работе биологическая активность почвы в зависимости от изучаемых факторов определялась по количеству и массе дождевых червей. Целью данной работы являлось изучение биологической активности почвы в зависимости от применения удобрений на основе куриного помета и баковой смеси гербицидов.

Для достижения этой цели был заложен и проведен двухфакторный полевой опыт по следующей схеме: Фактор А (гербициды в посевах ячменя): 1 – без гербицидов; 2 – гранстар (10 г/га) + эстет (400 мл/га) + пума супер 75 (800 мл/га); Фактор В (удобрения на основе куриного помета): 1 – контроль (без удобрений); 2 – пометно-опилочный компост, 10 т/га; 3 – биокомпост на основе куриного помета, 10 т/га; 4 – верми-удобрение «Биостронг», 10 т/га.

В результате проведенных в 2014-2016 гг. исследований выявлено, что применение баковой смеси гербицидов гранстар+эстет приводит в начале вегетации ячменя к некоторому снижению как числа, так и массы дождевых червей. Так, в среднем за 3 года исследований, численность дождевых червей снизилась с 19,9 до 18,7 шт./м², а масса с 15,18 до 13,61 г/м². К концу вегетации популяция данного вида возросла с 15,8 до 16,2 шт./м², а по массе с 12,52 до 14,31 г/м² в связи с быстрым разложением гербицидов (в течение 3-4-х недель) и накоплением большего количества растительных остатков на вариантах с большей урожайностью ячменя. Определение влияния удобрений на основе куриного помета на численность и массу дождевых червей показало, что большее их количество и масса независимо от гербицидов были отмечены при применении пометно-опилочного компоста особенно в начале вегетации (30,0-25,3 шт./м² и 23,75-21,17 г/м²). В среднем за вегетацию, как количество, так и масса дождевых червей преобладала на вариантах с применением пометно-опилочного компоста, по вариантам применения биокомпоста и верми-удобрения значительных различий не выявлено. Данная закономерность прослеживается и в динамике урожайности ячменя, самая высокая она получена при применении пометно-опилочного компоста (26,0 и 34,7 ц/га), на вариантах с биокомпостом и верми-удобрением она имеет близкие значения вне зависимости от применения гербицидов (21,9-23,1 и 28,1-29,4 ц/га).

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ БОРЬБЫ С БОРЩЕВИКОМ
СОСНОВСКОГО

Руководитель Т.И. Смирнова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии и земледелия

Неконтролируемое распространение борщевика Сосновского, внедрённого более полувека назад в сельское хозяйство стран центральной и восточной Европы в качестве коровой культуры, поставило многие области Северо-Запада нашей страны на грань экологической катастрофы. Одичавший борщевик хорошо адаптировался в Нечерноземье и быстро занимает всё новые участки необрабатываемой земли. Эффективных химических методов борьбы с этим растением, только в 2015 году внесённым в Отраслевой каталог сорных растений, пока не существует. Естественных вредителей и болезней у борщевика в нашей местности нет, поскольку в его состав кроме эфирного масла и фуранокумаринов входят в значительном количестве и алкалоиды, выполняющие в растениях, преимущественно, защитные функции. Количественный и качественный состав алкалоидов борщевика Сосновского мало исследован. При этом одним из вариантов борьбы с данным сорным растением может быть поиск реагента, образующего с алкалоидами соединение, токсичное не только для внешних врагов, но и для самого борщевика.

С этой целью в качестве первого этапа исследования были изучены количественный состав алкалоидов борщевика Сосновского и его динамика в течение вегетационного периода 2016 года. Обнаружено, что больше всего алкалоидов накапливается в корне растения. С использованием метода колоночной хроматографии с оксидом алюминия в качестве адсорбента из экстракта корня борщевика были выделены две отдельные фракции алкалоидов, по-видимому, представляющие собой изомеры одного и того же вещества, поскольку после очистки перекристаллизацией из гексана содержимого обеих фракций температура плавления бесцветных пластинчатых кристаллов правильной шестиугольной формы оказалась одинаковой и равной 123,4⁰С. Было также выявлено, что количественное содержание алкалоидов в разных частях растения практически не зависит от условий произрастания, но изменяется в течение периода вегетации. При определении количественного содержания алкалоидов в корне борщевика были получены следующие данные: май – 0,078 %; июнь – 0,084 %; июль – 0,084 %; август – 0,120 %; сентябрь – 0,120 % (в расчёте на сухое вещество). Следующим этапом исследования планируется изучение строения и химических свойств выделенных соединений.

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Аверкин Д.В.	4
Адамян А.Н.	5
Аитова А.Н.	6
Айдинян Н.В., Селиверстов А.В., Олейник Е.М., Таргоний А.А.	7
Акимова К.Е.	8
Акулов Д.В.	9
Андрианова Я.В.	10
Антонова В.С.	11
Антонова В.С.	12
Арефьев Д.В., Попова В.В.	13
Астахова А.С.	14
Астахов И.А.	15
Бабуркин А.Н.	16
Бабуркин П.О.	17
Белкина К.Д., Егошина Г.Д.	18
Белогрудов С.И., Бугрова Е.А.	19
Белякова Е.Д.	20
Блинова А.В.	21
Богомазова И.И.	22
Болтова Ю.А.	23
Бондикова Д.А.	24
Бондарь А.А., Засухин О.В.	25
Брындина Е.А.	26
Булюкина О.А.	27
Бушинская А.К., Булгакова Я.Н.	28
Быкова Л.Н., Петров А.Н.	29
Валькова О.В.	30
Вардаев И.А.	31
Васильева В.С.	32
Варламова А.А.	33
Васильев С.А.	34
Вихрова Д.А.	35
Воробьев И.И.	36
Воронцов М.С., Селиверстов А.В., Олейник Е.М., Иванова П.В., Русин И.В.	37
Востров Н.В., Рисунков А.В.	38
Гелашвили Г.М.	39
Герасимова Н.Ю.	40
Глинкова А.И., Маякова М.Н.	41
Голубева Е.Н.	42
Голубихина А.С.	43
Громова А.Д., Лихуша П.С.	44
Гурцева И.С.	45
Долгасова О.В., Баранова Е.М., Беличенко Н.В.	46

Дрозд А.В.	47
Дрынина А.П.	48
Жихарев В.С., Конкина М.В., Семенеев А.С.	49
Жукова Е.А., Филяровская М.Н.	50
Зайковская А.О., Абусуек Д.А.	51
Закамский Р.А.	52
Захаров П.А.	53
Зинин С.В.	54
Иванов Н.Н.	55
Казьмин А.Е.	56
Калабин Н.А.	57
Камшилина А.И., Чагина А.В.	58
Картошкин А.Ю.	59
Катаев Е.Д.	60
Киселева М.Г.	61
Колокольцова Н.А.	62
Кондратьева Д.А.	63
Котомкин А.В.	64
Крикухина Е.В., Хорькова Н.С.	65
Кротченко М.В.	66
Крылов П.Н.	67
Кужлев М.В.	68
Кутузов Д.С., Айдинян Н.В., Иванова П.В., Брызгина М.П.	69
Кучеренко М.А.	70
Лагусева В.С., Жукова Е.А., Филяровская М.Н.	71
Лебедев Г.А., Дибердиева А.Т., Беличенко Н.А.	72
Лебедева Е.Ю.	73
Лисов Н.С.	74
Луганская Н.В.	75
Малышев М.Д.	76
Маркова М.Е.	77
Маслобойщиков С.С.	78
Маякова М.Н.	79
Мельничук М.Д., Васильев А.С.	80
Мухина М.А.	81
Немыгина Н.А.	82
Нилов Д.Ю., Сенекеримян А.К.	83
Нисифоров В.	84
Новиков С.В.	85
Орлов В.В.	86
Павлов М.Н.	87
Павлов М.Н., Захарова Е.В., Шкорева В.В.	88
Павлов М.Н., Мошкина В.А., Белова К.А.	89
Паремская А.С.	90
Пельтихина О.В.	91

Перевозова Т.В.	92
Петрова А.И.	93
Подолян Е.А.	94
Пономарев Е.В.	95
Радин А.С.	96
Рыбина С.С., Козинов С.Ю., Айдинян Н.В., Иванова П.В., Ерофеева В.О.	97
Савельев М.О.	98
Сальникова К.Е., Исаев В.С.	99
Семёнова Е.В., Немыгина Н.А.	100
Сеньковский А.Д., Смирнов А.С.	101
Сергеев А.А.	102
Сергеева А.И.	103
Сильченко В.А., Савченко Е.А.	104
Ситникова В.Е., Королева О.Е.	105
Скобин М.И., Крюков Т.В.	106
Скрыпникова И.А.	107
Смирнова В.И.	108
Соловьева Н.А.	109
Соколов А.В.	110
Старовойтов А.В., Горцевич П.А.	111
Сушнева О.П.	112
Титова Е.Р.	113
Трушкина А.А. , Агапова Д.С.	114
Тянина А.А.	115
Тянтов А.В.	116
Филина С.Е.	117
Фимушкина Л.В.	118
Фуфкова Ю.М.	119
Хайдукова Ю.А.	120
Хамитова Г.Ю., Смирнова А.В.	121
Хренков А.Н.	122
Худякова Т.Е.	123
Цветкова Е.Е., Шломак И.В.	124
Цынбалов С.В.	125
Чирков А.В.	126
Черняк А.А.	127
Шоля П.С.	128
Шуплецов В.Д.	129