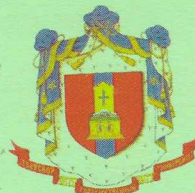


ФОНД СОДЕЙСТВИЯ РАЗВИТИЮ
малых форм предприятий в научно-технической сфере



XXIII КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ
с международным участием

**Всероссийская научно-техническая
конференция молодых учёных**

«Физика, химия и новые технологии»

ТВЕРЬ 2016

УДК 54(082)
ББК Г.я431
Р32

Ответственные за выпуск:

доктор химических наук П.М. Пахомов
кандидат химических наук С.Д. Хижняк
аспирант Я.В. Андрианова

Р32 XXIII Каргинские чтения: тезисы докладов. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2016. – 140 с.

Областная, а затем Всероссийская научно-техническая конференция молодых учёных в рамках Каргинских чтений и на базе Тверского государственного университета 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 №16-03-20035г).

УДК 54(082)
ББК Г.я431

© Тверской государственный университет, 2016
© Авторы статей, 2016

А.А. Аксенов, Н.А. Соловьева

ВЛИЯНИЕ ПРОМЫШЛЕННЫХ ЗАГРЯЗНЕНИЙ НА ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ КРАПИВЫ ДВУДОМНОЙ (*URTICA DIOICA*)Руководители: П.М. Пахомов, С.Д. Хижняк
Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

В настоящее время существенно увеличился спрос на препараты растительного происхождения, которые содержат биологически активные вещества, такие как флавоноиды, эфирные масла и др. Растения, в том числе лекарственные, способны накапливать из окружающей среды вещества различной природы, поэтому важным этапом производства лекарственных препаратов является анализ растительного сырья. Различные промышленные загрязнители, попадая в воздух, поглощаются растениями, как непосредственно через ассимиляционный аппарат (листья), так и путём косвенного воздействия через почву. В связи с этим анализ изменений химического состава растений (лекарственных или биоиндикаторных), происходящих под воздействием антропогенного фактора, является актуальной задачей для оценки качества лекарственного сырья или уровня экологической обстановки. Цель работы – изучение влияния промышленных загрязнений на химический состав крапивы двудомной (*Urtica dioica*) методами Фурье-ИК и УФ спектроскопии. В качестве объектов исследования были выбраны образцы крапивы двудомной (листья), собранные в г. Санаин республики Армения, пос. Шаховская Московской области, а также в г. Твери в местах с различной антропогенной нагрузкой.

Анализ спектральных данных показал, что химический состав крапивы двудомной чувствителен к влиянию промышленных загрязнений. ИК спектры образцов из разных мест сбора отличаются по интенсивности и положению максимумов полос поглощения в области валентных и деформационных колебаний. В УФ спектрах водных и спиртовых экстрактов исследуемых образцов, отражающих содержание фенольных соединений, также наблюдаются существенные различия.

Таким образом, с помощью спектральных методов установлено, что химический состав крапивы двудомной изменяется под воздействием промышленных загрязнений. Данный факт необходимо учитывать при сборе лекарственного сырья, с одной стороны, и при оценке степени загрязнения окружающей среды с другой.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности (проект №4.1325.2014/К), государственного задания "Обеспечение проведения научных исследований" на базе ЦКП Тверского государственного университета

А.И. Калинин, Н.А. Соловьева

АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ПРОМЫШЛЕННЫХ ЗАГРЯЗНЕНИЙ НА ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ ПАСТУШЬЕЙ СУМКИ (CAPSELLA BURSA-PASTORIS)

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

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

В последнее время увеличение количества промышленных предприятий приводит к существенному загрязнению почвы, воздуха и воды. Продукты этих предприятий, попадая в атмосферу, поглощаются многими растениями, в том числе лекарственными. Накопление растениями веществ различного строения происходит как путем прямого действия загрязнителей на ассимиляционный аппарат (листья), так и путем косвенного воздействия через почву. В связи с этим возникает необходимость анализа химического состава растений, используемых в качестве лекарственного сырья. Целью работы является исследование экологического состояния промышленных зон с помощью анализа влияния загрязнений на химический состав пастушьей сумки (*Capsella bursa-pastoris*) методами Фурье-ИК и УФ спектроскопии. Образцы для данной работы были собраны в местах с различной антропогенной нагрузкой (д. Александровка, Тв. область, в 5-ти километрах от городской свалки; МО, д. Шаховская, зона минимальных воздействий). В традиционной и народной медицине пастушья сумка используется как кровоостанавливающее средство. Для регистрации ИК спектров разных частей растения (стебли, корни, листья) была использована стандартная методика приготовления таблеток с бромидом калия. Электронные спектры поглощения спиртовых и водных экстрактов исследуемого растения регистрировали в УФ диапазоне длин волн 200–800 нм. В результате спектральных исследований удалось обнаружить изменения в химическом составе различных частей пастушьей сумки в зависимости от места сбора. Анализируя полученные данные, можно установить, что химический состав пастушьей сумки чувствителен к воздействию антропогенных факторов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности (проект №4.1325.2014/К) на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.

ОБРАЗОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ ИОНАМИ d-ЭЛЕМЕНТОВ

Руководитель В.Г. Алексеев
Тверской государственный университет
Кафедра аналитической химии

Изучение структуры комплексов
иона цефтазидима Ctzd^- с катионами
 Ni^{2+} . Модели комплексов создавали в
программе PLS2005, рекомендованной для
оптимизации проводили в
молекулярной механике с
PLS2005, рекомендованной для
ионов в растворах. Расчет был
разбавленного водного раствора.
оптимизация геометрии комплексов
программе MORAS 2012. Уже на этой
стадии в структуре моделей комплексов
 Ni^{2+} наблюдается координация атомов
групп, бета-лактамовой группы и атома
 Zn^{2+} и Cd^{2+} – атомов кислорода
лактамовой группы. Окончательная
структура находится в вакууме одиночной
структуры методом DFT с использованием
и набора базисных функций
авторами программы для расчета
с переходных металлов. Она не привела к
основанию данных компьютерного
моделирования, что Ni(II) и Cu(II) координируют
ионы с замыканием хелатных циклов. В
исследованных системах координация с
ионами компьютерного моделирования
ранее экспериментальными данными.
и в системах Co^{2+} – Ctzd^- , Zn^{2+} – Ctzd^- и
и обнаружено, а в системах Ni^{2+} – Ctzd^-
и комплексов средней устойчивости.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ОПТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ АНАЛИЗА ИЗМЕНЕНИЙ В ХИМИЧЕСКОМ СОСТАВЕ ПОДОРОЖНИКА БОЛЬШОГО (*PLANTÁGO MÁJOR*), ВЫЗВАННЫХ ВЛИЯНИЕМ АНТРОПОГЕННОГО ФАКТОРА

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

Изучение и контроль состояния окружающей среды включают
исследование различных природных объектов, систем и определения в них
загрязняющих химических веществ, нарушающих сложившееся
экологическое равновесие в природе. Растения отрицательно реагируют на
наличие в воздухе даже в малых дозах токсических веществ, т.е.
выполняют индикаторную функцию. Такие растения-биоиндикаторы
могут использоваться как для выявления отдельных загрязнителей
воздуха, так и для оценки качественного состояния природной среды.
Таким образом, актуальной задачей является исследование изменений
химического состава растений, вызванных влиянием антропогенного
фактора, в рамках экологического мониторинга. Целью работы является
сравнительный анализ влияния антропогенного фактора на химический
состав подорожника большого (*Plantago májor*), собранного в 2013 и 2015
годах, методами оптической спектроскопии (Фурье-ИК и УФ
спектроскопического анализа). Сбор растений осуществлялся в
идентичных условиях (месяц сбора, погодные условия) в одних и тех же
промышленных районах города Твери. В результате сравнительного
анализа подорожника большого обнаружены различия в ИК спектрах
образцов, а также в электронных спектрах поглощения спиртовых
экстрактов исследуемого растения в УФ области в зависимости от года
сбора. В то же время отмечена тенденция сохранения уровня
чувствительности подорожника к определенным узлам экологической
напряженности, проявляющаяся как в ИК, так и в УФ диапазонах длин
волн. В связи с этим можно предположить, что в период 2013-2015 гг.
изменилась рабочая мощность некоторых промышленных предприятий, и,
следовательно, количество выбросов загрязняющих веществ в атмосферу.

Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства образования
и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере
научной деятельности. Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки
Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной
деятельности (проект №4.1325.2014/К) на оборудовании Центра коллективного
пользования Тверского государственного университета.