



ФОНД СОДЕЙСТВИЯ
ИННОВАЦИЯМ



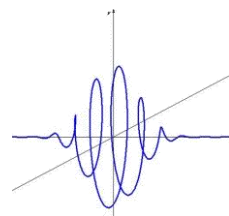
XXV КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ

Всероссийская научно-техническая
конференция молодых учёных

«Физика, химия и новые технологии»,
посвященная Международному году
Периодической таблицы химических
элементов

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ

Тверь, 2019



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

XXV КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ

Всероссийская научно-техническая конференция

молодых учёных

«Физика, химия и новые технологии»,

посвященная Международному году

Периодической таблицы химических элементов

Тезисы докладов

28 марта 2019 года

г. Тверь

ТВЕРЬ 2019

УДК 54(082)

ББК Г.я431

К21

Ответственные за выпуск:

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

К21 XXV Каргинские чтения: тезисы докладов. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2019. – 131 с.

ISBN 978-5-7609-1434-7

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.

УДК 54(082)

ББК Г.я431

ISBN 978-5-7609-1434-7

© Тверской государственный
университет, 2019

© Авторы статей, 2019

Оглавление

Устная секция конференции

Аверкин Д.В. РАЗРАБОТКА ПЕРСПЕКТИВНЫХ КАЛИБРОВОЧНЫХ СТАНДАРТОВ ДЛЯ МЕТОДА ИЗМЕРЕНИЯ ДЗЕТА-ПОТЕНЦИАЛА ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ.....	11
Агапова Д.С. СРАВНЕНИЕ ГРУППОВЫХ ХАРАКТЕРИСТИК РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ 2,2-ДИМЕТИЛГЕПТАНА И ТРИМЕТИЛПЕНТИЛСУЛЬФИДА.....	12
Адамян А.Н. ПРОЦЕССЫ САМООРГАНИЗАЦИИ L-ЦИСТЕИНА И АЦЕТАТА СЕРЕБРА В РАСТВОРЕ D ₂ O	13
Бондарь А.А. ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЧНОСТНЫХ СВОЙСТВ СТЕКЛОПЛАСТИКОВ.....	14
Брянцев Д.В. ТЕОРЕТИКО-ГРАФОВАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ АДДИТИВНЫХ СХЕМ РАСЧЁТА ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ АЛЬДЕГИДОВ	15
Дунаева Г.Г., Ракунов П.А. АНАЛИЗ КРИВЫХ НАМАГНИЧИВАНИЯ ФЕРРОМАГНЕТИКОВ ПО ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЕ ПОВЕРХНОСТИ ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ.....	16
Завьялова А.Г. ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНЫЕ НЕВАЛЕНТНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В АЗОБЕНЗОЛЕ... ..	17
Затика Н.Ю. РАССМОТРЕНИЕ АЛЬТЕРНАТИВНЫХ ВИДОВ ОБОГРЕВА ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ОБОРУДОВАНИЯ В ПРОИЗВОДСТВЕ ПОЛИЭТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТА	18
Коробейничева О.И. МИКРОСТРУКТУРА И МАГНИТНАЯ ДОМЕННАЯ СТРУКТУРА КВАЗИБИНАРНОГО СОЕДИНЕНИЯ Sm(Co,Ni,Fe) ₅	19
Курочкин Г.А. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ СЕРО- И КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИХ ТРЕХАТОМНЫХ ЦИКЛОВ	20
Лунёва К.А., Лунёв А.С., Клементьева О.Е., Брускин А.Б. ПЭТ-ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ОЧАГОВ ОПУХОЛЕВОГО АНГИОГЕНЕЗА С НОВЫМ РАДИОФАРМПРЕПАРАТОМ НА ОСНОВЕ ГАЛЛИЯ-68.....	21
Маркова А.И. ИЗУЧЕНИЕ МОРФОЛОГИИ ЭМУЛЬСИИ СПЕКТРАЛЬНЫМИ МЕТОДАМИ	22
Маркова М.Е. НОВЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ БЕНЗИНОВОГО РЯДА	23
Перевозова Т.В. ПРОЦЕССЫ САМООРГАНИЗАЦИИ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ НА ОСНОВЕ L-ЦИСТЕИНА, ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ И СОЛЕЙ СЕРЕБРА.....	24
Ракунов П.А., Дунаева Г.Г. ВЛИЯНИЕ БЫСТРОЙ ЗАКАЛКИ НА МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ СОЕДИНЕНИЯ HoCo ₂	25
Сальникова К.Е. РАЗРАБОТКА КАТАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ ДЛЯ ПРОЦЕССА ГИДРИРОВАНИЯ ФУРФУРОЛА	26
Сильченко В.А. УСОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ПЕРЕРАБОТКИ БОБОВЫХ В БЕЛКОВЫЕ СУБСТАНЦИИ И БИОТОПЛИВО	27
Синкевич А.И. МАГНИТНО-СИЛОВАЯ МИКРОСКОПИЯ ПОЛЕЙ РАССЕЙЯНИЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ Y ₂ (Fe _x Co _{1-x}) ₁₇	28

Собранский В.А. ИЗУЧЕНИЕ ОБЕСПЕЧЕННОСТИ СЕЛЬСКОХОЗЯЙСТВЕННЫХ КУЛЬТУР ЭЛЕМЕНТАМИ ПИТАНИЯ И ИХ ВЛИЯНИЕ НА РАЗВИТИЕ РАСТЕНИЙ	29
Соколов А.В. СПОСОБ ОЧИСТКИ ОТРАБОТАННОГО УГЛЕВОДОРОДНОГО РАСТВОРИТЕЛЯ В ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ ВОЛОКОН ИЗ СВЕРХВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛИЭТИЛЕНА МЕТОДОМ ГЕЛЬ - ФОРМОВАНИЯ.....	30
Тагиева А.Р. КОРРЕЛЯЦИИ «СТРУКТУРА-ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ» ПРОСТЫХ ЭФИРОВ. ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД	31
Ульянова М.А. СИНТЕЗ КАТИОННЫХ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ НА ОСНОВЕ 2-(ДИМЕТИЛАМИНО)ЭТАНОЛА И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ СВОЙСТВ.....	32
Цветкова О.И., Щеглова А.А. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗОМЕРНЫХ ФОРМ МОЛЕКУЛЫ N,N-ДИМЕТИЛБИГУАНИДА	33
Чиликина И.В. ПРОЦЕСС ПОЛИКОНДЕНСАЦИИ МОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ С АЗЕОТРОПНОЙ ОТГОНКОЙ ВОДЫ	34
Шишков Г.С. ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ ФЕРРИТ БАРИЯ –КЕРАМИКА ТИТАНАТА БАРИЯ И ФЕРРИТ БАРИЯ – КЕРАМИКА НИОБАТА НАТРИЯ-КАЛИЯ	35
Шухина К.А. ПРОЦЕССЫ САМОСБОРКИ В НИЗКОКОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ВОДНЫХ СИСТЕМАХ ГЛИЦИН- AgNO_3 -ПВС	36

Стендовая секция конференции

Али М., Иванова П.В, Рыбина С.С., Воронцов М.С., Петухов М.С. ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНЫХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ НА РАЗРЕШЕНИЕ АСТРОФИЗИЧЕСКИХ АКУСТООПТИЧЕСКИХ ФИЛЬТРОВ НА ОСНОВЕ ПАРАТЕЛЛУРИТА.....	38
Андрианова А.А. АНАЛИЗ СОДЕРЖАНИЯ МАГНИЯ В МОРСКОЙ КАПУСТЕ И ПИЩЕВОЙ ПРОДУКЦИИ НА ЕЕ ОСНОВЕ	39
Бахвалова Е.С. ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ РЕАКЦИИ СУЗУКИ НА ПОВЕДЕНИЕ ПАЛЛАДИЙ СОДЕРЖАЩЕГО ПОЛИМЕРНОГО КАТАЛИЗАТОРА	40
Бертова А.В., Гончар Д.Д. КАТАЛИЗАТОРЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИАЛКИЛАМИНОВ ДЛЯ РЕАКЦИИ СЕЛЕКТИВНОГО ГИДРИРОВАНИЯ ТРОЙНОЙ СВЯЗИ ДИМЕТИЛЭТИНИЛКАРБИНОЛА.....	41
Биберина Е.С., Новикова Л.А. ПОЛЯРИМЕТРИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ИЗОМЕРОВ КОМПЛЕКСОНОВ ПРОИЗВОДНЫХ ДИКАРБОНОВЫХ АМИНОКИСЛОТ	42
Варламова А.А. РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ СОЗДАНИЯ ИНДИКАТОРНОГО МАТЕРИАЛА ДЛЯ ЭКСПРЕСС-АНАЛИЗА НИТРАТ-ИОНОВ	43
Васин П.С. ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ КЕРРОВСКОГО КОНТРАСТА В ФЕРРИМАГНИТНЫХ СПЛАВАХ Gd-Co.....	44
Вахрушкина М.В., Туркина В.С. ИОНОСЕЛЕКТИВНЫЕ ЭЛЕКТРОДЫ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ НЕКОТОРЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ.....	45
Вахтерев Е.В. ТЕРМОИНДУЦИРОВАННЫЕ ПРОЦЕССЫ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ ХРОМСОДЕРЖАЩИХ КРИСТАЛЛОВ ТРИГЛИЦИНСУЛЬФАТА.....	46

Взорова О.Ю., Климентьев И.С. МИКРОЭМУЛЬСИИ ДЛЯ ОЧИСТКИ ОТ МАСЕЛ И ЗАГРЯЗНЕНИЙ ВОДНЫХ СРЕД.....	47
Ганичева А.А. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МОНОСЛОЯ ОЛИГОТИОФЕНА. ОПТИМИЗАЦИЯ ГЕОМЕТРИИ.....	48
Гончар Д.Д., Бертова А.В. ВЛИЯНИЕ ПОРИСТОСТИ СВЕРХСШИТОГО ПОЛИСТИРОЛА НА ПОВЕДЕНИЕ ПАЛЛАДИЙ СОДЕРЖАЩИХ ПОЛИМЕРНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ ГИДРИРОВАНИЯ АЛКИНОЛОВ.....	49
Громов И.Д., Цилик А.Д. ВЛИЯНИЕ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ НА СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ГЕРМАНИЯ.....	50
Гусева П.А., Шиманская Е.И. КОНВЕРСИЯ АНИЗОЛА В УГЛЕВОДОРОДЫ.....	51
Дзюба Е.И. ПОЛУЧЕНИЕ СМЕШАННЫХ ПАВ И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ СВОЙСТВ.....	52
Ерофеева В.О. ПИРОЭФФЕКТ КРИСТАЛЛОВ SBN ЛЕГИРОВАННЫХ КОБАЛЬТОМ.....	53
Жохов И.С. МЕХАНИЗМ ГАЗОЖИДКОСТНОГО ПОЛИАМИДИРОВАНИЯ ПИПЕРАЗИНСОДЕРЖАЩИХ ФИБРИДОВ.....	54
Жукова Е.А. ПРОЦЕССЫ САМООРГАНИЗАЦИИ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ СЕРИНА И СОЛЕЙ МЕТАЛЛОВ.....	55
Иванова П.В., Али М., Молчанов С.В., Рыбина С.С., Воронцов М.С., Гормин Н.С. ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ НА ПАРАМЕТРЫ АКУСТООПТИЧЕСКИХ УСТРОЙСТВ С ЭЛЕМЕНТАМИ ИЗ КРИСТАЛЛОВ ПАРАТЕЛЛУРИТА.....	56
Игнатенко А.О., Маркова М.Е. АБСОРБЦИЯ СИНТЕЗ-ГАЗА В ДОДЕКАНЕ.....	57
Кизилев Н.Н. СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК БРОМСОДЕРЖАЩИХ ПОЛИМЕРНЫХ АНТИПИРЕНОВ.....	58
Кожушко В.Е. ПРОВОДИМОСТЬ КЕРАМИКИ СИСТЕМЫ PFN-PFT.....	59
Королёв Р.В., Мурихин К.С., Соколов А.В. КОНТРОЛЬ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА РАСТВОРИТЕЛЯ ПРИ ПРОИЗВОДСТВЕ ВОЛОКОН СВМПЭ МЕТОДОМ ГЕЛЬ-ФОРМОВАНИЯ.....	60
Косолапов Н.А. МАГНИТНАЯ ДОМЕННАЯ СТРУКТУРА КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ И 3-D МЕТАЛЛОВ.....	61
Котомкин А.В. ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ПОЛИФТОРАЛКАНОВ.....	62
Кравченко П.А. СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ МЕТОДИКИ ФОТОМЕТРИЧЕСКОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ МЕДИ ПРИ ОБРАЗОВАНИИ СМЕШАННЫХ КОМПЛЕКСОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ 4(2-ПИРИДИЛАЗО)РЕЗОРЦИНА (ПАР).....	63
Крылова М.Е. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ В ТИОКЕТОНАХ.....	64
Кузнецова А.А., Щеглова А.А. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЖЕЛЕЗА В ПРИРОДНОЙ И ВОДОПРОВОДНОЙ ВОДЕ В ГОРОДЕ ТВЕРИ.....	65
Лагусева В.С. ОДНОСТАДИЙНОЕ ПОЛУЧЕНИЕ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ L-ЦИСТЕИНА, НИТРАТА СЕРЕБРА И БРОМИДА НАТРИЯ.....	66
Линтварева А.Г. КИНЕТИКА РАСТВОРЕНИЯ МЕДНО-ЦИНКОВОГО СПЛАВА В СЕРНОЙ КИСЛОТЕ.....	67
Лобзова В.А. ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ БЕЛКА В МОЛОКЕ.....	68

Малышев М.Д. АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СОЗРЕВАНИЯ ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНОГО РАСТВОРА	69
Мариничева К.А., Вайсбург Н.Я. ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОНОКРИСТАЛЛОВ ГЕРМАНИЯ.....	70
Михайлова О.О. КИНЕТИКА РАСТВОРЕНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО СЕРЕБРА В СИСТЕМЕ ТИОЦИАНАТ – ТИОСУЛЬФАТ – ОКИСЛИТЕЛЬ КОМПЛЕКС Fe(III)ЭДТА	71
Молчанов С.В., Вайсбург Н.Я. ОПРЕДЕЛЕНИЕ УДЕЛЬНОГО ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ ГЕРМАНИЯ ТЕПЛОВИЗИОННЫМ МЕТОДОМ	72
Монжаренко М.А., Симанова А.Ю. ЖИДКОФАЗНОЕ ГИДРИРОВАНИЕ ЖИРНЫХ КИСЛОТ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ЖИРНЫХ СПИРТОВ	73
Новоженин Д.Ю. СИНТЕЗ L-N-(КАРБОКСИМЕТИЛ)АСПАРАГИНОВОЙ КИСЛОТЫ	74
Паламаренко А.М., Цветкова О.И. СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ТВЕРДЫХ КОМПЛЕКСОВ ЦИРКОНИЯ(IV) С АНИОНАМИ С ЦЕФАЛОСПОРИНОВ	75
Т.Н. Петраханов ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ГИСТЕРЕЗИС В МЕДЬ - И НИКЕЛЬСОДЕРЖАЩИХ КРИСТАЛЛАХ ТРИГЛИЦИНСУЛЬФАТА	76
Петухова И.Д., Куприянова Е.Е., Маркова М.Е. ЖИДКОФАЗНЫЙ СИНТЕЗ ФИШЕРА-ТРОПША НА ЦЕОЛИТНЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ	77
Полунина О.А., Левицкая Ю.В. СИНТЕЗ И СВОЙСТВА СУЛЬФОСУКЦИНАТОВ АЛКАНОЛАМИДОВ ЖИРНЫХ КИСЛОТ	78
Пушкина В.А. ОСОБЕННОСТИ МЕХАНИЗМА ГАЗОЖИДКОСТНОГО ПОЛИАМИДИРОВАНИЯ	79
Радин А.С. ПРИМЕНЕНИЕ ГЕТЕРОПОЛИКИСЛОТ ТИПА ДОУСОНА ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ГАЗОВЫХ СЕНСОРОВ НА МОНООКСИД УГЛЕРОДА.....	80
Рахманин М.Ю. РАЗРАБОТКА МАЛОШУМЯЩЕГО УСИЛИТЕЛЯ РЧ ДЛЯ ЯМР РЕЛАКСОМЕТРА ...	81
Рудь Д.В., Гончарова А.А. КОНВЕРСИЯ БИОМАССЫ В БИОДИЗЕЛЬНОЕ ТОПЛИВО ВТОРОГО ПОКОЛЕНИЯ.....	82
Сквознова Л.А. ТЕХНОГЕННОЕ ЗАГРЯЗНЕНИЕ ПОЧВ В ВЕСЬЕГОНСКОМ, КРАСНОХОЛМСКОМ, БЕЖЕЦКОМ, РАМЕШКОВСКОМ И КАЛИНИНСКОМ РАЙОНАХ ТВЕРСКОЙ ОБЛАСТИ.....	83
Скобин М.И., Крюков Т.В. ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТРУКТУРЫ КОМПЛЕКСНОГО СОЕДИНЕНИЯ ВМС ГЕПАРИНА С ЕВРОПИЕМ.....	84
Смирнова Е.В. ПОЛУЧЕНИЕ СТИМУЛЯТОРОВ РОСТА СЕЛЬСКОХОЗЯЙСТВЕННЫХ РАСТЕНИЙ ИЗ ОТХОДОВ ЛЕСООБРАБАТЫВАЮЩЕЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ.....	85
Сойма Д.И. ОЦЕНКА ЗАГРЯЗНЕНИЯ ПОЧВ ТЯЖЕЛЫМИ МЕТАЛЛАМИ В ЛЕСНОМ, МАКСАТИХИНСКОМ, РАМЕШКОВСКОМ, КАЛИНИНСКОМ РАЙОНАХ ТВЕРСКОЙ ОБЛАСТИ	86
А.Е. Соловьева, Е.Б. Каштанкина ГИДРОГЕЛИ НА ОСНОВЕ ЦИСТЕИНА, НИТРАТА СЕРЕБРА И ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ.....	87
Стречень А.С., Вякина А.А., Сарычева К.К. МИКРОСТРУКТУРА И МАГНИТНАЯ ДОМЕННАЯ СТРУКТУРА ЧЕЛЯБИНСКОГО МЕТЕОРИТА.....	88

Филаровская Н.М.Н. ОДНОСТАДИЙНЫЙ СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ ГЕЛЕЙ ИЗ ВОДНОГО РАСТВОРА L-ЦИСТЕИНА С НИТРАТОМ СЕРЕБРА	89
Хисматулин А.Е. ПРОБЛЕМЫ ДОСТОВЕРНОСТИ В ИССЛЕДОВАНИЯХ ПРОЦЕССОВ НАМАГНИЧИВАНИЯ И ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ОБЪЕКТОВ В РАЗОМКНУТОЙ МАГНИТНОЙ ЦЕПИ	90
Цветкова О.И., Паламаренко А.М. КОМПЛЕКСНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ N,N-ДИМЕТИЛБИГУАНИДА	91
Чирик К.А., Шишова Р.В. ГИДРОГЕЛИ НА ОСНОВЕ ЦИСТЕИНА, НИТРАТА СЕРЕБРА, ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА И ПОЛИВИНИЛПИРРОЛИДОНА.....	92
Шарапова Л.А. ОЦЕНКА КАЧЕСТВА ВОДЫ ПРИРОДНЫХ ИСТОЧНИКОВ ВЕРХНЕВОЛЖЬЯ	93
Шишкова К.В. СИНТЕЗ АЗОТСОДЕРЖАЩЕГО ЛИГАНДА НА ОСНОВЕ 4-ГИДРОКСИ-3-МЕТОКСИБЕНЗАЛЬДЕГИДА.....	94
Шутов М.В. ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ОТКЛИК МОНОКРИСТАЛЛОВ 0.955PZN – 0.045PT	95
Яблокова Н.С., Семенова А.М. СВЕРХКРИТИЧЕСКОЕ ДЕОКСИГЕНИРОВАНИЕ ЖИРНЫХ КИСЛОТ.....	96

Заочная секция конференции

Антонова В.С. ВЛИЯНИЕ ГИДРОТЕРМИЧЕСКИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА УДЕЛЬНУЮ ПОВЕРХНОСТЬ ЦЕЛЛЮЛОЗНОГО ВОЛОКНА.....	98
Антонова И.П. КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ АСКОРБИНОВОЙ КИСЛОТЫ В ПРОДУКТАХ РАСТИТЕЛЬНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ МЕТОДОМ ЙОДОМЕТРИЧЕСКОГО ТИТРОВАНИЯ	99
Байголова М.А. ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ АММОНИЯ НА ИХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА.....	100
Бородина А.М., Васильева А.П. ВЛИЯНИЕ PH СРЕДЫ НА ВЯЗКОСТЬ И ПОВЕРХНОСТНУЮ АКТИВНОСТЬ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ФОРМ ГУАРОВОЙ КАМЕДИ- МАТЕРИАЛА ДЛЯ ОБОЛОЧЕК КАПСУЛ	101
Бочкова Е.И. КИНЕТИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГАЛЕНИТА С РАСТВОРАМИ АЗОТНОЙ КИСЛОТЫ	102
Варламова А.А. МОДИФИКАЦИЯ АНТИДОТНЫХ КОМПОЗИЦИЙ, ТИПА АЛЬБИТ, С ЦЕЛЬЮ ОПТИМИЗАЦИИ ИХ СОСТАВА	103
Варламова А.А., Биберина Е.С. СИНТЕЗ БИОРАЗЛАГАЕМОГО L-ИЗОМЕРА N-(КАРБОКСИМЕТИЛ)АСПАРАГИНОВОЙ КИСЛОТЫ.....	104
Воробьева Я.В. ИК-СПЕКТРОСКОПИЯ КОМПОЗИТНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК	105
Горбач К.Д. БИСЧЕТВЕРТИЧНЫЕ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫЕ ВЕЩЕСТВА N-АЛКИЛПИПЕРИДИНИЯ	106
Горбачев С.А., Листратенко М.А. ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ОРГАНОНЕОРГАНИЧЕСКОГО ГИБРИДА МКЦ - ОКСИД ТИТАНА.....	107
Давинян С.С. СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ ТРИЭТИЛАМИНА	108

Давыдова А.А. , Берестнева Ю.В., Ракша Е.В., Вдовиченко А.Н. ПРЕДПОСЫЛКИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ СОЕДИНЕНИЙ СОИНТЕРКАЛИРОВАНИЯ НИТРАТА ГРАФИТА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОЧАСТИЦ	109
Елистратова М.К. ПОЛУЧЕНИЕ 3-МЕТИЛ-1,5-ДИФЕНИЛФОРМАЗАНА.....	110
Ефимова П.И. РЕАКЦИЯ МАННИХА – КАК МЕТОД СИНТЕЗА N-ПРОИЗВОДНЫХ ПИПЕРИДИНА И МОРФОЛИНА	111
Зайкова А.Г. СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНОГО БИЦИКЛО[2.2.1]ГЕПТЕНА ПО РЕАКЦИИ ДИЛЬСА- АЛЬДЕРА.....	112
Заполина И.А. КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ АСКОРБИНОВОЙ КИСЛОТЫ В СОКАХ	113
Камышева К.А. ОКСАЛАТНО-СУЛЬФАТНЫЕ И ФТОРИД-ХЛОРИДНЫЕ ЭЛЕКТРОЛИТЫ ДЛЯ ЭЛЕКТРООСАЖДЕНИЯ СПЛАВОВ ОЛОВО-НИКЕЛЬ.....	114
Капустина С.С. СОВРЕМЕННЫЕ ЭКОЛОГИЧЕСКИ-БЕЗОПАСНЫЕ НЕЗАМЕРЗАЮЩИЕ ЖИДКОСТИ.....	115
Касекиви Е.С. , Портнова Д.А. НЕИОНОГЕННЫЕ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫЕ ВЕЩЕСТВА КАК ЭМУЛЬГАТОРЫ ЭМУЛЬСИЙ	116
Кравцова Е.Н. СИНТЕЗ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ ПИРИДИНИЯ С МЕТАЛСОДЕРЖАЩИМИ АНИОНАМИ	117
Литвинов М.Ю. ИССЛЕДОВАНИЕ ВОДОПОГЛОЩЕНИЯ ПОЛИФЕНИЛСИЛСЕСКВИОКСАН- ПОЛИДИОРГАНОСИЛОКСАНОГО БЛОК-СОПОЛИМЕРА.....	118
Маркина Д.К. ПРОИЗВОДСТВО СЕРНОЙ КИСЛОТЫ ПЕРЕРАБОТКОЙ КИСЛЫХ ГУДРОНОВ	119
Мокрецов Н.Е. ЭЛЕКТРООСАЖДЕНИЕ СПЛАВОВ ЦИНК-ЖЕЛЕЗО ИЗ РАСТВОРОВ ЯНТАРНОЙ КИСЛОТЫ.....	120
Момзякова К.С. , Афанасьев А.С. , Ибрагимов А.В. ПОЛУЧЕНИЕ ПОРОШКОВОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ ИЗ ЛЬНА	121
Моренко М.В. , Юрчило С.А. АДСОРЦИЯ БРОМФЕНОЛОВОГО СИНЕГО НА ЧАСТИЦАХ ФЕРРИТА ВИСМУТА СО СТРУКТУРОЙ ПЕРОВСКИТА В ВОДНОЙ СУСПЕНЗИИ	122
Низаметдинова Л.А. , Шарафутдинова Г.Э. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ L-ЦИСТЕИНА С СУЛЬФАТ- АНИОНОМ	123
Носенко К.Н. ОЦЕНКА УСТОЙЧИВОСТИ КАРБОКСИЛСОДЕРЖАЩИХ МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСОВ ПОЛИМЕРОВ МЕТОДОМ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ МНПВО	124
Понкратов М.А. , Алхасова Э.Д. ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ X-ЗАМЕЩЁННЫХ ЭТАНА И АЛКИЛЗАМЕЩЁННЫХ БЕНЗОЛА.....	125
Романюк Е.А. ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ ПРОСТЫХ ЭФИРОВ	126
Смирнова К.А. БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ СОЛЕЙ N,N-ДИАЛКИЛПИПЕРИДИНИЯ.....	127
Соколова Е.А. ВЛИЯНИЕ ПРОМЫШЛЕННЫХ ВЫБРОСОВ ГОРНЫХ ПРЕДПРИЯТИЙ НА ВОДОЕМЫ КЕМЕРОВСКОЙ ОБЛАСТИ.....	128

Томилов В.О. ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ НАНОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ ДЛЯ ОПТО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ.....	129
Яковлева А.В., Яковлев А.С. ТЕХНОЛОГИЯ ВИНИЛИСКОЖИ: ЗАЩИТА ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ	130

Устная секция конференции

УДК 557.1:543.422.27

Д.В. Аверкин¹

РАЗРАБОТКА ПЕРСПЕКТИВНЫХ КАЛИБРОВОЧНЫХ СТАНДАРТОВ ДЛЯ МЕТОДА ИЗМЕРЕНИЯ ДЗЕТА-ПОТЕНЦИАЛА ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ

Руководители: П.М. Пахомов¹, С.Д. Хижняк¹, Д.И. Беленький²

¹ФГБОУ Тверской государственной университет

Кафедра физической химии

²ФГБУ ВНИИФТРИ

В настоящее время отмечается потребность в разработке и использовании точных экспресс-методов для контроля медицинских диагностических дисперсных систем и фармакологических препаратов. К таким методам следует отнести метод измерения дзета-потенциала. Дзета-потенциал характеризует способность частиц к коагуляции – это параметр дисперсной системы, который определяется степенью и характером взаимодействия между частицами, знание точного значения позволяет определить долгосрочную стабильность суспензий и эмульсий и изучить процессы адсорбции на частицах и других поверхностях в контакте с жидкостью. Также направлениями практического применения измерений дзета-потенциала являются как область фундаментальных научных исследований для мониторинга динамических характеристик биополимеров и синтетических наночастиц, так и его практическое применение в центральных заводских лабораториях химической, биотехнологической и пищевой промышленности как способа контроля качества выпускаемой продукции. Однако существующие стандарты для методов измерения дзета-потенциала отличаются дороговизной и относительной недолговечностью.

В настоящей работе предполагается использовать супрамолекулярных систему на основе водного раствора L-цистеина и ацетата серебра (ЦСРац) в качестве калибровочного стандарта. Низкая концентрация исходных компонентов системы, возможность долгого хранения раствора в комнатных условиях и возможность модификации делают ЦСРац перспективным калибровочным раствором для методов измерения дзета-потенциала. В процессе изучения ЦСРац было зарегистрировано стабильное во времени значение дзета-потенциала (+60 мВ). Установлено изменение значений дзета-потенциала частиц (агрегатов) ЦСРац в зависимости от заряда катиона вводимого электролита, положения металла в лиотропном ряде и специфических взаимодействий аниона с агрегатами ЦСРац. Получены условия для изменения значения дзета-потенциала ЦСРац в диапазоне от +40 до +100 мВ после введения электролитов NaCl, Na₂WO₄, Na₂SO₄ и Na₂MoO₄. Ведется поиск возможных модификации исходной системы ЦСРац для получения значений дзета-потенциала в отрицательном диапазоне значений потенциала.

УДК 544.147.3

Агапова Д.С.

СРАВНЕНИЕ ГРУППОВЫХ ХАРАКТЕРИСТИК РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ 2,2-ДИМЕТИЛГЕПТАНА И ТРИМЕТИЛПЕНТИЛСУЛЬФИДА

Руководители: Русакова Н.П., Орлов Ю.Д., Туровцев В.В.
Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Оптимизация геометрии 2,2-диметилгептана ((CH₃)₃-C-(CH₂)₄-CH₃) и триметилпентилсульфида ((CH₃)₃-S-(CH₂)₄-CH₃) была проведена методом V3LYP/6-311++G(3df.3pd) в программе GAUSSIAN 03. Вычисление зарядов (q) и объемов (V) «топологических» атомов – в программе AIMALL. Групповые характеристики ($q(R)$, $V(R)$) суммированы из атомных q , V в рамках «квантовой теории атомов в молекулах» и сведены в таблицу.

Таблица: Заряды и объемы групп молекул (CH₃)₃-R-(CH₂)₄-CH₃, где R = C, S.

	CH ₃ ^{*1}	CH ₃ ^{*2}	R	CH ₂	CH ₂	CH ₂	CH ₂	CH ₃
R	Заряды групп $q(R)$ в а.е.							
S	0,049	-0,302	0,471	0,007	0,050	0,010	0,024	-0,008
C	-0,030	-0,030	0,105	-0,014	0,000	0,001	0,015	-0,015
R	Объемы групп $V(R)$ в Å ³							
S	30,99	35,35	18,13	21,95	22,69	23,45	23,59	33,04
C	32,07	32,07	6,15	22,86	22,80	23,47	23,66	33,14

CH₃^{*1} метильный фрагмент в плоскости алкильной цепи.

CH₃^{*2} метильные заместители с идентичным распределением электронной плотности у второго атома С в плоскости, перпендикулярной плоскости алкильной цепи.

Сравнение зарядов $q(R)$ и объемов $V(R)$ групп CH₃ в (CH₃)₃-S-(CH₂)₄-CH₃ показало смещение электронной плотности ($\rho(r)$) с CH₃, находящейся в плоскости алкильной цепи в сторону двух CH₃, расположенных перпендикулярно ей. Это не соответствует равномерному распределению $\rho(r)$ в (CH₃)₃-C-(CH₂)₄-CH₃ (табл.). В (CH₃)₃-S-(CH₂)₄-CH₃ группа CH₃ фрагмента (CH₂)₄-CH₃ проявляет меньшую электроотрицательность по сравнению с аналогичной группой в (CH₃)₃-C-(CH₂)₄-CH₃. Данный вывод следует из сопоставления $q(R)$ (в (CH₃)₃-S-(CH₂)₄-CH₃ $q(\text{CH}_3)$ выше на 0,007 а.е., чем в (CH₃)₃-C-(CH₂)₄-CH₃) и $V(R)$ (в (CH₃)₃-S-(CH₂)₄-CH₃ $V(\text{CH}_3)$ меньше на 0,1 Å³, чем в (CH₃)₃-C-(CH₂)₄-CH₃) таблицы. На изменение $V(\text{CH}_3)$ и параметров ближайшей к нему CH₂ $V(\text{CH}_2)$ и $q(\text{CH}_2)$ в (CH₃)₃-S-(CH₂)₄-CH₃ оказывает влияние стерическое воздействие фрагмента (CH₃)₃-S.

Работа выполнена в рамках государственного задания № 4.6469.2017/8.9.

УДК 541.49:615.33

А.Н. Адамян

ПРОЦЕССЫ САМООРГАНИЗАЦИИ L-ЦИСТЕИНА И АЦЕТАТА СЕРЕБРА В РАСТВОРЕ D₂O

Руководитель: П.М. Пахомов

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Гидрогели на основе низкомолекулярных соединений (аминокислот, пептидов) в настоящее время широко востребованы в медицине, в связи с чем привлекают повышенное внимание исследователей. Ранее было обнаружено гелеобразование в низко-концентрированных водных растворах L-цистеина (L-cys) и ацетата серебра (AgAcet) при добавлении солей-инициаторов (сульфатов и хлоридов металлов) [1]. Установлено, что процесс гелеобразования обусловлен природой аминокислоты L-cys, поскольку она содержит три функциональные группы: амино-, тиольную и карбоксильную. Однако, возникает вопрос о роли воды как растворителя на процесс гелеобразования. Цель данной работы - выяснить повлияет ли на процесс гелеобразования замена H₂O на D₂O. Процессы самоорганизации в системах на основе D₂O были исследованы с помощью методов УФ спектроскопии и динамического светорассеяния (ДСР).

Результаты показывают, что при смешении растворов L-cys и AgAcet в D₂O происходит образование цистеин-серебряного раствора (ЦСР/D₂O) аналогично системам на основе H₂O. Об этом свидетельствуют полосы поглощения (~308 нм и 388 нм) в электронном спектре образцов ЦСР/D₂O. При добавлении к ЦСР/D₂O растворов инициаторов NaCl и Na₂SO₄ (на основе D₂O) происходит гелеобразование. Однако, гелеобразование в системах с D₂O протекает быстрее, чем в системах с H₂O, а размер образовавшихся агрегатов оказался приблизительно в 2 раза больше, что подтверждается данными ДСР. Так, например, в системах на основе H₂O и D₂O, разбавленных в 4 раза, наблюдается бимодальное распределение частиц по размерам. Однако, диаметр зародышевых кластеров и основных агрегатов в системах в H₂O равен ~ 9,7 и 72,6 нм, соответственно, а диаметр тех же частиц в системах в D₂O – ~20,0 и 187,9 нм. Очевидно, что в ЦСР/D₂O диаметр частиц зародышевых кластеров и агрегатов – заметно превосходит размеры этих же типов частиц в ЦСР/H₂O, что можно объяснить особенностями строения молекулы D₂O.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Адамян А.Н., Аверкин Д.В., Хижняк С.Д., Овчинников М.М., Пахомов П.М. // Вестник ТвГУ. Серия «Химия». 2016. № 2. С. 89–98.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-33-00146 мол_а) и финансовой поддержке Минобрнауки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности (проект №4.5508.2017/БЧ) на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.

УДК: 539.422.52

А.А. Бондарь

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЧНОСТНЫХ СВОЙСТВ СТЕКЛОПЛАСТИКОВ

Руководитель: Е.И. Лагуева
Тверской государственный технический университет
Кафедра технологии полимерных материалов

Композиты, состоящие из двух разнородных материалов – стеклянного наполнителя и синтетического полимерного связующего относят к стеклопластикам. Их физико-механические свойства различны и зависят от: состава связующего, вида стекловолоконного материала и технологии изготовления.

Стеклонаполнитель в композите несет основную нагрузку; синтетическая смола (с отверждающими добавками) выполняет роль связующего, которое обеспечивает более равномерное распределение нагрузки между волокнами и придает жесткость всей композиции.

В работе связующим является алифатическая винилэфирная смола Аропол М604ТВ. Характеризуется низким содержанием стирола, малой эмиссией стирола, хорошим смачиванием стекловолокна, малой усадкой и хорошим качеством поверхности. Применяется для технологий ручного формования и напыления.

В качестве наполнителя использовали конструкционную стеклоткань Т-11/1П из стеклянных крученых комплексных нитей сатинового ячеистого переплетения и стеклохолст 450 – стекловолоконный материал в виде прошивного холста, состоящий из хаотично расположенных стеклянных волокон.

Образцы для испытаний изготовлены методом контактного формования при содержании стеклоткани – 51,7%; стеклохолста – 30,3%. Испытания проводили на напорной серво-гидравлической машине для статических и динамических испытаний Instron 8802 при расстоянии между опорами: стеклоткань – 114 мм, стеклохолст – 140 мм.

Анализ результатов показал, что ориентированные стеклопластики имеют более высокие прочность при изгибе и модуль упругости, чем неориентированные (таблица). При повышении температуры значения прочности при изгибе и модуль упругости снижаются, по сравнению со значениями, полученными при нормальной и пониженной температурах [1].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гаврюшина Н. Т., Букеткин Б. В.; Наука и образование: электронное научно-техническое издание. МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2014. № 12.

УДК 541.6

Д. В. Брянцев

ТЕОРЕТИКО-ГРАФОВАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ АДДИТИВНЫХ СХЕМ РАСЧЁТА ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ АЛЬДЕГИДОВ

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

Целью настоящей работы является – установление количественных корреляций “структура – энтальпия образования” в альдегидах. 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 альдегидов. Показано, что многие известные ТИ участвуют как числа параметров в конструировании таких схем.

$$P_{C_nH_{2n}O} = a_0 + p_1b + p_1'b' + p_2\Gamma_{cc} + p_2'\Gamma_{co} + R\Delta_{ccc} + R'\Delta_{cco} + p_3\tau_{cc} + p_3'\tau_{co} + p_4\omega_{cc} + p_4'\omega_{co}$$

где $a_0 = p_{c-n}$

Здесь p_1, p_2, p_3, p_4 – соответственно число путей (рёбер) длины один, два, три и четыре; R – число троек смежных рёбер; $\Gamma_{cc}, \Gamma_{cs}, \tau_{cc}, \tau_{co}, \omega_{cc}, \omega_{co}$ – эффективные взаимодействия пар атомов С (С и О) соответственно через один атом, два, три и четыре атома и т.д. По полученным формулам проведён численный расчёт энтальпии образования ряда альдегидов. Рассчитанные величины согласуются с экспериментальными и позволяют предсказать в пределах ошибок опыта недостающие значения свойств членов исследуемого ряда.

В работе также проанализированы графические зависимости вида «Свойство – топологический индекс», «Свойство – номер изомера» и «Топологический индекс – номер изомера». Такие зависимости служат ценным дополнением к расчетно-аналитическому исследованию. Они не только наглядно показывают корреляционную способность данного индекса со свойством, но и позволяют выбрать подходящий топологический индекс для аналитического исследования.

УДК: 538.9

Г.Г. Дунаева, П.А. Ракунов

АНАЛИЗ КРИВЫХ НАМАГНИЧИВАНИЯ ФЕРРОМАГНЕТИКОВ ПО
ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЕ ПОВЕРХНОСТИ ВО ВНЕШНЕМ
МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Руководитель: А.Ю. Карпенков

Тверской государственный университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Информация о параметрах магнитной доменной структуры магнетиков необходима для локальной оценки микромагнитных параметров, что особенно существенно, если речь идет о гетерогенных материалах [1]. В настоящей работе приводится исследование процессов перемагничивания поверхности образца SmCo_5 по результатам анализа изображений магнитной доменной структуры во внешнем магнитном поле до 15кЭ.

Образец для исследования был получен методом индукционной плавки в атмосфере аргона и представлял собой одно зерно сплава. Шлиф подготовлен на базисной плоскости с применением алмазных паст. Образец закреплялся в электромагните таким образом, чтобы поле было направлено вдоль оси легкого намагничивания перпендикулярно плоскости наблюдения. Магнитная доменная структура выявлялась при комнатной температуре на оптическом металлографическом микроскопе Neophot-30 методом полярного эффекта Керра и регистрировалась с помощью цифровой камеры Levenhuk M800 PLUS. Для обработки изображений ДС и построения полевых зависимостей относительной намагниченности применялась специализированная компьютерная программа, алгоритм которой описан в работе [2]. Измерение кривой намагничивания было выполнено методом вибрационного магнитометра в поле до 25кЭ. На основе изображений доменной структуры поверхности были построены кривые намагничивания. В работе проводится сравнительный анализ кривых намагничивания полученных двумя независимыми методами. Анализируется вклад поверхности в процессы перемагничивания.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пастушенков Ю.Г. // Монография. Тверь: Тверской государственный университет, 2007. 151 с.
2. Карпенков А.Ю., Дунаева Г.Г., Ракунов П.А., Семенова Е.М. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2018. Вып. 10. С.338-344.

УДК: 544.421.032.76

А. Г. Завьялова

ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНЫЕ НЕВАЛЕНТНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В АЗОБЕНЗОЛЕ

Руководители: Н.П. Русакова, В.В. Туровцев
Тверской государственной университет
Кафедра физической химии

В органической химии азобензол играет большую роль в качестве сырья для изготовления различных азокрасителей. В связи с этим, его можно выделить как элемент химической структуры в молекулах некоторых азоиндикаторов, непосредственно влияющий на их свойства.

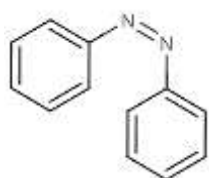


Рис.: *цис-азобензол*

Поэтому исследование электронной плотности $\rho(r)$ азобензола (рис.) проводилось квантово-химическими методами. Методики поиска равновесного состояния *цис*-изомера, электронных интегральных характеристик групп (заряды - $q(R)$, энергии - $E(R)$ и объемы - $V(R)$) представлены в [1]. Результаты вычислений $q(R)$, $E(R)$ и $V(R)$ сведены в таблицу. Поскольку значения $q(R)$, $E(R)$, $V(R)$ одинаковых групп (по расположению относительно $-N=N-$) обоих колец идентичны, в таблице приведены $q(R)$, $E(R)$, $V(R)$ для одного кольца.

Таблица: *Интегральные параметры групп (R) для азобензола*

	-N=N-	1*С	2СН	3СН	4СН	5СН	6СН
$q(R)$, а.е.	-0,766	0,273	0,033	0,015	0,009	0,018	0,034
$E(R)$, а.е.	-109,889	-37,987	-38,709	-38,705	-38,707	-38,704	-38,712
$V(R)$, Å ³	30,18	8,92	19,43	19,68	18,80	19,65	19,75

* цифра перед атомом С и группами СН показывает положение С в бензольном кольце, начинается с С, связанного с N, и продолжается по часовой стрелке

Анализ $q(СН)$ и $E(СН)$ показывает примерно равномерное увеличение значений их q и E от 4СН к замещённому атому С (группы 4СН и С в параположении). Это связано с оттоком $\rho(r)$ с фенольных фрагментов молекулы в сторону $-N=N-$ под действием его индуктивного влияния. Из сопоставления зарядов изучаемых групп получено соотношение их электроотрицательностей: $\chi(С) < \chi(СН) < \chi(-N=N-)$. Сравнение $V(R)$ 2СН и 6СН, ближайших к С, показывает деформацию $V(2СН)$. Уменьшение $V(2СН)$ относительно $V(6СН)$ происходит в следствии стерического эффекта со стороны второго ароматического кольца *цис*-формы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Русакова Н.П., Туровцев В.В. и Орлов Ю.Д. // Журнал структурной химии. 2015. Т.56. № 1. С. 29-33.

УДК 66-6, 662.987.9

Затика Н.Ю.

РАССМОТРЕНИЕ АЛЬТЕРНАТИВНЫХ ВИДОВ ОБОГРЕВА ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ОБОРУДОВАНИЯ В ПРОИЗВОДСТВЕ ПОЛИЭТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТА

Руководитель: Е.А. Панкратов
Тверской государственной технической университет

В данной работе рассматривается возможность повышения энергоэффективности производства полиэтилентерефталатного гранулята на предприятии АО «Сибур-ПЭТФ» за счет введения альтернативной системы обогрева технологического оборудования, которых существует несколько видов.

При обогреве теплоносителем в жидком состоянии упрощается схема обогрева, обеспечивается возможность тонкого регулирования температуры в отдельных реакторах, работающих при различных температурных режимах. Также достоинствами обогрева жидким высококипящим органическим теплоносителем (ВОТ) являются значительное сокращение времени нагревания исходной реакционной смеси до высоких температур за счет использования поверхности теплообмена змеевиков, более низкая стоимость обогрева по сравнению с индукционным электрообогревом.

Наиболее предпочтительным вариантом электрообогрева является индукционный электрообогрев. Индукционный электрообогрев основан на использовании теплового эффекта вихревых токов, возникающих в толще стальной стенки реактора под воздействием переменного электрического поля. Реактор с индукционным электрообогревом является своеобразным трансформатором.

В каждом методе имеются свои достоинства и недостатки, подробное рассмотрение каждой системы относительно производства ПЭТФ на предприятии АО «Сибур-ПЭТФ» даст четкое понятие наиболее предпочтительного способа обогрева технологического оборудования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Способы обогрева реакционных аппаратов [электронный документ] (<http://kraska.biz/tehnologiya-i-oborudovanie-lakokrasochnogo-proizvodstva/sposoby-obogreva-reakcionnyh-apparatov/>) Проверено 23.01.19
2. Описание технологического процесса получения гранулята полиэтилентерефталата.- Тверь: ОАО «Сибур-ПЭТФ», 2007.-413 с.

УДК: 538.9

О.И. Коробейничева

МИКРОСТРУКТУРА И МАГНИТНАЯ ДОМЕННАЯ СТРУКТУРА КВАЗИБИНАРНОГО СОЕДИНЕНИЯ $\text{Sm}(\text{Co},\text{Ni},\text{Fe})_5$

Руководитель: Ю.Г. Пастушков

Тверской государственный университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Квазибинарные соединения на основе базового бинарного соединения RCO_5 создавались с целью повышения такой структурно-чувствительной характеристики магнитных материалов как коэрцитивная сила. В данной работе приводится результат анализа микро- и магнитной доменной структуры соединения $\text{Sm}(\text{Co}_{0,2}\text{Ni}_{0,2}\text{Fe}_{0,6})_5$, в котором атомы кобальта в кристаллической решетке частично замещаются никелем и железом.

Исходные сплавы были получены методом индукционной плавки разлиты на подложку, после чего подвергнуты гомогенизации при 1100°C в течение 5 часов с последующей закалкой в воду.

В работе выполнен анализ микроструктуры и элементного состава образцов методами оптической (Neophot-30) и растровой электронной микроскопии (JEOL JSM-6610LV). Магнитная доменная структура выявлялась на Neophot-30 методом полярного эффекта Керра и магнитного коллоида, а также на сканирующем зондовом микроскопе Solver Next методом магнитно-силовой микроскопии.

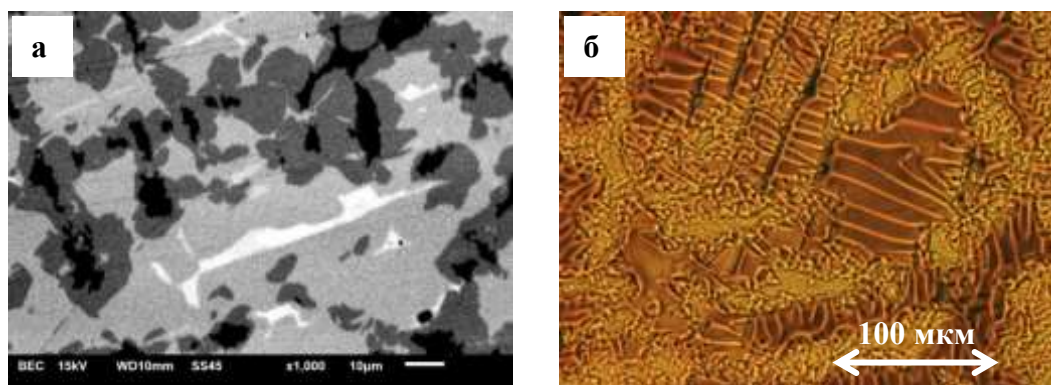


Рис.1. Микроструктура исходного сплава (а), выявленная методом РЭМ и магнитная ДС, выявленная методом магнитного коллоида (б).

В литом состоянии (рис.1) исходный сплав является многофазным. Энергодисперсионный анализ показывает, что в сплаве присутствуют фазы $\text{Sm}_2(\text{Fe},\text{Co},\text{Ni})_{17}$, $\text{Sm}_2(\text{Fe},\text{Co},\text{Ni})_7$, $\text{Sm}(\text{Fe},\text{Co},\text{Ni})_3$ и $\text{Sm}(\text{Co},\text{Ni})$. По ДС (рис.1б) видно, что часть фаз обладает магнитным упорядочением.

УДК: 544.144

Г.А. Курочкин

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ СЕРО- И КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИХ ТРЕХАТОМНЫХ ЦИКЛОВ

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

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Определение дескрипторов электронной структуры, используемых в корреляциях QSPR и QSAR, требует знания распределении электронной плотности $\rho(r)$ соединений. Методы квантовой механики позволяют достаточно надежно провести анализ $\rho(r)$. В работе представлены электронные структуры трёхатомных гетероциклов (рис.), содержащих кислород и серу с разной валентностью: $\text{H}_2\text{-C}(\text{S}^{\text{II}}\text{-O})$, $\text{H}_2\text{-S}^{\text{IV}}(\text{O-O})$ и $\text{O}(\text{CH}=\text{S}^{\text{IV}}\text{H})$. Квантово-химические расчёты выполнены методом B3LYP. Распределение $\rho(r)$ «топологических» атомов и групп получено с помощью программы AIMALL.

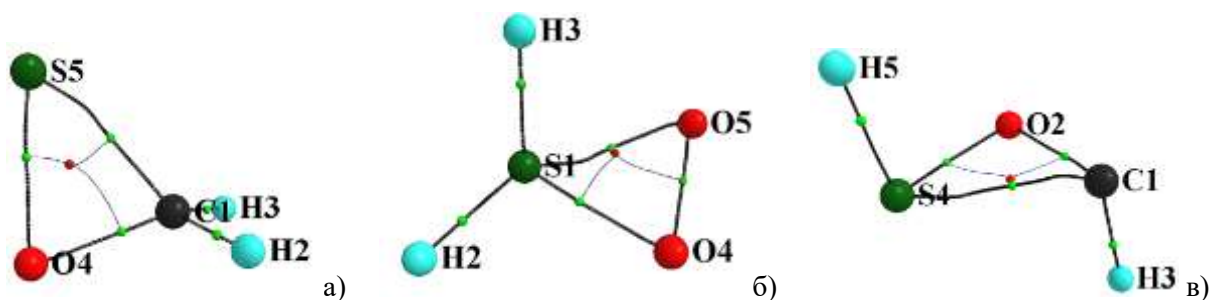


Рисунок: Циклические молекулы: а) $\text{H}_2\text{-C}(\text{S}^{\text{II}}\text{-O})$, б) $\text{H}_2\text{-S}^{\text{IV}}(\text{O-O})$, в) $\text{O}(\text{CH}=\text{S}^{\text{IV}}\text{H})$; черными линиями показаны связывающие пути, светлозелёные шарики отображают критические точки связи, маленькие красные шарики – критические точки циклов.

Связывающие пути от ядер кислорода, углерода и серы пересекают межатомные поверхности $S(r)$ в критических точках связи. Положение $S(r)$ подчиняется условию нулевого потока градиента электронной плотности: $\nabla\rho(r) \cdot n(r) = 0$; $r \in S(r)$. В плоскости кольца в критической точке цикла переходит пересечение трёх межатомных поверхностей (рис). Распределение $\rho(r)$ в молекулах носит асимметричный характер, результатом которого является сдвиг критической точки цикла к связи S-O в структурах $\text{H}_2\text{-C}(\text{S}^{\text{II}}\text{-O})$ и $\text{H}_2\text{-S}^{\text{IV}}(\text{O-O})$, к C=S в $\text{O}(\text{CH}=\text{S}^{\text{IV}}\text{H})$ и деформация связывающих путей S-C в $\text{H}_2\text{-C}(\text{S}^{\text{II}}\text{-O})$, S-O в $\text{H}_2\text{-S}^{\text{IV}}(\text{O-O})$ и S-C в $\text{O}(\text{CH}=\text{S}^{\text{IV}}\text{H})$.

Работа выполнена в рамках государственного задания № 4.6469.2017/8.9.

УДК: 615.32.015:616-092.4

К.А. Лунёва^{1,2}, А.С. Лунёв¹, О.Е. Клементьева¹, А.Б. Брускин¹

ПЭТ-ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ОЧАГОВ
ОПУХОЛЕВОГО АНГИОГЕНЕЗА С НОВЫМ
РАДИОФАРМПРЕПАРАТОМ НА ОСНОВЕ ГАЛЛИЯ-68

Руководитель: А.А. Лисицына²

¹ФГБУ ГНЦ Федеральный медицинский биофизический центр
им. А.И. Бурназяна ФМБА России

Лаборатория доклинических и клинических исследований радиофармацевтических
препаратов

²ФГБОУ ВО Московская государственная академия ветеринарной медицины и
биотехнологии – МВА им. К.И. Скрябина

Кафедра химии имени профессоров С.И. Афонского, А.Г. Малахова

Развитие и распространение ПЭТ-центров в России и за рубежом и, соответственно, необходимость использования позитрон-излучающих короткоживущих изотопов подталкивает учёных и клиницистов к поиску и разработке новых ПЭТ-радиофармпрепаратов, имеющих минимум недостатков и максимум пользы в вопросах визуализации и диагностики различных патологических процессов. Одними из перспективных на сегодняшний день являются пептиды, меченные галлием-68 ($T_{1/2} = 68,3$ мин). Пептиды как стабильные и относительно недорогие молекулы с хорошо изученными химией и фармакокинетикой, на сегодняшний день остаются лучшими векторными молекулами.

В ФГБУ ГНЦ ФМБЦ им. А.И. Бурназяна ФМБА России был разработан новый радиофармацевтический лекарственный препарат (РФЛП) для ПЭТ-визуализации очагов опухолевого ангиогенеза на основе аминокислотной последовательности RGD, характеризующейся способностью связываться с интегринами, сверхэкспрессирующимися на поверхности опухолевых клеток [1, 2].

Было проведено моделирование опухолевых очагов глиобластомы U-87 MG, характеризующихся наличием $\alpha_v\beta_3$ интегриновых рецепторов, а также патологических очагов сравнения и их последующая визуализация и идентификация методом ПЭТ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бубенчиков В.Б., Марук А.Я., Брускин А.Б., Кодина Г. Е.. Исследование комплексов производных RGD-пептидов с ⁶⁸Ga // *Радиохимия*, 2016, т. 58, N 5, с. 437–442.
2. Рахимов М.Г., Марук А.Я., Брускин А.Б.. Соединения для радионуклидной визуализации и терапии очагов злокачественных новообразований, характеризующихся повышенным ангиогенезом // *Изв. АН. Серия химическая*, 2016. № 2. С. 363-383.

УДК 544.773.32:542.8

А.И. Маркова

ИЗУЧЕНИЕ МОРФОЛОГИИ ЭМУЛЬСИИ СПЕКТРАЛЬНЫМИ МЕТОДАМИ

Руководитель: П.М. Пахомов

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Эмульсии – микрогетерогенные системы, состоящие из взаимно нерастворимых жидкостей, чаще всего в виде капель масла в воде. Они имеют чрезвычайно широкое применение в сельском хозяйстве, промышленности и медицине.

В связи с этим важно иметь простой, доступный и эффективный экспериментальный метод оценки размера капель в эмульсиях в широком диапазоне. Большинство имеющихся методов не удовлетворяют этим критериям. Поэтому настоящая работа направлена на разработку нового спектроскопического подхода в оптическом диапазоне длин волн (УФ, видимая и ИК области) для анализа морфологии эмульсий.

В качестве образцов исследования были выбраны две эмульсионные системы разных концентраций: сливки (капли молочного жира в воде) и вазелиновое масло (ВМ) в изопропиловом спирте (ИПС). Эмульсию ВМ в ИПС готовили с помощью мешалки Wise Mix VM-10. Основными методами исследования являлись УФ и ИК спектроскопия, для контроля использовали метод динамического светорассеяния (ДСР). Регистрация УФ спектров эмульсий осуществлялась в кварцевой кювете толщиной 1 см на УФ спектрометре «EvolutionArray» фирма «ThermoScientific», ИК спектры эмульсий записывали на Фурье-ИК спектрометре «Vertex 70» фирмы «Brucker» между окнами KRS, размеры капель в эмульсии также определяли с помощью метода ДСР на приборе «Zetasizer ZS» фирмы «Malvern Instruments Ltd». Оценку среднего размера капель и их распределения по размерам осуществляли по методике, представленной в работе [Ситникова В.Е. Дисс. на соиск. степени к.х.н. «Спектроскопическое изучение структуры полимерных дисперсных систем»].

Установлено, что рассматриваемые эмульсии являются средами сильно рассеивающими свет. Показано, что с увеличением концентрации дисперсной фазы в эмульсии, происходит увеличение размеров капель, свидетельствующее об агрегации капель в эмульсии. Сопоставляя средние размеры капель и их распределения, полученные УФ и ИК спектроскопическими методами, с данными метода ДСР установили хорошую корреляцию.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения гос. работ в сфере науч. деят. (проект №4.5508.2017/БЧ) на оборудовании ЦКП ТвГУ

УДК: 66.095.63

М.Е. Маркова

НОВЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ БЕНЗИНОВОГО РЯДА

Руководитель: Э.М. Сульман

Тверской государственный университет
Региональный технологический центр

Одним из ключевых процессов для получения синтетического жидкого топлива и ценных химических веществ из альтернативных источников (уголь, биомасса, углеродсодержащие отходы) является синтез Фишера-Тропша из смеси оксидов углерода и водорода в присутствии катализаторов на основе переходных металлов. Синтез Фишера-Тропша является кинетически контролируемым процессом, поэтому состав продуктов и их массовое распределение сильно зависят не только от параметров процесса, но и от структуры катализатора. Поэтому разработка новых каталитических систем, характеризующихся высокой активностью, стабильностью и селективностью по отношению к требуемым продуктам, является целевой задачей исследователей [1].

Суб- и сверхкритические технологии широко используются в аналитической химии и химической инженерии благодаря своим уникальным свойствам. Эти свойства стали основой для применения сверхкритических жидкостей (СКЖ) в синтезе катализаторов [2]. В данной работе были получены новые катализаторы, синтезированные гидротермальным методом в субкритической воде.

Синтезированные катализаторы были проанализированы с использованием различных физико-химических методов. Исследование состава и структуры катализаторов показало, что гидротермальный метод позволяет получать каталитически активные материалы с равномерным распределением активной фазы. Предложенный метод синтеза приводит к перестройке пористой структуры носителя, увеличивая долю мезопор, что является благоприятным для многих процессов.

Тестирование полученных катализаторов на основе полимерного носителя в жидкофазном синтезе Фишера-Тропша показало, что синтезированные системы проявляют высокую активность, стабильность и селективность к образованию жидких углеводородов бензинового ряда.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Крылова А.Ю., Козюков Е.А. // Газохимия. 2008. Т. 1. с. 66-70.
2. Cansell F., Aumonier C., Loppinet-Serani A. // Curr. Opin.Solid State Mater.Sci. 2003. Vol. 7. Pp. 331-340.

УДК 541.49:615.33

Т.В. Перезовова

ПРОЦЕССЫ САМООРГАНИЗАЦИИ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ НА ОСНОВЕ L-ЦИСТЕИНА, ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ И СОЛЕЙ СЕРЕБРА

Руководитель: Пахомов П.М

Тверской государственный университет,
Кафедра физической химии

Проблема самосборки полимолекулярных структур в растворах весьма актуальна, так как имеет отношение к формированию многих биологических объектов. Особое место среди них занимают растворы, способные к образованию гелей при низких концентрациях компонентов. Для эффективного использования уникальных свойств различных гидрогелей на основе низкомолекулярных соединений необходимо детальное понимание общих закономерностей, приводящих к формированию особенностей их пространственной структуры. При изучении гелеобразных состояний супрамолекулярных систем выделяют два взаимосвязанных вопроса: 1) как и при каких условиях происходит возникновение пространственной сетки геля; 2) каков механизм этого процесса?

Чтобы разобраться в сформулированных вопросах, в качестве объекта изучения выбраны низкоконцентрированные (<0,01%) водные растворы L-цистеина, меркаптопропионовой кислоты (МПК), цистеина (ЦА) и солей серебра (AgNO_3 , AgNO_2). Механизм самоорганизации в растворах изучен применением методов вискозиметрии, рН-метрии, динамического светорассеяния (ДСР), измерения ζ -потенциала, просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), УФ и Фурье-ИК спектроскопии. Целью настоящей работы является изучение процессов самоорганизации в данных системах, а также самих гелей.

Установлено, в результате смешивания растворов L-цистеина и AgNO_2 , при молярном соотношении 1:1 и 1:1,25, образуется прозрачный раствор, который при стоянии приобретает желтый оттенок и образует гель. На основании экспериментальных данных предложен механизм формирования гелей на основе L-цистеина и AgNO_2 . В системах ЦА–серебро и МПК–серебро явление гелеобразования не обнаружено, хотя, может быть, условия гелеобразования еще не найдены. Тем не менее, структура фрагмента молекул, образованных ионом серебра с ЦА и МПК остается такой же, как и для L-цистеина - цепочки типа $-\text{Ag-S(R)-Ag-S(R)-Ag-S(R)}$, (R обозначает остальную часть молекулы с меркаптогруппой).

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности (проект № 4.5508.2017/БЧ) на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета, Германо-Российского междисциплинарного научного центра G-RISC (Free State University) и гранта РФФИ (проект № 18-33-00146 мол_а)

УДК: 681.2, 537.638.5

П.А. Ракунов, Г.Г. Дунаева

ВЛИЯНИЕ БЫСТРОЙ ЗАКАЛКИ НА МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ СОЕДИНЕНИЯ HoCo_2

Руководитель: А.Ю. Карпенков

Тверской государственный университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Соединения RCO_2 являются одним из наиболее перспективных кандидатов для использования в качестве хладагентов в системах магнитного охлаждения в диапазоне температур 30-150 К [1]. Данные соединения проявляют большие магнитообъемные эффекты так же, как $\text{La}(\text{Fe}_x\text{Si}_{1-x})_{13}$, и поэтому ожидается, что температура фазового перехода (T_C) соединений RCO_2 может быть увеличена за счет увеличения постоянной решетки [2].

В работе проведены исследования структурных, магнитотеловых и магнитострикционных свойств литого и быстрозакаленного образцов соединения HoCo_2 . Анализ результатов показал, что образование наноструктурированного состояния посредством быстрой закалки приводит к уменьшению параметров решетки и увеличению температуры Кюри. При образовании нанокристаллического состояния в соединении HoCo_2 порядок фазового перехода изменяется от первого рода ко второму, что приводит к уменьшению магнитокалорического эффекта.

Для объяснения наблюдаемых эффектов была применена теория, предложенная Н. Х. Дюком и Д. Гивордом [3], в которой механизм перехода первого рода связан со скачкообразным изменением объема, возникающим при переходе. Расчеты в рамках модели показали, что быстрая закалка приводит к сильным внутренним напряжениям, которые существенно влияют на намагниченность наноразмерных зерен. В результате энергетический барьер, разделяющий парамагнитное и ферромагнитное состояние, значительно уменьшается в нанокристаллическом HoCo_2 .

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. A.S. Andreenko, K.P. Belov, S.A. Nikitin, A.M. Tishin *Physics-Uspekhi* 158 (1989) 553–579.
2. Araki Y., Ohashi M. Itinerant-electron metamagnetism of magnetocaloric material ErCo_2 and their borides // *Journal of Physics: Conference Series*. – IOP Publishing, 2012. – Т. 400. – №. 3. – С. 032005.
3. Duc N. H. et al. A new approach to itinerant-electron metamagnetism // *EPL (Europhysics Letters)*. – 1992. – Т. 20. – №. 1. – С. 47.

УДК 547.721, 544.47

К.Е. Сальникова

РАЗРАБОТКА КАТАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ ДЛЯ ПРОЦЕССА ГИДРИРОВАНИЯ ФУРФУРОЛА

Руководитель: Э.М. Сульман

Тверской Государственный Университет
Кафедра физической химии

Использование биомассы в качестве возобновляемого сырья для производства химических веществ и топлива представляет растущий интерес, как для научных кругов, так и для промышленности, при этом изучаются многие процессы преобразования биомассы, включая газификацию, пиролиз и гидролиз. Фурфурол является одним из перспективных соединений, полученных из биомассы, обладающий огромным потенциалом для производства большого количества ценных химических продуктов. Гидрированием фурфурола можно получить такие соединения, как фурфуриловый спирт, тетрагидрофурфуриловый спирт, 2-метилфуран, 2-метилтетрагидрофуран, 1,4-пентандиол и 1,2-пентандиол.

Фурфуриловый спирт применяют в разнообразных отраслях промышленности, включая продукцию химикатов, смол, витамина С и лизина. Фурфуриловый спирт получают жидкофазным гидрированием фурфурола, используя медно-хромовые катализаторы [1].

Селективное гидрирование фурфурола привлекло большое внимание к производству фурфурилового спирта, 2-метилфурана и тетрагидрофурфурилового спирта, используя при этом моно- или биметаллические катализаторы, состоящие из Cu, Pd, Ru и Pt. Селективное гидрирование фурфурола в фурфуриловый спирт является сложной задачей, поскольку возможно образование побочных продуктов, таких как тетрагидрофурфуриловый спирт, тетрагидрофуран и др. Поэтому изучаются новые альтернативные каталитические системы для этого процесса [2].

Благодарности: данная исследовательская работа была профинансирована программой «УМНИК-2018» (50098).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Carolina Ramirez-Barria, Mark Isaacs, Karen Wilson, Antonio Guerrero-Ruiz, Inmaculada Rodriguez-Ramos // Applied Catalysis A: General. 2018. Vol. 563. P. 177 – 184.
2. Qingqing Yuan, Damin Zhang, Lennart van Haandel, Feiyang Ye, Teng Xue, Emiel J.M Hensen, Yejun Guan // Journal of Molecular Catalysis A: Chemical. 2015. Vol. 406. P. 58 – 64.

УДК 577.15, 577.112.083

В.А. Сильченко

УСОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ПЕРЕРАБОТКИ БОБОВЫХ В БЕЛКОВЫЕ СУБСТАНЦИИ И БИОТОПЛИВО

Руководитель: Е.А. Прутенская
Тверской государственной технической университет
Кафедра биотехнологии и химии

Целью работы является разработка и усовершенствование технологии, с помощью которой можно превращать растительную биомассу в белковые продукты и малоценные отходы в сырье для энергетической промышленности.

Этапы технологического процесса состоят из стадий: 1) ультразвуковая экстракция белковых веществ при рН 8; 2) получение вторичных энергоресурсов (биоэтанол) из крахмалсодержащих отходов, после извлечения белкового изолята центрифугированием; 3) получение на основе белкового изолята продуктов пищевой и фармацевтической промышленности (методы осаждения и очистка от фенолов).

Полученные ингибиторы исследовали на амилалитическую активность. Было выяснено, что полученные белковые вещества обладают ингибирующей активностью в отношении α -амилазы *Aspergillus oryzae* и панкреатической α -амилазы. Ингибирование полученными препаратами эффективно на первых 10 минутах как для панкреатической, так и для грибной амилаз. В дальнейшем комплекс «фермент-ингибитор» ослабевает и, может быть, даже разрушается.

Полученный белковый продукт лишен крахмала, содержит 89,0% белка, около 5% липидов, фосфаты 19,9%. Крахмалсодержащие компоненты высушивали и исследовали. Массовая доля крахмала в анализируемой смеси 64,9%, не учитывая жмых и фасолевые оболочки, влажность 5,3%, массовая доля фосфатов 6,18%, минеральные вещества 3,66-3,72%.

Полученные вещества можно применять: для получения на основе белкового изолята продуктов пищевой и фармацевтической промышленности, для получения альтернативного биотоплива (биоэтанола) из крахмалсодержащих отходов.

Технология с применением ультразвука позволит увеличить степень чистоты конечного продукта и его биологическую активность, а также повысить биодоступность крахмалсодержащего сырья для трансформации в этанол.

УДК: 538.9

А.И. Синкевич

МАГНИТНО-СИЛОВАЯ МИКРОСКОПИЯ ПОЛЕЙ РАССЕЯНИЯ
ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ $Y_2(Fe_xCo_{1-x})_{17}$

Руководитель: Е.М. Семенова

Тверской государственный университет
Кафедра физики конденсированного состояния

В работе представлены результаты исследования полей рассеяния магнитной доменной структуры (ДС) квазибинарных соединений $Y_2(Fe_xCo_{1-x})_{17}$ ($x=0\div 1$) выполненные методом магнитно-силовой микроскопии (МСМ). В соединениях данного типа в зависимости от относительного содержания Fe и Co меняется тип магнитокристаллической анизотропии, что отражается на конфигурации доменов [1-2].

Образцы для исследования выкалывались из крупнозернистых слитков, полученных методом индукционной плавки в атмосфере аргона. Ориентировка образцов выполнялась для составов с магнитокристаллической анизотропией (МКА) типа «ось легкого намагничивания» в ориентирующем магнитном поле, а для составов с МКА типа «легкая плоскость» – методом Лауэ.

Выявление ДС методом полярного эффекта Керра средствами оптической микроскопии затруднено, т.к. ряд составов находится вблизи спин-переориентационного фазового перехода [3]. Поэтому ДС выявлялась на сканирующем зондовом микроскопе SolverNext (NT-MDT) с применением двухпроходной методики [4].

Исследования выполнялись на базисной и призматической плоскостях. В работе выполнен анализ параметров ДС в зависимости от состава $Y_2(Fe_xCo_{1-x})_{17}$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Perkins R.S., Nagel H. // Physica 80B. 1975. P. 143-152.
2. Dianoux A., Rado C., Servant F., Jannot Y., Mazet T. // Solid State Phenomena. 2017. Vol. 257. P. 68-71.
3. Пастушенков Ю.Г. // Монография. Тверь: Тверской государственный университет. 2007. 151 с.
4. Яминский И.В., Тишин А.М. // Успехи химии. 1999. 68. 187-193.

УДК 631.81

Собранский В.А.

ИЗУЧЕНИЕ ОБЕСПЕЧЕННОСТИ СЕЛЬСКОХОЗЯЙСТВЕННЫХ КУЛЬТУР ЭЛЕМЕНТАМИ ПИТАНИЯ И ИХ ВЛИЯНИЕ НА РАЗВИТИЕ РАСТЕНИЙ

Руководитель: Е.Р. Усовик

Школа МБОУ «СШ»№ 45г. Тверь

Макро- и микроэлементы в растениях не могут заменять другие питательные вещества, а лишь дополняют их действие, при этом не один из них не может быть использован вместо другого. Недостаток или избыток в почве биогенных элементов вызывает у растений значительные отклонения в росте и развитии, стимулируя их или угнетая, потому что все процессы в живом организме происходят при содействии биологически активных веществ [1] [2]. Цель работы: изучение обеспеченности сельскохозяйственных культур элементами питания и их влияние на развитие растений.

В качестве тест-объекта была использована рожь, так как она хорошо «откликается» на минеральные удобрения. В работе была подтверждена гипотеза, что макро- и микроэлементы способны накапливаться в различных частях растений. Например, кальций в большей степени находится в опорных структурах и оболочках семян. Магний был обнаружен во всех структурах растений, поэтому для изучения влияния макроэлементов на развитие растений были выбраны растворы с сульфатом магния.

Было показано, что оптимальное комплексное питание стимулирует развитие корневой системы: она сильнее ветвится и глубже проникает в почву. Комплексные добавки также стимулируют образование защитного чехла вокруг зоны деления корня, тем самым в большей степени происходит защита растения от инфекций.

При внесении удобрений растение не только получает дополнительно необходимые ему усваиваемые питательные вещества, но и лучше использует элементы питания самой почвы. При необходимости применения удобрений следует учитывать признаки недостатка и избытка отдельных элементов питания. При сильном недостатке или избытке элементов питания растения плохо растут и плодоносят. В таких случаях качество урожая оказывается низким. В нашем случае произошло торможение процесса прорастания при использовании минеральной подпитки при выращивании в грунте. Вероятнее всего это связано с избытком макроэлементов в грунте.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Максименко Е.П. Научные основы применения комплексных микроудобрений в рисоводстве Е.П. Максименко, А.Х. Шеуджен// Научный журнал КубГАУ.- №107(03).-2015г.-1-24.
2. Гольд В.М. Физиология растений / В. М. Гольд, Н. А. Гаевский, Т. И. Голованова и др.// Сибирский федеральный университет, 2008 .-150с.

УДК 66.067.2:665.76

А.В. Соколов

**СПОСОБ ОЧИСТКИ ОТРАБОТАННОГО УГЛЕВОДОРОДНОГО
РАСТВОРИТЕЛЯ В ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ ВОЛОКОН ИЗ
СВЕРХВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛИЭТИЛЕНА МЕТОДОМ ГЕЛЬ
- ФОРМОВАНИЯ**

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

В процессе получения волокон из сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ) методом гель-формования начальным этапом является растворение полимера в вазелиновом масле (ВМ) при повышенной температуре (180⁰С) и интенсивном перемешивании [Пахомов П.М., Галицын В.П. и др. *Высокопрочные и высокомолекулярные полимерные волокна* – Тверь, ТвГУ, 2012. – 327 с.]. В результате механо- и термодеструкции макромолекул СВМПЭ могут происходить их разрывы и образовываться низкомолекулярные соединения и олигомеры. В ванне охлаждения (40⁰С) продукты распада СВМПЭ претерпевают фазовый распад и переходят одновременно с основной массой СВМПЭ в состояние твердого эластичного геля. На этапе ориентационного вытягивания некоторая их часть отжимается из деформируемой гель-нити вместе с ВМ, а другая часть остаётся внутри нити и на ее поверхности. Накопление продуктов распада в растворителе вызывает прилипание нити к транспортирующим галетам и обрыв ее отдельных филаментов. Кроме того, между филаментами образуются склейки, ухудшающие качество готовой продукции. Цель работы – разработка способа очистки растворителя от продуктов деструкции.

В работе исследовалась возможность применения метода фильтрации с использованием комбинированных фильтров. Установлено, что очистку ВМ от продуктов деструкции СВМПЭ, обеспечивающую возможность его повторного использования, следует осуществлять методом вакуумного фильтрования на комбинированной фильтрующей перегородке, включающей слой нетканого материала «Урса» (ГОСТ 11499-95) толщиной около 25 мм и два слоя фильтровальной бумаги средней скорости фильтрации (ГОСТ 12026-76). Значительная пропускная способность и скорость фильтрования, а также высокая чистота полученного фильтрата позволяют охарактеризовать комбинированную фильтрующую перегородку из материала «Урса» и бумаги как привлекательную для практического использования.

УДК: 691.675

А.Р. Тагиева

КОРРЕЛЯЦИИ «СТРУКТУРА-ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ»
ПРОСТЫХ ЭФИРОВ. ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД

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

Систематические сведения о термодинамических характеристиках эфиров в ряде случаев противоречивы. Поэтому нужны новые эффективные расчётные схемы, среди которых важное место в настоящее время занимают теоретико-графовые методы.

Решались следующие задачи:

- анализ экспериментальных данных по исследуемым соединениям;
- отбор топологических индексов (ТИ);
- построение и анализ графических зависимостей «Корреляции «структура-энтальпия образования» – ТИ»;
- построение расчётных схем;
- проведение численных расчётов.

В работе был проведён отбор топологических индексов с учётом их дискриминирующей способности, установлена аналитическая зависимость $P = f(\text{ТИ})$ отвечающая наиболее тесной корреляционной связи между корреляцией «структура-энтальпия образования» и ТИ [1;2].

Также в работе обсуждены возможности теоретико-графового подхода в построении и интерпретации аддитивных схем расчёта и прогнозирования простых эфиров.

В ходе работы построены и проанализированы графические зависимости «Корреляции «структура-энтальпия образования» – ТИ».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Pedley I.B., Naylor R.D., Kirly S.P. Thermochemical data of organic compounds. L.; N.-Y.: Chapman and Hall. 1986. P.87-232.
2. Lange's Handbook of Chemistry / Editor: J.A. Dean. (15th Edition), McGraw-Hill. 1999. [Электронный ресурс]. — URL: <http://fptl.ru/biblioteka/spravo4niki/dean.pdf> (дата обращения: 10.12.17).

УДК: 544.72; 547.38

М.А. Ульянова

СИНТЕЗ КАТИОННЫХ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ НА ОСНОВЕ 2-(ДИМЕТИЛАМИНО)ЭТАНОЛА И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ СВОЙСТВ

Руководитель: Ю.А. Рыжков

Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

В настоящей работе проведен синтез катионных ПАВ из класса ЧАС на основе 2-диметиламиноэтанол (ДМАЭ) по схеме (рис. 1).

Четвертичные соли диметиламиноэтанол и его сложного эфира получены кватернизацией алкилгалогенидами в присутствии в качестве растворителя абсолютного ацетона при 60–70°C в течение 4–5 часов. Сложный эфир ДМАЭ получен азеотропной этерификацией лауриновой кислоты при 150–160°C в течение 4 часов.

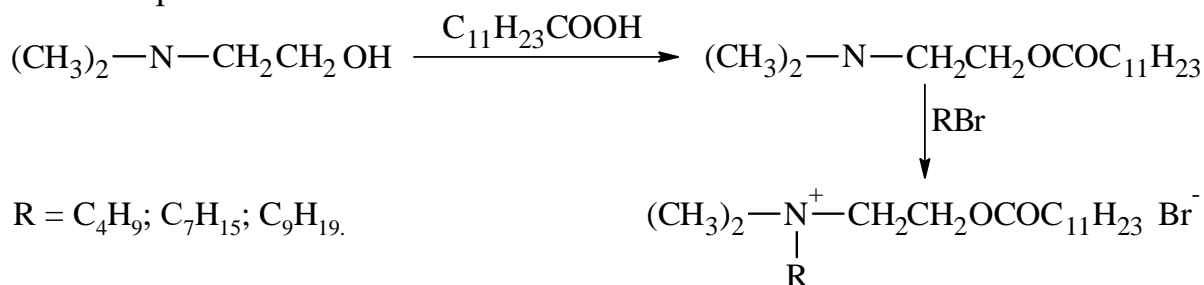


Рис. 1. Схема синтеза катионных ПАВ

2-(Диметиламино)этиллаурат, очищенный вакуумной перегонкой, – бесцветная маслянистая жидкость, малорастворимое ПАВ.

Продукты кватернизации, промытые абсолютным эфиром и очищенные двукратной перекристаллизацией из ацетона и смеси бутанол-этилацетат (1:1), представляют собой белые кристаллические вещества.

Строение и состав полученных соединений подтверждены данными ИК-спектроскопии и качественными реакциями на катионные ПАВ.

В ИК-спектрах 2-(диметиламино)этиллаурата наблюдаются полосы поглощения основных валентных колебаний сложноэфирного карбонила (1739,13 см⁻¹) и простой эфирной связи (1170,77 см⁻¹). Пробой Бельштейна доказано наличие галогенов в составе синтезированных соединений. Принадлежность к катионным ПАВ подтверждена тестом с применением индикатора бромфенолового синего.

Впоследствии кондуктометрическим и рефрактометрическим методами были определены ККМ синтезированных ПАВ, проведена оценка их термодинамических характеристик и исследована способность к солубилизации.

УДК 544.18+547.495.9

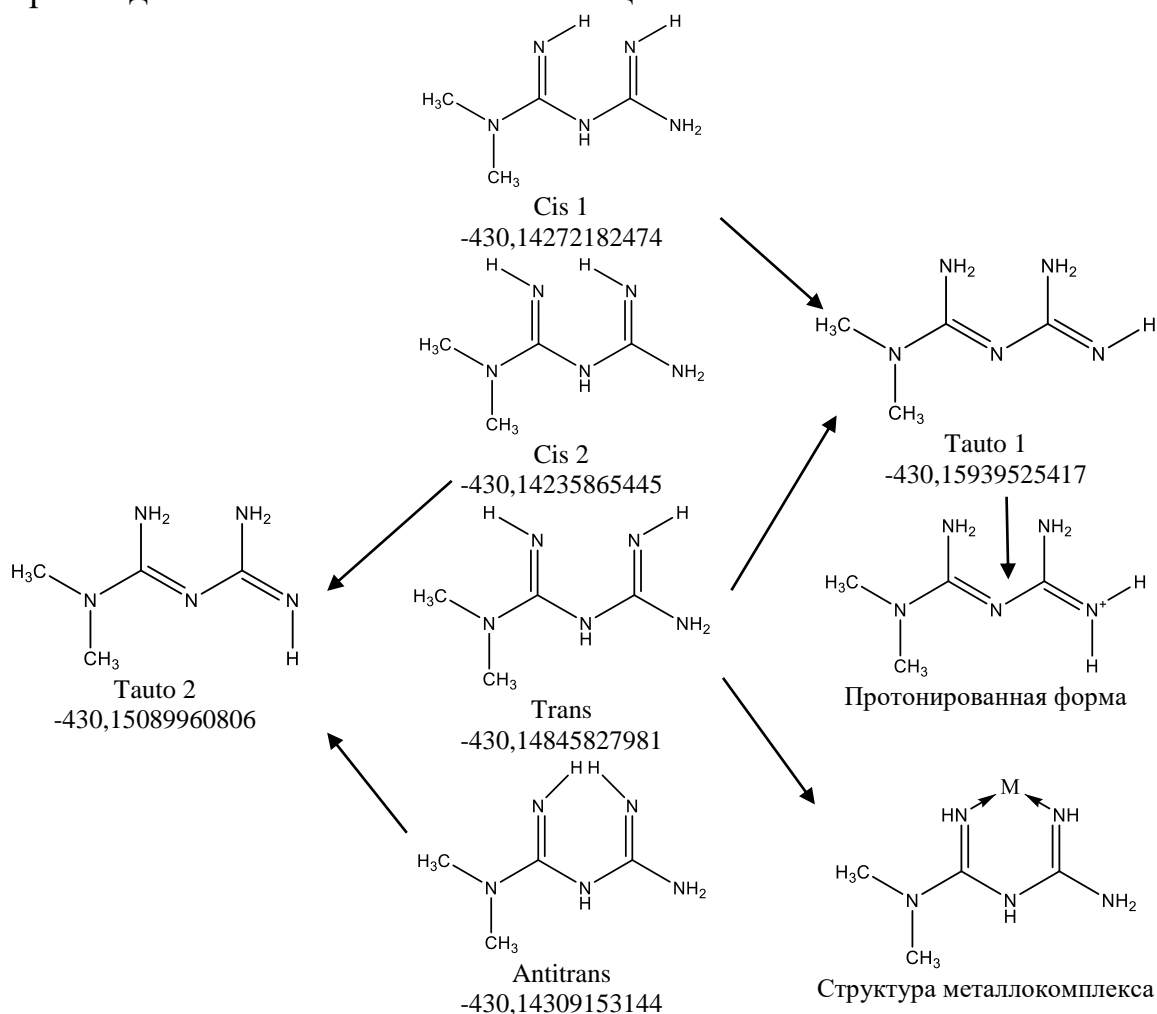
О.И. Цветкова, А.А. Щеглова

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗОМЕРНЫХ ФОРМ МОЛЕКУЛЫ N,N-ДИМЕТИЛБИГУАНИДА

Руководитель: В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Методом Хартри–Фока с использованием набора базисных функций 6-31G**+ проведен расчёт структуры и энергии (в единицах Хартри) возможных изомерных и таутомерных форм молекулы N,N-диметилбигуанида, широко используемого в качестве лекарственного средства метформин для лечения сахарного диабета. Показано, что оптимальной является форма Tauto 1, которой соответствует моногидрохлорид метформина, применяемый в медицине. Форма Trans реализуется в металлокомплексах, образование которых в этом случае сопровождается замыканием хелатного цикла.



УДК: 547-313

И.В. Чиликина

ПРОЦЕСС ПОЛИКОНДЕНСАЦИИ МОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ С АЗЕОТРОПНОЙ ОТГОНКОЙ ВОДЫ

Руководитель: С.А. Темникова
Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

Молочная кислота (МК) легко образует циклический димер – лактид, который в свою очередь полимеризуется с образованием высокомолекулярных полимеров (polylactide – PLA).

Синтез полилактида может быть осуществлен различными способами: поликонденсацией молочной кислоты или непосредственно через ее димер (дилактид) путем полимеризации с раскрытием кольца, в результате чего образуются полимерные цепочки, состоящие из олигомеров и низкомолекулярного полилактида.

Цель работы – исследование процесса олигомеризации молочной кислоты при использовании различных азеотропообразователей.

В работе использовали 80%-ную молочную кислоту производства PURAC, азеотропные смеси и катализатор оксид цинка.

В колбу загружали молочную кислоту и растворители: толуол или тетрахлорметан. Концентрирование проводили с помощью простой перегонки при атмосферном давлении, когда вода переставала отгоняться, в реакционную смесь добавляли катализатор в количестве 1,5% от массы олигомера [1].

Таблица 1.

Молярная масса олигомера и его выход в зависимости от выбранного азеотропа

Азеотроп	m олигомера, г	Кислотное число, мг/г	M, г/моль	η олигомера, %
МК+толуол	33,17	220,89	254,02	39,55
МК+CCl ₄	15,78	341,33	164,33	29,07

Эффективность процесса олигомеризации оценивали по молекулярной массе олигомера и его выходу.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тимченко Т.В., Щербакова Л.И., Компанцев В.А. Поли-D,L-лактид-ко-гликолид: методы получения, свойства и использование для разработки лекарственных препаратов со средствами микро- и нанодоставки // Современные проблемы науки и образования. М., 2015. №4. С. 559.

УДК: 538.956

Г.С. Шишков

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ ФЕРРИТ БАРИЯ –
КЕРАМИКА ТИТАНАТА БАРИЯ И ФЕРРИТ БАРИЯ – КЕРАМИКА
НИОБАТА НАТРИЯ-КАЛИЯ

Руководитель: О.В. Малышкина

Тверской государственной университет
Кафедра прикладной физики

В работе исследованы частотные зависимости диэлектрической проницаемости композитов на основе керамики феррита бария (BaFe), титаната бария (BaTiO₃) и ниобата натрия-калия (KNN). Синтез керамик KNN и BaTiO₃ проводился по стандартным технологиям. Спекание образцов композитов проводилось при T = 1100 °C. Процентное вхождение BaFe в композит с KNN составило 50 об. %, с BaTiO₃ 20 об. %.

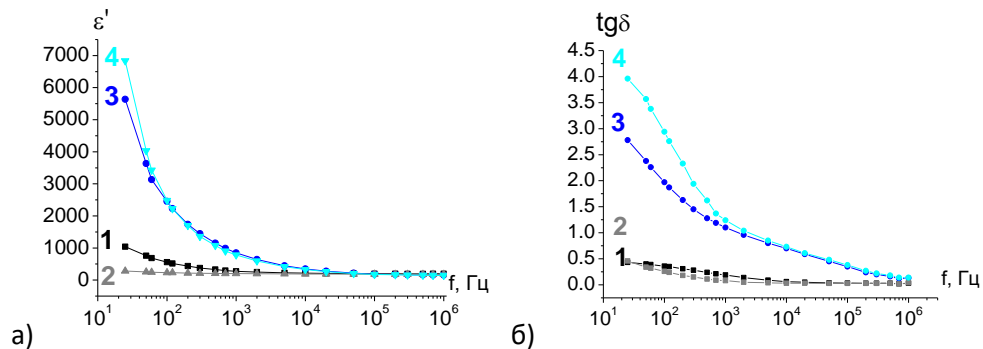


Рис. 1. Диэлектрическая проницаемость (а) и тангенс угла диэлектрических потерь (б) керамики KNN (1,2) и с примесью BaFe (3,4) до (1,3) и после (2,4) нагрева

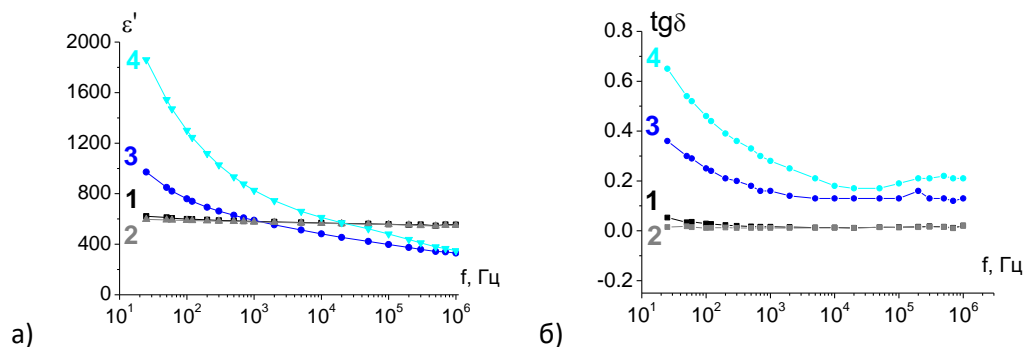


Рис. 2. Диэлектрическая проницаемость (а) и тангенс угла диэлектрических потерь (б) керамики BaTiO₃ (1,2) и с примесью BaFe (3,4) до (1,3) и после (2,4) нагрева

В результате нагрева образцов керамики KNN и BaTiO₃ до температуры Кюри произошло уменьшение диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь на низких частотах (рис.1,2), в тоже время, у образцов с примесью феррита бария на низких частотах наблюдается значительное увеличение диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь.

УДК 541.49:615.33

К.А. Шухина

ПРОЦЕССЫ САМОСБОРКИ В НИЗКОКОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ВОДНЫХ СИСТЕМАХ ГЛИЦИН- AgNO_3 -ПВС

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

Процесс самосборки в системах с низкой концентрации исходных компонентов был исследован на примере водных растворов простейшей аминокислоты глицин (Gly), нитрата серебра и поливинилового спирта (ПВС). Объектами исследования были серии образцов с различным содержанием аминокислоты и нитрата серебра, аминокислоты и ПВС, а также Gly- AgNO_3 -ПВС. Для получения систем были использованы водные растворы ПВС (5 и 10%), Gly и AgNO_3 – 0,01 М. Из исследуемых систем были получены прозрачные плёнки методом отлива из раствора в чашке Петри. Полученные образцы были изучены с помощью различных физико-химических методов: УФ, ИК-спектроскопии и динамического светорассеяния.

Электронные спектры низкоконцентрированных образцов были получены на спектрометре “Evolution Array” (“Thermo-Scientific”) в кварцевой кювете с толщиной слоя 2 мм. ИК-спектры плёнок с различным соотношением компонентов Gly-ПВС регистрировали на спектрометре “Vertex 70” с помощью приставки НПВО “Golden Gate” с алмазным кристаллом. Кинетику формирования наноагрегатов в образцах с переменным составом изучали на приборе “Zetasizer NanoZS” в конфигурации обратного рассеяния под углом 173° , которая обеспечивает максимальную чувствительность прибора.

С помощью УФ спектроскопии было установлено, что процессы самоорганизации в системах зависят от состава исследованных образцов, от концентрации и соотношении исходных компонентов. В ИК-спектрах полученных плёнок наблюдаются различия в области валентных и деформационных колебаний гидроксильной и аминогрупп, что можно объяснить разной степенью их участия в меж- и внутримолекулярном взаимодействии в процессе самосборки. Методом динамического светорассеяния для систем Gly-ПВС- AgNO_3 получены моно- или бимодальные распределения агрегатов по размерам, что свидетельствует о взаимном влиянии молекул исходных компонентов друг на друга.

Работа выполнена в рамках выполнения базовой части государственного задания в сфере научной деятельности (Проект №4.5508.2017/БЧ) с использованием оборудования лаборатории спектроскопии ЦКП ТвГУ

Стендовая секция конференции

УДК 520.35

Али М., Иванова П.В, Рыбина С.С., Воронцов М.С., Петухов М.С.

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНЫХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ НА РАЗРЕШЕНИЕ АСТРОФИЗИЧЕСКИХ АКУСТООПТИЧЕСКИХ ФИЛЬТРОВ НА ОСНОВЕ ПАРАТЕЛЛУРИТА

Руководитель: А.И. Колесников
Тверской государственный университет
Кафедра прикладной физики

С помощью электронно-перестраиваемого акустооптического фильтра [1,2], установленного на касегреновском телескопе с диаметром зеркала 600 мм (рисунок), в октябре 2018 г. получены данные о влиянии неоднородностей кристалла парателлурита (TeO_2) на точность измерения степени поляризации излучений нескольких астрофизических объектов – звезд и галактик. Установлено, что в образцах с вариациями показателей преломления не более 10^{-5} возможно достижение точности измерения не хуже 0,2 %.



Рисунок – Группа сотрудников ТвГУ и МИСиС у телескопа Южной станции ГАИШ МГУ им. П.К Штернберга с установленным на нём акустооптическим фильтром-поляриметром на основе кристалла парателлурита

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Молчанов В.Я., Китаев Ю.И., Колесников А.И. и др. Теория и практика современной акустооптики. М.: МИСиС. 2015. 459 С.
2. Molchanov V.Ya., Chizhikov S.I., Anikin S.P., et. al. An acousto-optical spectral imager for astrophysical observation // Proc. 5th World Congress on Ultrasonics WCU-2003. Paris. France 2003. P.405-408.

УДК 54.062

А.А. Андрианова

АНАЛИЗ СОДЕРЖАНИЯ МАГНИЯ В МОРСКОЙ КАПУСТЕ И ПИЩЕВОЙ ПРОДУКЦИИ НА ЕЕ ОСНОВЕ

Руководитель: В.М. Никольский
Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Актуальность. Магний является важнейшим внутриклеточным элементом. Этот металл активизирует более трехсот ферментативных реакций в живом организме, а также укрепляет иммунную систему. И все же большая часть населения не потребляет его в необходимых количествах [1]. Поэтому контроль содержания магния в продуктах питания имеет большое значение.

Цель работы. Анализ на содержание магния в морской капусте может быть осуществлен различными методами. Нами предложен фотометрический метод, основанный на образовании окрашенных адсорбционных соединений магния.

Для количественного определения магния в анализируемой продукции из морской капусты осуществили озоление образцов с последующим растворением соляной кислотой в мерной колбе. Аликвоту раствора помещали в мерную колбу, добавляли 10 мл $\text{NH}_2\text{OH}\cdot\text{HCl}$, 5 мл раствора титанового желтого, 20 мл раствора NaOH [2]. Измерение оптической плотности производили в диапазоне длин волн $\lambda=400-600$ нм.

В работе использовалась продукция из морской капусты марок «ВкусВилл», «Fish House», «Круглый год», «LEOR».

Результаты анализа представлены в таблице.

Таблица 1.

Содержание магния в анализируемых пищевых продуктах на основе морской капусты

	Норма*	«ВкусВилл»	«Fish House»	«Круглый год»	«LEOR»
Mg, мг/100г	170	144±4,2	163±3,0	156±4,1	165±3,0

*О.А. Громова О.А. Пищевые продукты: содержание и усвоение магния.

Вывод. Анализ показал, что во всех анализируемых образцах присутствие магния колеблется в интервале $140\pm 4,2 - 165\pm 3,0$ мг/100г.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Скальный А.В. Химические элементы в физиологии и экологии человека / А. В. Скальный. – М.: Издательский дом «ОНИКС 21 век»: Мир, 2004. - 218 с.
2. Тихонов В. Н. Аналитическая химия алюминия / В. Н. Тихонов. - М.: Наука, 1971. – 135 с.

УДК: 542.973+544.473-039.63-386

Е.С. Бахвалова

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ РЕАКЦИИ СУЗУКИ НА ПОВЕДЕНИЕ ПАЛЛАДИЙ СОДЕРЖАЩЕГО ПОЛИМЕРНОГО КАТАЛИЗАТОРА

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

Реакция кросс-сочетания Сузуки – одна из самых известных широко используемых в промышленности одностадийных реакций образования углерод-углеродной связи [1].

В качестве аналогов традиционных катализаторов реакции Сузуки, повторное использование которых невозможно, рассматривают безлигандные каталитические системы. В катализаторах данного типа палладий, как правило, существует в нескольких формах, которые претерпевают взаимные превращения в ходе каталитического цикла, что усложняет исследование кинетических особенностей реакции [2].

Данная работа посвящена исследованию протекания реакции кросс-сочетания Сузуки в присутствии полимерной палладий содержащей каталитической системы. Катализатор был синтезирован методом пропитки по влагоемкости сверхсшитого полистирола марки MN270 раствором прекурсора палладия в ТГФ. В качестве прекурсора использовали $\text{Pd}(\text{CH}_3\text{COO})_2$.

Реакция между 4-броманизолом и фенилбороновой кислотой проводилась в термостатируемом стеклянном реакторе качания периодического действия в атмосфере азота в присутствии катализатора и NaOH. Была проведена серия опытов с варьированием концентрации основания, фенилбороновой кислоты и 4-броманизола, массы катализатора. Пробы анализировались методом GS-MS (Shimadzu GCMS-QP2010S). В результате было обнаружено, что использование каталитической системы 2%-Pd/MN270 позволяет достичь практически полной конверсии 4-броманизола за 1 час реакции с высокой селективностью 4-метоксибифенилу.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-08-00429).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gujral S.S. // IGJPS. 2012. V. 2. Iss. 4. P. 351-367.
2. Eremin D.B., Ananikov V.P. // Coord. Chem. Rev. 2017. V. 346. P. 2-19.

УДК: 544.473:66.097.5

А.В. Бертова, Д.Д. Гончар

КАТАЛИЗАТОРЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИАЛКИЛАМИНОВ ДЛЯ
РЕАКЦИИ СЕЛЕКТИВНОГО ГИДРИРОВАНИЯ ТРОЙНОЙ СВЯЗИ
ДИМЕТИЛЭТИНИЛКАРБИНОЛА

Руководитель: Л.Ж. Никошвили

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Селективное гидрирование алкинолов требует тщательного подбора катализаторов, которые должны проявлять высокую селективность по отношению к олефиновым спиртам. Исторически первым промышленным катализатором гидрирования алкинолов является катализатор Линдляра (Pd/CaCO_3), модифицированный ацетатом свинца и хинолином. Использование данного катализатора позволяет достичь 95% селективности по олефиновому спирту при 100% конверсии субстрата, однако применение указанных модификаторов приводит к загрязнению целевых продуктов и экологически небезопасно.

В рамках данной работы была синтезирована серия палладиевых катализаторов гидрирования с использованием в качестве носителей активного металла полиалкиламинов, предоставленных сотрудниками АО «Перспективные медицинские технологии» (Москва) Морозовым А.С. и Бессоновым И.В. Полиалкиламины отличались количеством сшивающего агента (эпихлоргидрина) и способом полимеризации (термическая полимеризация или криополимеризация).

Катализаторы с расчетным содержанием палладия 1%(масс.) были приготовлены методом пропитки полиалкиламинов раствором $\text{Pd}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ заданной концентрации в этаноле с последующим высушиванием до постоянной массы при 75°C. Синтезированные образцы были протестированы в реакции селективного гидрирования диметилэтинилкарбинола до диметилвинилкарбинола. Реакция проводилась в термостатируемом стеклянном реакторе качания при атмосферном давлении водорода при температуре 65°C, в качестве растворителя использовался этанол.

По результатам исследования было показано, что использование полиалкиламинов в качестве носителей, в зависимости от количества сшивающего агента и способа полимеризации, а также от метода пропитки ацетатом палладия, позволяет синтезировать активные и селективные (селективность по диметилвинилкарбинолу не менее 97%) катализаторы гидрирования диметилэтинилкарбинола в мягких условиях в экологически безопасном растворителе.

УДК: 543.454

Е.С. Биберина, Л.А. Новикова

ПОЛЯРИМЕТРИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ИЗОМЕРОВ КОМПЛЕКСОНОВ ПРОИЗВОДНЫХ ДИКАРБОНОВЫХ АМИНОКИСЛОТ

Руководитель: В.М. Никольский
Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Синтезированы комплексоны: L-КМАК (L-карбоксиметил-аспарагиновая кислота), D-КМАК (D-карбоксиметиласпарагиновая кислота), L-КМГК (L-карбоксиметилглутаминовая кислота). Для синтезированных комплексонов измерены углы вращения плоскости поляризации. Величины углов измеряли на поляриметре круговом СМ-3. Навески массой 2 мг комплексона растворяли в 10 мл дистиллированной воды и проводили измерение в течение 30 минут с момента их приготовления при $t=20^{\circ}\text{C}$. Показания снимали не менее 5 раз. За окончательный результат принимали среднее арифметическое значение.

В таблице представлены условия снятия показаний углов вращений плоскости поляризации и среднеарифметические результаты расчёта удельного вращения комплексонов измерений. Для сравнения полученных данных, в таблице также представлены значения удельного вращения исходных веществ, использованных для синтеза комплексонов.

Таблица.

Вещество	Концентрация р-ра, %	α_0	$[\alpha]$
L-КМАК	2	0	$+24^{\circ}$
D-КМАК	2	0	$-[26-30]^{\circ}$
L-КМГК	1	0	$+ [32-36]^{\circ}$
L-Asp*	2	-	$+20^{\circ}$
D-Asp*	2	-	$-[22-26]^{\circ}$
L-Glu*	1	-	$+ [28-32]^{\circ}$

α_0 – угол вращения плоскости поляризации воды; $[\alpha]$ – удельное вращение плоскости поляризации исследуемого раствора.

*Значения удельного вращения аминокислот взяты с паспорта производителя.

Из таблице видно, что величина удельного вращения для L-Asp и D-Asp отличается на $2-6^{\circ}$, то же явление наблюдается и для значений L-КМАК и D-КМАК. В свою очередь значения удельного вращения L-Glu выше значений L-Asp на $8-12^{\circ}$. Исходя из этих наблюдений можно сделать вывод о том, что с увеличением цепи на одну метиленовую группу увеличивается и удельное вращение.

УДК: 543.621

А.А. Варламова

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ СОЗДАНИЯ ИНДИКАТОРНОГО МАТЕРИАЛА ДЛЯ ЭКСПРЕСС-АНАЛИЗА НИТРАТ-ИОНОВ

Руководитель: В.М. Никольский
Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Для аналитического экспресс-контроля содержания нитратов в продуктах растениеводства, воде, пищевых продуктах и сточных водах различного происхождения используются многокомпонентные химические индикаторы на твердофазном носителе. Недостатками существующих химических индикаторов является многокомпонентность, короткий срок годности входящих в них реактивов (например, 1-нафтиламин) [1].

Новизна проекта заключается в создании дешевой, компактной, удобной, простой в использовании и, самое главное, не содержащей вредных веществ в своем составе индикаторной бумаги для экспресс-анализа нитрат-ионов. В рецептуру запатентованной индикаторной бумаги вместо кислотных реагентов и маскирантов, включен универсальный экологически безопасный комплексон - N-(карбоксиметил)аспарагиновая кислота (КМАК) [2], что упрощает устройство. Кроме того, в слое с тестом Грисса вместо канцерогенного 1-нафтиламина используется безопасный диметил-1-нафтиламин, который по химическому действию аналогичен 1-нафтиламину.

Нами предлагается простейшее устройство, состоящее из трех отдельных полосок фильтровальной бумаги, пропитанных компонентами, закрепленных на полимерной подложке. Работа этого устройства осуществляется в процессе смачивания полосок бумаги анализируемым раствором. Первый слой индикаторной бумаги для экспресс-анализа содержания нитратов пропитан раствором экологически безопасного комплексона КМАК; на второй слой нанесен цинковый порошок, а третий слой, содержит модифицированный состав - диметил-1-нафтиламин для осуществления реакции Грисса.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Уильямс У. Дж. Определение анионов: справочник. Перевод с англ.-М.: Химия, 1982 - С. 145.
2. Loginova E.S., Nikol'skii V.M. Tolkacheva L.N. et all. Synthesis and some properties of complexones, succinic acid derivatives // Russian Chemical Bulletin, 2016, V. 65, No 9, P. 2206-2210, DOI: 10.1007/s11172-016-1569-7

УДК 537.6

П.С. Васин

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ КЕРРОВСКОГО КОНТРАСТА
В ФЕРРИМАГНИТНЫХ СПЛАВАХ Gd-Co

Руководитель М.Б. Ляхова

Тверской государственный университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Методом полярного эффекта Керра исследована перестройка доменной структуры сплава $GdCo_{4,25}$ во внешних магнитных полях. Сплав по данным структурного анализа содержал две ферримагнитные фазы: $GdCo_5$ и Gd_2Co_7 .

Обнаружено, что в состоянии магнитного насыщения в образце в поляризованном свете наблюдаются «домены», границы которых локализованы на межфазных границах, причем изменение направления внешнего насыщающего поля на противоположное приводит к обращению контраста (рисунок).

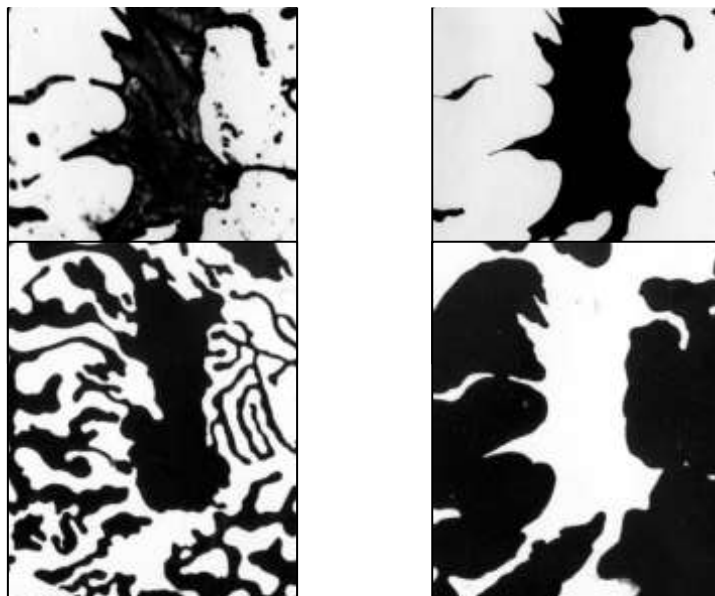


Рисунок – Микроструктура (а) и картины керровского контраста на базисной плоскости образца $GdCo_{4,25}$ в полях +10 (б), 0 (в) и -10 кЭ (г)

Предложено объяснение наблюдаемому эффекту. В соединении $GdCo_5$ магнитный момент у подрешетки кобальта больше, чем у подрешетки гадолиния, а в соединении Gd_2Co_7 – обратное соотношение моментов. В связи с этим в состоянии магнитного насыщения вдоль поля ориентированы магнитные моменты подрешеток кобальта в фазе $GdCo_5$ и гадолиния в фазе Gd_2Co_7 . Магнитооптический контраст в образце $GdCo_{4,25}$ в состоянии насыщения может быть обусловлен преимущественным вкладом в эффект Керра одной из магнитных подрешеток. В монокристаллах YCo_5 , в которых подрешетка иттрия не имеет магнитного момента, доменная структура выявляется методом эффекта Керра, это свидетельствует в пользу доминирующей роли подрешетки кобальта.

УДК: 54.07, 543.07

М. В. Вахрушкина, В. С. Туркина

ИОНОСЕЛЕКТИВНЫЕ ЭЛЕКТРОДЫ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ НЕКОТОРЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ

Руководитель: Рясенский С.С.

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

В медицинской практике используется значительное количество лекарственных веществ, относящихся к группе миорелаксантов и противовирусных препаратов. Некоторые из них в качестве действующих веществ представляют собой органические катионы. Поэтому целью настоящей работы была разработка ионоселективных электродов (ИЭ) с откликом на катионы римантадина и толперизона.

ИЭ имеют ряд преимуществ перед классическими мембранными электродами. В своей работе мы использовали ионно - электронный трансдюсер на основе полианилина для стабилизации потенциала на границе: ионоселективная мембрана – токоотвод. Основным чувствительным элементом ИЭ являлась ионоселективная мембрана, состоящая из поливинилхлорида (ПВХ), дибутилфталата (ДФФ) и электрод – активного вещества (ЭАВ). ЭАВ представляло собой ионный ассоциат фосфорновольфрамовой кислоты с римантадином для электрода на римантадин; и ассоциат кремнемолибденовой кислоты с толперизоном для электрода на толперизон. Состав ионоселективных мембран ПВХ:ДФФ:ЭАВ = 40:55:5 (массовые доли). Ионно - электронный трансдюсер: ПВХ:ДФФ:полианилин = 40:25:35. Конструкции изготовления ИЭ содержали графитный стержень в качестве токоотвода, на который последовательно наклеивались ионно – электронный трансдюсер и ионоселективная мембрана. Электродные функции электродов имеют протяженный линейный участок в интервале $pC=1-4,5$. Рабочий диапазон изготовленных электродов равен 2-5 рН. Было определено содержание римантадина и толперизона в готовых лекарственных формах методами прямой ионометрии и потенциометрического титрования.

Исходя из изложенного выше, можно считать, что цель работы достигнута и изготовленные ионоселективные электроды могут найти практическое применение.

УДК 537.226.4

Е.В Вахтеров

ТЕРМОИНДУЦИРОВАННЫЕ ПРОЦЕССЫ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ ХРОМСОДЕРЖАЩИХ КРИСТАЛЛОВ ТРИГЛИЦИНСУЛЬФАТА

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

Настоящая работа поставлена с целью получения информации о термоиндуцированных процессах переключения хромсодержащих кристаллов триглицинсульфата (ТГС). Кристаллы относятся к коллинеарным сегнетоэлектрикам, поэтому непосредственно поляризационно-оптическим методом их доменная структура не выявляется. Исследования проведены методом теплового эффекта Баркгаузена (ТЭБ). Интенсивность процессов перестройки доменной структуры кристаллов оценивалась по скорости следования скачков переключения [1, 2].

Установлено, что при нагревании кристаллов от $T=0^{\circ}\text{C}$ скачки переключения появляются при $T\sim 10^{\circ}\text{C}$. Наиболее интенсивно доменная структура перестраивается в области фазового перехода, происходящего при температуре порядка 50°C . При последовательных циклах нагревания образцов интенсивность доменных процессов возрастает вследствие их отжига при фазовом переходе.

Интенсивность процессов переключения кристаллов группы ТГС существенно зависит от скорости их нагревания. Кривая зависимости интегрального числа скачков переполаризации от скорости нагревания образца $\{N(v)\}$ носит экстремальный характер. Экстремумы лежат в интервалах скоростей $(0,2-0,8) \text{ K}\cdot\text{c}^{-1}$. Однозначной концентрационной зависимости их положения не прослеживается.

При малой скорости изменения температуры доменная структура перестраивается медленно, вблизи фазового перехода - наиболее интенсивно. При дальнейшем увеличении скорости нагревания т.е при скоростях, больших $v(N_{\text{max}})$, число скачков Баркгаузена вновь уменьшается.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Рудяк В.М. Процессы переключения в нелинейных кристаллах. М: Наука. 1986. 244 с.
2. Большакова, Н.Н., Зазнобин Т.О., Иванов В.В., Муравьева Е.Б., Педько Б.Б. // Физика твердого тела. 2006. Т.48. Вып.6. С.967-968.

УДК: 544.72

О.Ю. Взорова, И.С. Климентьев

МИКРОЭМУЛЬСИИ ДЛЯ ОЧИСТКИ ОТ МАСЕЛ И ЗАГРЯЗНЕНИЙ ВОДНЫХ СРЕД

Руководитель: Н.В. Веролайнен
Тверской государственный университет
Кафедра органической и биоорганической химии

Одним из перспективных методов очистки сточных вод от масляных загрязнений является метод ультрафильтрации с использованием мембранного фильтра. Использование такого фильтра возможно в случае перевода масляных загрязнений в устойчивые эмульсии. Устойчивые эмульсии могут быть получены при использовании эмульгаторов поверхностно-активных веществ различных классов в зависимости от метода их стабилизации.

В настоящей работе в качестве модели исследовали систему, содержащую вакуумное масло и водные растворы оксиэтилированного спирта ОП-10. Для нахождения температуры инверсии фаз (ТИФ) прямые эмульсии масла в водных растворах эмульгатора с концентрациями 25-50% подвергали нагреву в термостате с шагом в 2°C. Температуру инверсии фаз подтверждали с помощью определения эквивалентной электропроводности эмульсий масла в водных растворах ОП-10 [1]. Обращение фаз подтверждали с помощью красителя Судан III.

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

Найденные в работе температуры инверсии фаз системы вакуумное масло – растворы ОП-10 могут быть использованы для очистки от масляных загрязнений сточных вод на предприятиях металлургической и машиностроительной промышленности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Холмберг К., Йенссон Б., Кронберг Б., Линдман Б. Поверхностно-активные вещества и полимеры в водных растворах/ Холмберг К.; под ред. Ямпольской Г.П. – М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2015. – 530 с.

УДК: 541.62: 544.18

А.А.Ганичева

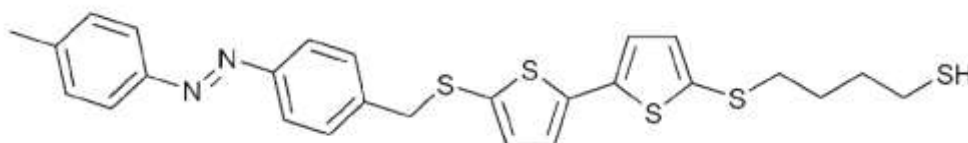
КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МОНОСЛОЯ ОЛИГОТИОФЕНА. ОПТИМИЗАЦИЯ ГЕОМЕТРИИ

Руководитель: Павлов А.С.

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

В последнее время широкое развитие получило изучение органических материалов на основе соединений олигомеров, которые имеют множество возможностей для использования их в молекулярной электронике и фотонике. Одними из таких соединений является класс молекул олиготиофенов и их производных. Молекулы олиготиофенов обладают рядом таких преимуществ, как возможностью образовывать кристаллическую структуру за счёт создания π -сопряжённых связей как при высаживании из раствора так и нанесением молекул испарением в вакууме; химической чистотой - количество примесей не более 3% после всех этапов синтеза; высокой подвижностью заряда; способностью интенсивно эмитировать свет, за счёт приложенного напряжения, что делает данный класс материалов эффективным при создании на его основе органических транзисторов, фотодетекторов, а также органических светодиодов.

Одним из интересных соединений данного класса является производное олиготиофена и азобензола, которое при облучении УФ светом с длиной волны 366 нм переходит в цис-изомер, а при облучении светом с длиной волны 440 нм наблюдается обратный переход в транс-форму [1].



Оптимизации геометрии производилась в программе Gaussian с использованием метода DFT в базисе B3LYP 6-311 G++(5d,7f). Рассчитаны разность энергий конформеров, дипольные моменты и распределение парциальных зарядов на атомах. Показано, что переход в цис-форму приводит к уменьшению электронной плотности на тиофеновых циклах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Karpe S., Ocafrain M., Smaali K., Lenfant S., Vuillaume D., Blanchard P., Roncali. // J. Chemical Communications 2010, V. 46, (21), p. 3657–3659.

УДК: 544.473:66.097.5

Д.Д. Гончар, А.В. Бертова

ВЛИЯНИЕ ПОРИСТОСТИ СВЕРХСШИТОГО ПОЛИСТИРОЛА НА ПОВЕДЕНИЕ ПАЛЛАДИЙ СОДЕРЖАЩИХ ПОЛИМЕРНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ ГИДРИРОВАНИЯ АЛКИНОЛОВ

Руководитель: Л.Ж. Никошвили

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Во многих технологических процессах важное место для извлечения целевых компонентов или примесей и очистки отходов занимают сорбенты. Среди известных полимерных адсорбентов особое место занимает сверхсшитый полистирол (СПС). Интерес к таким материалам определяется широкими возможностями их практического применения в качестве высокоэффективных сорбентов для выделения и разделения органических и неорганических соединений. Уникальная способность СПС практически одинаково набухать как в полярных, так и в неполярных растворителях и затем сохранять приобретенный объем обусловлена относительной жесткостью его трехмерной полимерной сетки.

В данной работе исследовалась возможность применения СПС в качестве носителя для создания гетерогенных катализаторов гидрирования. Использовался СПС, синтезированный в Институте элементоорганических соединений РАН им. А.Н. Несмеянова, нескольких типов: отличающийся пористостью (с преобладанием микропор либо мезо-макропористый СПС), а также природой использованных в ходе его синтеза порогенов. Катализаторы с расчетным содержанием палладия 0.5%(масс.) были синтезированы методом импрегнации раствором прекурсора металла ($\text{Pd}(\text{CH}_3\text{COO})_2$) в тетрагидрофуране. Синтезированные образцы были протестированы в реакции селективного гидрирования тройной углерод-углеродной связи ацетиленовых спиртов. Реакция проводилась при температуре 90°C в термостатируемом стеклянном реакторе качания при атмосферном давлении водорода с использованием толуола в качестве растворителя.

По результатам исследования было показано, что использование СПС в качестве носителя, в зависимости от величины удельной площади поверхности и характера пористости, позволяет синтезировать селективные (селективность по олефиновому спирту не менее 95%) и высоко активные катализаторы гидрирования тройной связи.

УДК 548.75

И.Д.Громов, А.Д.Цилих

ВЛИЯНИЕ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ НА СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ГЕРМАНИЯ

Руководитель: А.И. Иванова

Тверской государственный университет

Кафедра прикладной физики

Монокристаллический германий широко применяется в производстве линз, объективов, фильтров для инфракрасной оптики, в качестве подложек для фотопреобразователей. Свойства кристаллов германия в значительной степени зависят от легирующей примеси, а легирование редкоземельными элементами может приводить к очистке от вредных примесей кислорода и азота [1-2].

Работа посвящена исследованию влияния примесей редкоземельных элементов на электрофизические и оптические свойства монокристаллов германия. Исследования проводились на монокристаллах германия, выращенных способом Чохральского в направлении $\langle 111 \rangle$, легированных лантаном, церием, европием и лютецием. Тип проводимости определялся методом точечно-контактного выпрямления и методом термозонда, удельное сопротивление – четырехзондовым методом. Регистрация спектров пропускания осуществлялась на Фурье-ИК спектрометре Tensor 27. Результаты исследований представлены в таблице.

		Церий	Европий #1	Лютеций	Европий #2	Лантан
Тип проводимости	Опыт 1	Смешн.	P	P	Смешн.	Смешн.
	Опыт 2	N	P	P	P	P
Удельное сопротивление, Ом*см	Опыт 1	27.67	41.44	19.05	46.3	0.87
	Опыт 2	31.55	60.89	19.67	53.77	0.98
Пропускание, %		35	35	39	21	2

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гайдар Г.П., Гайворонская Е.Ю. //Электронная обработка материалов, 2017, **53**(2), 70–74.
2. О.И. Подкопаев, Т.В. Кулаковская и др. // Journal of Siberian Federal University. Engineering & Technologies 6 (2012 5) 631-637. УДК: 54.052+662.758

УДК

П.А. Гусева, Е.И. Шиманская

КОНВЕРСИЯ АНИЗОЛА В УГЛЕВОДОРОДЫ

Руководитель: А.А. Степачёва

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Одна из актуальных задач рационального природопользования – решение проблемы утилизации крупнотоннажных промышленных отходов. Лигнин позиционируется как один из видов промышленных твердых отходов в больших количествах, образующихся при обработке древесины и производстве целлюлозно-бумажной продукции. Благодаря своей уникальной структуре, основанной на фенольных мономерах, лигнин можно использовать в качестве сырья для крупномасштабного производства химических веществ, включая углеводородное топливо.

Каталитическая гидроочистка считается универсальной технологией для получения углеводородного топлива [1]. При гидроочистке одновременно протекают такие процессы, как гидродеоксигенирование, гидродесульфидирование, гидродеазотирование, гидродеметаллизация и гидрирование. Анализ литературных источников, посвященных методам гидроочистки биомассы, показал, что в качестве катализаторов гидроочистки наиболее широко используются металлы платиновой подгруппы и подгруппы железа, нанесенные на уголь или неорганические носители, например, смеси оксидов, а также цеолитные и полимерные катализаторы [2].

Данная работа посвящена исследованию конверсии анизола, как одного из мономеров лигнина, в присутствии катализаторов, синтезированных гидротермальным методом. Платиновый и палладиевый катализатор, нанесенные на полимерную матрицу сверхсшитого полистирола, показали высокую эффективность в превращении анизола в углеводороды, позволяя достичь примерно 90% конверсии. Было показано, что при конверсии анизола основными продуктами являются циклогексан, метилциклогексан и фенол. Наибольшую селективность (ок. 88%) по отношению к циклогексану показал платиновый катализатор, нанесенный на сверхсшитый полистирол.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Elliott D.C. // *Energy & Fuels*. 2007. Vol. 21. P. 1792 - 1815.
2. He Zh., Wang X. // *Catalysis for sustainable energy*. 2012. P. 28-52.

УДК 538.956

В.О. Ерофеева

ПИРОЭФФЕКТ КРИСТАЛЛОВ SBN ЛЕГИРОВАННЫХ КОБАЛЬТОМ

Руководитель: О.В.Малышкина

Тверской государственный университет

Кафедра прикладной физики

В работе исследовались образцы монокристаллов ниобата бария-стронция $Sr_xBa_{1-x}Nb_2O_6$ с концентрацией стронция 0,61 (SBN61), чистого и легированного примесью Co_3O_4 с концентрацией 0,01% и 0,002%. Данные кристаллы были выращены в Институте Кристаллографии РАН методом Чохральского в кристаллографическом направлении [001].

Измерение пироэлектрического эффекта проводилось динамическим методом [1] на частоте 10 Гц на сторонах, соответствующих «+P_s» и «-P_s». Однозначной зависимости величины пиротока в максимуме и температуры максимума от концентрации Co обнаружено не было (рис.1).

Отрицательное значение пирокоэффициента, на стороне «+P_s» после прохождения пиротоком максимального значения, означает изменение направления поляризации вблизи поверхности образца (т.е. возникновение слоя с инверсной поляризацией). В отличие от кристаллов ДТГС [2], у кристаллов SBN такой слой возникает только на стороне «+P_s».

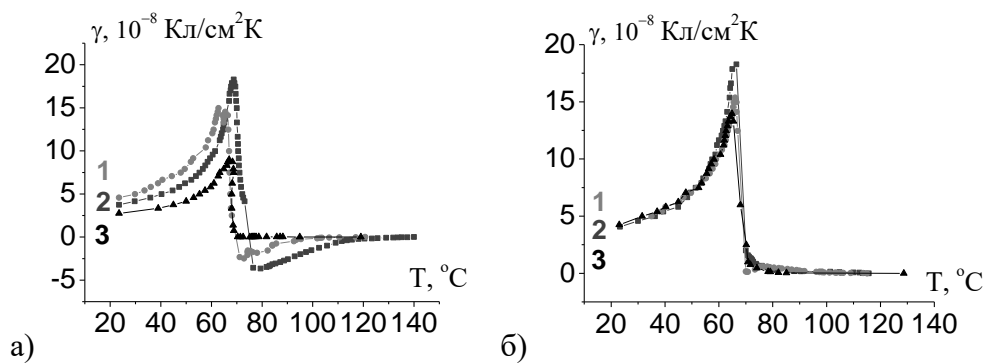


Рис. 1. Пироотклик кристаллов SBN61 кривые (1), легированного Co с концентрацией 0,01% (2) и 0,002% (3). а – сторона, соответствующая «+P_s» и б – «-P_s».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Головнин В.А., Каплунов И.А., Малышкина О.В., Педько Б.Б., Мовчинова А.А. Физические основы, методы исследования и практическое применение пьезоматериалов. Москва: Техносфера, 2013. - 272с.
2. Богомолов А.А., Малышкина О.В. Поверхностный слой в кристаллах ДТГС. // Изв. РАН, сер. физ. - 1993. - N3. - С.199-203

УДК: 66.943

И.С. Жохов

МЕХАНИЗМ ГАЗОЖИДКОСТНОГО ПОЛИАМИДИРОВАНИЯ ПИПЕРАЗИНСОДЕРЖАЩИХ ФИБРИДОВ

Руководитель: Е.И. Лагусева

Тверской государственный технический университет
Кафедра технологии полимерных материалов

Реализация неравновесного процесса в непрерывном трёхфазном пенном гидродинамическом режиме происходит на опытной и пилотной установках газожидкостной поликонденсации. Экспериментально получены фталамиды, включающие в качестве фрагментов звеньев – остатков ацилируемых мономеров – вторичный диамин пиперазин.

Изучение механизма газожидкостного полиамидирования требует особого внимания, обусловленного особенностями совмещения процессов синтеза полимера и одновременного формования материала волокнисто-плёночной морфологии непосредственно в реакционной камере [1].

На примере пиперазинсодержащих полиамидных фибридов ПТ и БПТ исследовано два варианта механизма газожидкостного полиамидирования: абсорбционный и конденсационный.

По абсорбционной версии перегретые пары ацилирующего мономера (дихлорангидриды низкокипящих дикарбоновых кислот) при контакте газовой и жидкой фаз абсорбируются в δ -слое жидкой фазы.

По версии конденсационного механизма, характерного для синтеза жирноароматических полиамидов с участием в качестве ацилирующих мономеров газовой фазы дихлорангидридов ароматических дикарбоновых кислот, в отличие от абсорбционной версии, при контакте жидкой и газовой фаз в реакционной зоне по причине большой разницы температур ($\Delta T \approx 100^\circ$) происходит конденсация паров ацилирующего мономера с образованием на поверхности жидкой фазы конденсатной плёнки толщиной, по нашим расчётам, незначительно превышающей мономолекулярный слой. В результате фазового перехода на границе раздела образуются две жидкие плёнки (водный раствор диамина и конденсатная плёнка хлорангидрида) [2].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Никифоров В.А. // Реакционное формование полиамидных фибридов. 2008. 56 с.
2. Лагусева Е.И. // Макрокинетика синтеза политерефталамидов способом газожидкостной поликонденсации. 2017. №5. С. 78-83.

УДК: 691.675

Е.А. Жукова

ПРОЦЕССЫ САМООРГАНИЗАЦИИ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ СЕРИНА И СОЛЕЙ МЕТАЛЛОВ

Руководитель: С.Д. Хижняк

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Процессы самоорганизации дают доступ к передовым супрамолекулярным материалам и обеспечивают подход к нанонауке, нанотехнологиям, кроме того, позволяют реализовать программную инженерию. Изучение процессов самосборки необходимо для объяснения механизма формирования супрамолекулярных структур на основе простейших аминокислот. Целью данной работы является изучение процессов самоорганизации в водных растворах аминокислоты L-серин (L-Ser) и солей металлов с помощью различных физико-химических методов (УФ спектроскопии, метода динамического светорассеивания (ДСР), рН-метрии). Серин имеет важное значение в метаболизме, является предшественником нескольких аминокислот, например, глицина и цистеина.

В работе была исследована серия модельных низкоконцентрированных систем на основе L-Ser, ацетата серебра (AgAcet) и ацетата кадмия (CdAcet). С помощью метода ДСР было установлено, что в системе L-Ser–AgAcet с молярным соотношением компонентов 1:05 наблюдаются формирование наноагрегатов. При этом мономодальное распределение частиц по размерам трансформируется в бимодальное и наблюдается рост размеров частиц во времени. Это подтверждает процессы ассоциации супрамолекулярных структур (кластеров) за счет сил межмолекулярного связывания. С помощью метода УФ-спектроскопии были исследованы образцы на основе L-Ser–AgAcet с различным соотношением компонентов. В спектрах всех образцов наблюдаются полосы поглощения с максимумами ~210 и ~225 нм, причем величина поглощения зависит от концентрации и соотношения исходных компонентов. Наибольшие различия в электронном спектре обнаружены в образце с молярным соотношением компонентов (AgAcet/L-Ser) **1:0.83**. Для сравнения особенностей процессов самоорганизации в низкоконцентрированных водных растворах аминокислот были изучены также системы на основе L-Ser–Cd(Acet)₂.

УДК 537.525

П.В. Иванова, М. Али, С.В. Молчанов, С.С. Рыбина, М.С. Воронцов,
Н.С. Гормин

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ НА ПАРАМЕТРЫ АКУСТООПТИЧЕСКИХ УСТРОЙСТВ С ЭЛЕМЕНТАМИ ИЗ КРИСТАЛЛОВ ПАРАТЕЛЛУРИТА

Руководитель: А.И. Колесников
Тверской государственный университет
Кафедра прикладной физики

Исследованы температурные поля в элементе работающей на различных ультразвуковых частотах АОДЛ (акустооптической дисперсионной линии задержки) [1,2], изготовленном из монокристалла парателлурита. Получены данные (рисунок) о распределении температуры по длине элемента и в его внутренних объёмах.

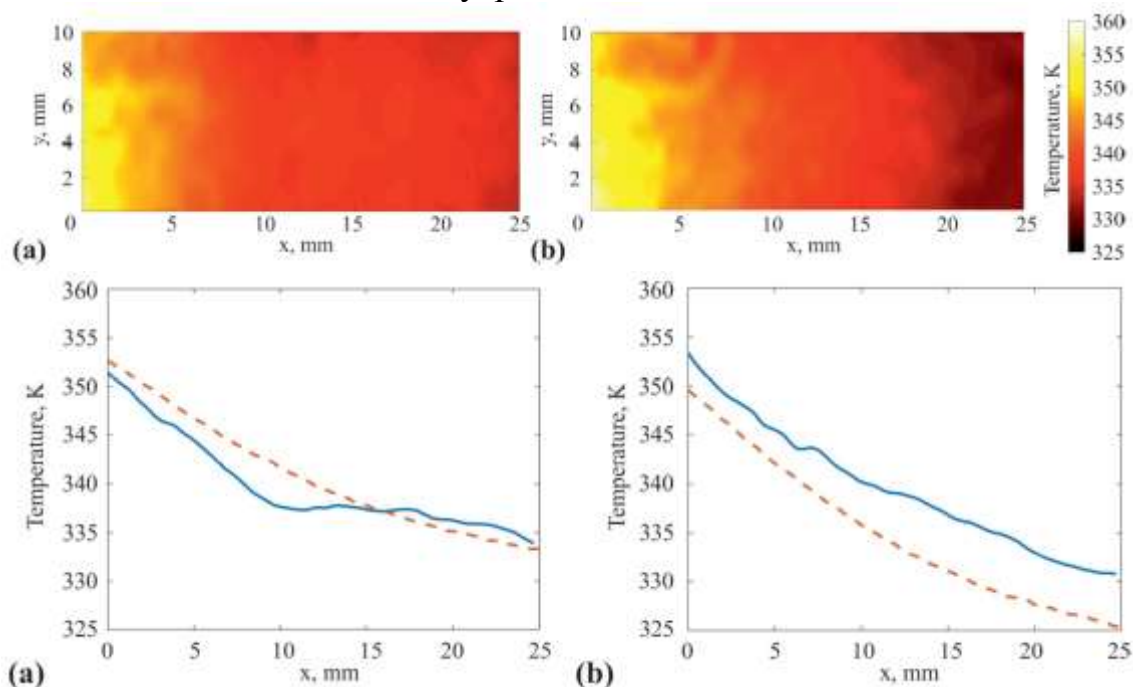


Рисунок – Температурные поля в элементе АОДЛ на основе кристалла парателлурита: слева (а)–при частоте 115 МГц; справа (б) – при частоте 160 МГц; красная линия - данные тепловизионной камеры «FLIR», синяя линия – данные, полученные лазерно-ультразвуковым методом

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zarubin V.P., Yushkov K.B., Chizhikov A.I., et.al. Laser-ultrasonic temperature mapping of an acousto-optic dispersive delay line //NDT and E International. 2018.
2. Молчанов В.Я., Китаев Ю.И., Колесников А.И. и др. Теория и практика современной акустооптики. М.: МИСиС. 2015. 459 С.

УДК: 66.095.63

А.О. Игнатенко, М.Е. Маркова

АБСОРБЦИЯ СИНТЕЗ-ГАЗА В ДОДЕКАНЕ

Руководители: А.А. Степачёва, Э.М. Сульман

Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии и химии

C_1 химия представляет большой интерес для производства транспортных топлив и ценных химических веществ. Такие реакции, как синтез метанола и синтез Фишера-Тропша, предполагают использование синтез-газа, состоящего из окиси углерода и водорода. Эти химические вещества не только играют роль реагентов, но и могут входить в состав активных комплексов катализаторов. Концентрация синтез-газа оказывает существенное влияние на скорость реакции и состав продукта.

Поскольку большинство промышленных процессов в C_1 химии выполняются в многофазных системах, важную роль играет газожидкостный массообмен. Растворимость газов в жидких средах является одним из основных параметров, необходимых для интерпретации данных для мультифазных реакций. Кроме того, данные растворимости H_2 и CO в жидкостях необходимы для понимания механизмов реакции [1].

В данной работе исследована растворимость окиси углерода и водорода в додекане при температуре 373-473 К и давлении 1-5 МПа. Исследование проводилось как для отдельных газов, так и для газовой смеси с соотношением $CO:H_2$ 1:2.

Исследование влияния температуры на растворимость отдельных газов при постоянном давлении (2 МПа) показало, что растворимость газа уменьшается при повышении температуры. Изучено влияние давления на растворимость при постоянной температуре, выбранной на основе предыдущей серии экспериментов, установлено, что увеличение давления приводит к увеличению величины растворимости газа.

В случае смеси CO и H_2 установлено, что соотношение растворенных газов сильно зависит от температуры и давления. Таким образом, предложен механизм параллельного растворения синтез-газа. Стехиометрическое соотношение 1:2 растворенных газов достигнуто при 473 К и 2 МПа общего давления для додекана. На основе полученных зависимостей растворимости газа от давления и температуры рассчитаны теплота поглощения, энергия активации поглощения и постоянная Генри.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Li B., Jens K.-J. // Ind. Eng. Chem. Res. 2014, Vol. 53, Is. 5, pp. 1735-1740.

УДК: 678.682

Н.Н. Кизилов

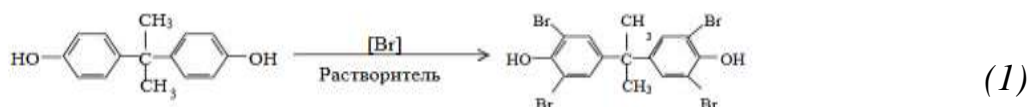
СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК БРОМСОДЕРЖАЩИХ ПОЛИМЕРНЫХ АНТИПИРЕНОВ

Руководитель: Крупцов Б.К

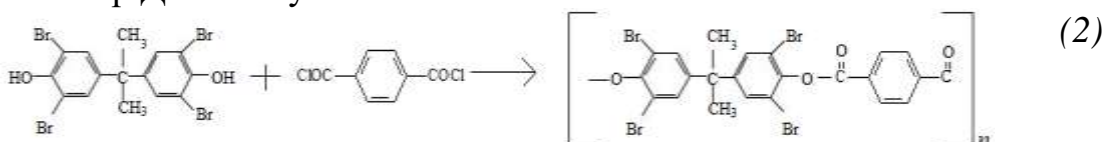
Тверской Государственный Технический Университет
Кафедра технологии полимерных материалов

Работа посвящена исследованию синтеза, физико-химических характеристик и огнестойкости бромсодержащего полиарилата марки Д2Вr с целью исследования его в качестве полимерного антипирена. От бромсодержащего полиарилата следует ожидать высокие показатели огнестойкости и совместимости с промышленным полиарилатом Д-2 [1].

Отработана и усовершенствована методика синтеза бромдифенилолпропана и полиэфира на его основе, определены физико-химические характеристики полимера с исследованием на горючесть методом «огненная труба» как самого полимера, так и сополиконденсаты хлорангидрид терефталевой кислоты (ХАТФК) с дифенилолпропаном (БФА) и бромдифенилопропоном (БФАВr). Бромсодержащий бисфенол-А был получен реакцией бромирования дифенилолпропана.



Полимер Д2Вr получен.



По аналогичной методике получены и сополиконденсаты БФА с БФАВr и ХАТФК при различном мольном соотношении (Д2Вr-1 - 0,5*0,5*1,0 моль); Д2Вr-2- 0,75*0,25*1,0 моль; Д2Вr-3- 0,25*0,75*1,0 моль) Результаты исследуемых полимеров по методу «огненная труба»: полиарилат Д2 потеря массы 38%; Д2Вr-1 потеря массы 19%; Д2Вr-2 потеря массы 20%; Д2Вr-3 потеря массы 16%; Д2Вr потеря массы 12%. Таким образом, при повышении бромсодержащего компонента позволяет значительно повысить огнестойкость соответствующих полимеров.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1 Кодолов, В.И. Горючесть и огнестойкость полимерных материалов/В.И Кодолов//Москва, Химия, 1976. - 160 с.

УДК: 538.956

В.Е. Кожушко

ПРОВОДИМОСТЬ КЕРАМИКИ СИСТЕМЫ PFN-PFT

Руководитель: Е.В. Барабанова

Тверской государственный университет
Кафедра прикладной физики

Сложные оксиды семейства перовскита $PbV_{1+3/2}B_{2+5/2}O_3$ представляют интерес для изучения как сегнетоэлектрики-релаксоры. Вид и степень упорядочения ионов B_1 и B_2 определяют электрические, магнитные, тепловые и т.д. свойства данных материалов. Так, керамика феррониобата свинца PFN ($B_1=Fe$, $B_2=Nb$) обладает значительной проводимостью [1]. Симметричные вольтамперные характеристики соответствуют омической проводимости до напряжений 500 В (рис.1). Далее характер зависимости меняется, что свидетельствует об активизации новых механизмов. Удельная электропроводимость σ , рассчитанная по ВАХ, равна $5.7 \cdot 10^{-7} (\text{Ом} \cdot \text{м})^{-1}$. Из частотных зависимостей σ видно, что сквозная проводимость растёт с повышением температуры (рис. 2а). Она даёт значительный вклад в диэлектрические потери и проницаемость на низких частотах.

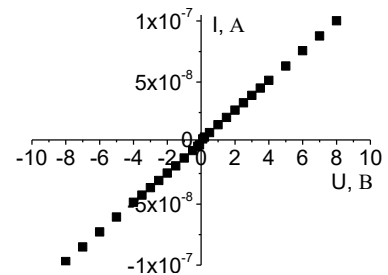


Рис. 1. Вольтамперная характеристика для керамики PFN при комнатной температуре

Введение в систему ферротанталата свинца PFT ($B_1=Fe$, $B_2=Ta$) приводит к значительному уменьшению проводимости и сдвигу точки Кюри в область более низких температур (со 116 до 46 °С). При этом зафиксировать токи утечки не получается вплоть до 1кВ. Как видно из рис. 2б частотная зависимость σ не выходит на плато в области низких частот даже при увеличении температуры. Таким образом, замещение ионов Nb ионами Ta приводит к изменению характера проводимости.

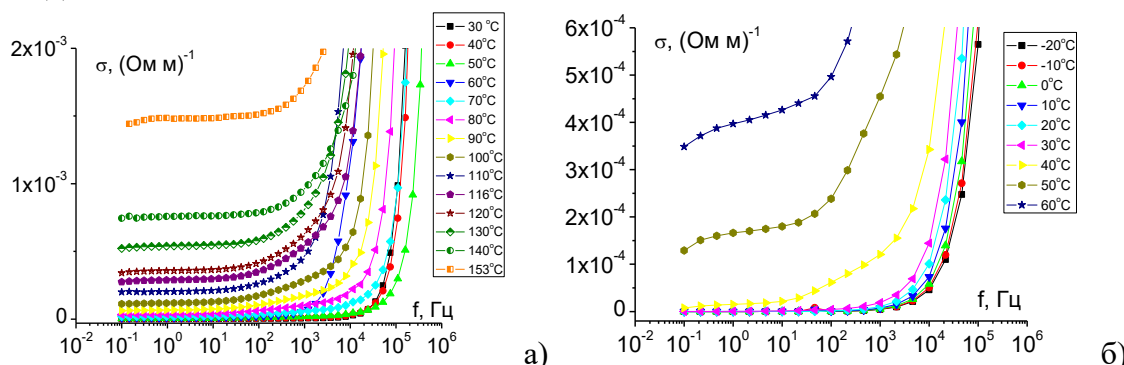


Рис. 2. Зависимость удельной электропроводности от частоты в логарифмическом масштабе для: а) PFN, б) 0.6PFN-0.4PFT

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Raymond O., Font R., Suárez-Almodovar N., Portelles J., Siqueiros J. M. // Journal of Applied physics. 2005. V. 97. P. 084107.

УДК 665.76; 543.683

Р.В. Королёв, К.С. Мурихин, А.В. Соколов

КОНТРОЛЬ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА РАСТВОРИТЕЛЯ ПРИ ПРОИЗВОДСТВЕ ВОЛОКОН СВМПЭ МЕТОДОМ ГЕЛЬ- ФОРМОВАНИЯ

Руководитель: П.М. Пахомов

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

При получении высокопрочных волокон из сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ) методом гель-формования в качестве растворителя реакторного порошка СВМПЭ используется вазелиновое масло (ВМ) [Пахомов П.М., Галицын В.П. и др. *Высокопрочные и высокомодульные полимерные волокна* – Тверь, ТвГУ, 2012. – 327 с.]. При многократном использовании ВМ в результате воздействия термоокислительной деструкции происходит его потемнение и снижение растворяющей способности.

В связи с этим, целью настоящей работы является контроль изменений химического состава ВМ, в результате его термоокислительной деструкции в узлах установки по получению высокопрочных волокон с помощью метода ИК спектроскопии.

Данный метод контроля основан на количественном определении концевых кислотных и альдегидных кислородсодержащих групп в диапазоне частот ($1700 - 1800 \text{ см}^{-1}$) в каждом последующем цикле формования волокон (рис.). При превышении порогового значения концентрации кислородсодержащих группировок ВМ должно отправляться на очистку от смолистых и кислородсодержащих соединений.

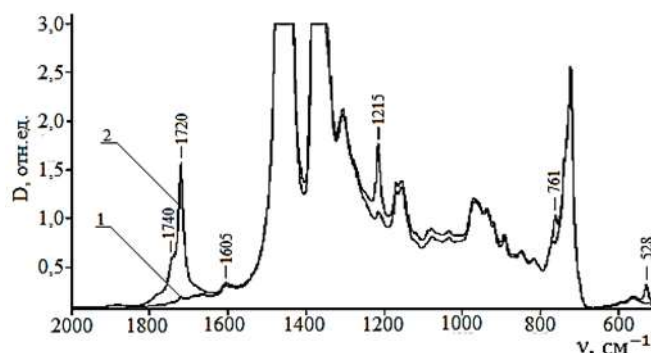


Рис. Изменение ИК спектра поглощения ВМ в зависимости от его эксплуатации:
1 – исходное ВМ; 2 – ВМ после 2 циклов формования.

УДК: 538.9

Н. А. Косолапов

МАГНИТНАЯ ДОМЕННАЯ СТРУКТУРА КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ И 3-D МЕТАЛЛОВ

Руководитель: О.Б. Дегтева

Тверской государственный университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Формирование спеченных гетерогенных композиций, позволяет создавать магнитные материалы с заданными физическими свойствами [1]. В работе проведены исследования микроструктуры, доменной структуры и процессов перемагничивания спеченных гетерогенных композиций, созданных на основе сплавов $Sm(Co_{0.6}Cu_{0.4})_{6.0}$ и $Nd_2Fe_{14}B$ с разными механизмами перемагничивания.

Исходные составляющие были синтезированы методом индукционной плавки в атмосфере аргона и в дальнейшем измельчались в центробежно-планетарной мельнице до размеров частиц 1-10 мкм. Порошковые брикеты формировали методом влажного прессования с взаимно перпендикулярными направлениями приложенного давления и ориентирующего магнитного поля 15кЭ. Температуры спекания, отжига и длительность термических обработок подбирались для каждого композита индивидуально исходя из относительного содержания составляющих. Удовлетворительные результаты были получены на образцах, которые спекались в течение 1 часа при температурах 1100 и 1070°C.

Исследование микроструктуры проводилось методами оптической и растровой электронной микроскопии. Анализ микроструктуры и рентгеновских спектров для образцов с 10% и 30%-ным содержанием $Nd_2Fe_{14}B$ показывает наличие четырех фаз: $(Sm,Nd)(Co,Cu,Fe)_5$, $(Sm,Nd)_2(Co,Cu,Fe)_{17}$, $Fe_{31}Co_{65}Cu_4$ и фазы, обогащенной кислородом. Составляющая $(Sm,Nd)(Co,Cu,Fe)_5$ занимает 85% объема образца и в ней при увеличении относительного содержания $Nd_2Fe_{14}B$ меняется содержание основных элементов: увеличивается содержание Fe , Nd и Cu , а содержание Co и Sm уменьшается.

Методами магнитно-силовой микроскопии (Solver Next (NT-MDT)) были получены изображения полей рассеяния доменной структуры образцов различных структурных составляющих спеченных композитов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Супонев Н.П., Дегтева О.Б., Семенова Е.М. // Физика магнитных материалов. Тверь. 1997. С.38-48.

УДК: 530.145

Котомкин А.В.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ПОЛИФТОРАЛКАНОВ

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

Целью данной работы является исследование индуктивного влияния атомов фтора в соединениях 1,1,1,2,2-пентафторалканов $\text{CF}_3\text{-CF}_2\text{-(CH}_2)_n\text{-CH}_3$ и 1,1,1,2-тетрафторалканов $\text{CF}_3\text{-CHF-(CH}_2)_n\text{-CH}_3$ где $0 \leq n \leq 7$.

Равновесная геометрия и распределение электронной плотности молекул были получены с помощью программы GAUSSIAN 03 методом B3LYP/6-311++G(3df,3pd) [1]. Заряды q , энергии E и объемы V «топологических» атомов были вычислены в рамках «квантовой теории атомов в молекулах» QTAIM [2] с использованием программы AIMALL [3] 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 0,01 Å^3 .

Сравнение $q(R)$, $E(R)$ и $V(R)$ для всех изученных соединений показало, что индуктивное влияние фрагментов $\text{CF}_3\text{-CF}_2\text{-}$ и $\text{CF}_3\text{-CHF-}$ распространяется на 4 ближайшие группы CH_2 вдоль углеводородного скелета, что позволило выделить электронные параметры ($q(R)$, $E(R)$ и $V(R)$) переносимых групп. На основании величин $q(R)$ были получены индивидуальные шкалы электроотрицательностей: для 1,1,1,2,2-пентафторалканов: $\chi(\text{CH}_2) < \chi(\text{CH}_3) < \chi(\text{CF}_3) < \chi(\text{CF}_2)$, для 1,1,1,2-тетрафторалканов: $\chi(\text{CH}_2) < \chi(\text{CH}_3) < \chi(\text{CHF}) < \chi(\text{CF}_3)$. Итоговая шкала электроотрицательности полифторалканов имеет вид:

$$\chi(\text{CH}_2) < \chi(\text{CH}_3) < \chi(\text{CHF}) < \chi(\text{CF}_3) < \chi(\text{CF}_2).$$

Работа выполнена в рамках государственного задания № 4.6469.2017/8.9

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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

УДК 543.054:543.48

П.А. Кравченко

СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ МЕТОДИКИ
ФОТОМЕТРИЧЕСКОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ МЕДИ
ПРИ ОБРАЗОВАНИИ СМЕШАННЫХ КОМПЛЕКСОВ С
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ 4(2-ПИРИДИЛАЗО)РЕЗОРЦИНА (ПАР)

Руководитель: С.Л. Горцевич

Тверской государственной технической университет
кафедра Химии

В настоящее время большой интерес представляет изучение меди и ее сплавов с помощью физических и физико-химических методов анализа. По сравнению с классическими химическими методами использование физических и физико-химических методов сможет решить целый комплекс новых задач, вызванных потребностями современной науки и техники — это и снижение предела обнаружения, повышение точности аналитических определений, увеличение скорости определений (экспрессности), повышение избирательности (селективности) определения, создание локальных методов, проведение дистанционного анализа.

Современная аналитическая химия в этом вопросе ориентируется на следующие определяющие факторы: объект исследования - определяемый компонент - метод исследования — решаемая проблема. Однако все это объединено общей целью: измерение количества вещества. С этой позиции становится понятной возрастающая роль метрологических аспектов химического анализа, а также развитие математизации физико-химических методов исследования.

В нашей работе мы предлагаем использовать фотометрический метод определения с 4(2-пиридилазо)резорцином (ПАР) для выявления и анализа продуктов физико-химического окисления меди в растворах разнолигандных комплексообразователей тиоцианата, тиомочевины и тиосульфата. Предварительная пробоподготовка, которая требуется для проведения анализа, позволяет исключить влияние небольших количеств органических веществ. Нами разработана стандартная методика исследования меди с 4(2-пиридилазо)резорцином. К пробе, содержащей Cu(II) , добавляют 5 см^3 раствора ПАР, 3 см^3 2 н раствора серной кислоты и доводят водой до метки в колбе на 50 мл. Оптическую плотность раствора измеряли на спектрофотометре, кювета 2 см относительно раствора холостого опыта при $\lambda = 540 \text{ нм}$. Расчет концентрации проводили по градуировочному графику.

Для определения меди из разнолигандных комплексов подходит фотометрический метод с использованием 4(2-пиридилазо)резорцина (ПАР), как наиболее точный и селективный метод исследования.

УДК: 544.147.3

Крылова М.Е.

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ В ТИОКЕТОНАХ

Руководители: Н.П. Русакова, Ю.Д. Орлов
Тверской государственной университет
Кафедра физической химии

Квантовохимический расчёт молекул позволяет найти распределение электронной плотности $\rho(r)$ и соотнести её свойства группам в любом соединении без проведения реального химического эксперимента. Цель работы: получение интегральных характеристик распределения электронной плотности гомологического ряда тиокетонов ($\text{CH}_3\text{-C(S)-C}_n\text{H}_{2n+1}$), где $1 \leq n \leq 8$, и на их основе получение качественных соотношений групповых электроотрицательностей.

Оптимизация геометрии молекулы метилпентилтиокетона (рис. 1.) и остальных структур ряда $\text{CH}_3\text{-C(S)-C}_n\text{H}_{2n+1}$, где $1 \leq n \leq 8$, проводилась в программе GAUSSIAN 03 с использованием метода B3LYP 6-311++G(3df,3pd). С помощью программного пакета AIMALL проведено вычисление зарядов (q) и объёмов (V) «топологических» атомов. Суммирование атомных параметров в характеристики групп ($q(R)$, $V(R)$) осуществлялось в рамках «квантовой теории атомов в молекулах».

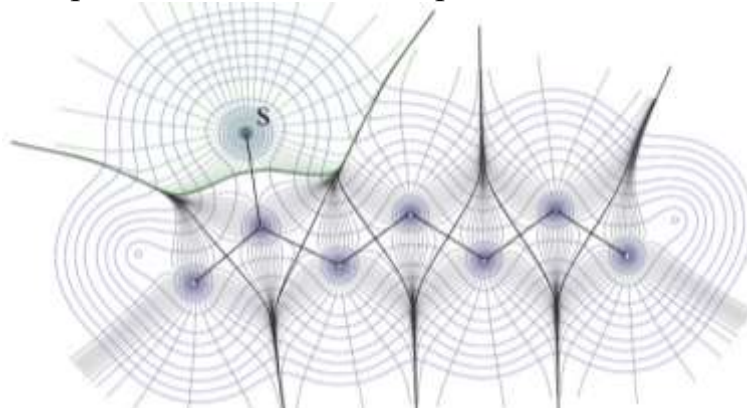


Рис.1. Молекулярный граф, распределение электронной плотности и векторное поле градиента электронной плотности в метилпентилтиокетоне: $\text{CH}_3\text{-C-S-C}_5\text{H}_{11}$.

Сравнением полученных зарядов групп $q(R)$ и $V(R)$ выделен тиокетонный фрагмент молекулы $-\text{C(S)-}$, стягивающий на себя электронную плотность с ближайших к нему групп CH_2 и CH_3 . Индуктивный эффект C(S) отмечен в изменении двух соседних $q(\text{CH}_2)$, стерический C(S) - в изменении q и V четвертой от него CH_2 . На основании сопоставления зарядов для $\text{CH}_3\text{-C(S)-C}_n\text{H}_{2n+1}$, где $1 \leq n \leq 8$, ($q(\text{CS}) < q(\text{CH}_3) < q(\text{CH}_2)$) получено соотношение:

$$\chi(\text{CS}) > \chi(\text{CH}_3) > \chi(\text{CH}_2)$$

Работа выполнена в рамках государственного задания № 4.6469.2017/8.9.

УДК 543.33: 546.72

А.А. Кузнецова, А.А. Щеглова

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЖЕЛЕЗА В ПРИРОДНОЙ И ВОДОПРОВОДНОЙ ВОДЕ В ГОРОДЕ ТВЕРИ

Руководитель: В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Фотометрическим методом по ГОСТ 4011-72 с использованием в качестве реагента сульфосалициловой кислоты определено количественное содержание железа в природной и водопроводной воде в различных районах города Твери (17 образцов). В некоторых образцах превышена предельно допустимая концентрация суммарного железа в питьевой воде, составляющая 0,3 мг/л согласно СанПиН 2.1.4.1074-01. Использование бытовых фильтров, содержащих активированный уголь, обеспечивают достаточную очистку питьевой воды от железа, уменьшая его концентрацию примерно в 3 раза.

Образец	Содержание железа, мг/л
река Волга	0,9845±0,0625
Центральный район	
Садовый переулок	0,8824±0,0374
ул. Желябова	0,3323±0,0645
ул. Желябова, пропущена через фильтр	0,0089±0,0069
ул. Трехсвятская	0,6148±0,2198
Микрорайон Южный	
ул. Королёва	0,3989±0,0367
ул. Королёва, пропущена через фильтр	0,1552±0,0446
ул. Хромова	0,5875±0,1026
ул. Хромова, пропущена через фильтр	0,2528±0,0345
Бульвар Гусева	0,2221±0,0491
ул. Линейная	0,2161±0,0185
Московский район	
проспект Победы	0,2297±0,0245
поселок имени Н.К. Крупской	0,2662±0,0169
Пролетарский район	
ул. Академическая	0,3719±0,0481
Заволжский район	
ул. Коноплянниковой	0,2457±0,0181
ул. Прошина	0,5303±0,2106
ул. Грибоедова	0,4460±0,0192

УДК: 541.49:615.33

В.С. Лагусева

ОДНОСТАДИЙНОЕ ПОЛУЧЕНИЕ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ L-ЦИСТЕИНА, НИТРАТА СЕРЕБРА И БРОМИДА НАТРИЯ

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

Гели играют большую роль в повседневной жизни. В зависимости от состава и свойств они находят применение в таких областях, как пищевая промышленность, косметология и медицина.

Сравнительно недавно было введено понятие супрамолекулярный гидрогель. В отличие от физических гелей натурального происхождения, которые образуются за счет сильных ковалентных связей между звеньями мономеров, в супрамолекулярных гидрогелях звенья структурируются в цепи более слабыми взаимодействиями (водородная связь, Ван-дер-Ваальсово, диполь-дипольное и другие виды взаимодействия).

Цель настоящего исследования – получение устойчивых во времени гель-образцов на основе L-цистеина, нитрата серебра и электролита – бромида натрия и исследование их свойств различными физико-химическими методами.

Получение геля осуществлялось одностадийным способом, который заключается в единовременном последовательном смешении водных растворов L-цистеина ($C = 3$ мМ), нитрата серебра ($C = 5 - 6$ мМ) и бромида натрия ($C = 0,5 - 1$ мМ). Молярное соотношение исходных компонентов Ag^+/Cys варьировали в интервале 1,66 – 2,00.

Прочность гелей оценивалась по пятибальной шкале [1] при переворачивании тары с гелем на 180° . Согласно данным по вязкости образцов установлено, что при изменении концентрации электролита график изменения параметра имеет куполообразный вид. Метод УФ-анализа показал наличие пика (~ 335 нм), который отвечает за образование супрамолекулярных цепочек из которых строится пространственная гель-сетка. В результате, удалось получить устойчивые во времени гель-образцы на основе L-цистеина, нитрата серебра и бромида натрия

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Soft Matter. 2017. V.30. N13 .P.5168-5184. DOI: 10.1039/C7SM00772H.

Работа выполнена при финансовой поддержке в рамках базовой части государственного задания в сфере научной деятельности (Проект №4.5508.2017/БЧ) на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.

УДК: 544.351

А.Г. Линтварева

КИНЕТИКА РАСТВОРЕНИЯ МЕДНО-ЦИНКОВОГО СПЛАВА В СЕРНОЙ КИСЛОТЕ

Руководитель: В.И. Луцик
Тверской государственный технический университет

Медно-цинковые сплавы - распространенные конструкционные материалы, широко применяемые в технике, в том числе в условиях их контакта с агрессивными растворами. Литературные сведения о коррозионной устойчивости таких сплавов содержат, как правило, лишь технические оценки зависимости интенсивности процесса от состава растворов, с которыми контактируют. Нет описаний кинетики таких процессов в виде математических моделей, и их физико-химической интерпретации.

Наиболее приемлемым для исследования процессов растворения является метод вращающегося диска. Характер зависимостей удельной скорости растворения (W , моль/дм²с) от величин влияющих факторов (C_n , моль/дм³; T , К; частоты вращения диска ω , с⁻¹) для процесса на поверхности диска позволяет для случая, когда в качестве функции отклика принят $\lg W$, а влияющие факторы представлены в виде $\lg C$, $1/T$ и $\lg \omega$, получить адекватные полиномиальные модели методом факторного планирования эксперимента (планы ПФЭ 2³). Такие модели преобразовываются в уравнения скорости, и позволяют проводить их физико-химическую интерпретацию [1].

Задача аналитического контроля концентрации меди и цинка в растворах, контактирующих с такими сплавами, должна решать, прежде всего, проблему селективности их определения. Показано, что при растворении сплава в присутствии серной кислоты из-за селективного перехода в раствор цинка, его определение возможно фотометрически в виде комплекса с ксиленоловым оранжевым. В условиях одновременного перехода в раствор меди и цинка для определения концентрации этих металлов выбрана полярография переменного тока.

Исследована кинетика растворения медно-цинкового сплава при условиях: $0,5 \leq C_n \leq 5,0$; $293 \leq T \leq 323$; $1,6 \leq \omega \leq 10,0$. Получена математическая модель этого процесса. Дана ее физико-химическая интерпретация.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Луцик В.И., Соболев А.Е. // Кинетика гидролитического и окислительного растворения сульфидов металлов. Тверь. 2009. 140 с.

УДК: 543.64

В.А. Лобзова

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ БЕЛКА В МОЛОКЕ

Руководитель: Н.В. Баранова

Тверской государственный университет

Кафедра неорганической и аналитической химии

Казеин является основной белковой группой коровьего молока. Это один из наиболее ценных пищевых белков, содержащий, как правило, все необходимые аминокислоты.

В ходе проведенного анализа была использована следующая методика: в пробирку, к отобранной аликвоте (1 мл) молока, приливался 9% раствор гидроксида натрия, после 10 минут, в соотношениях один к одному, в пробирку приливался полученный раствор и концентрированная азотная кислота. В результате выдерживания, в течении 5 минут на водяной бане, раствор приобретал лимонно-желтую окраску. После добавления 2 мл 25% раствора аммиака и 5 мл дистиллированной воды, раствор подвергался фильтрованию с последующим фотометрированием в синем светофильтре.

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

Результаты анализа представлены в таблице 1.

Таблица 1

Количественное определение белка в молоке

Образец молока следующих производителей	Содержание белка, г	
	Практическое значение	Теоретическое значение (на упаковке)
«Простоквашино»	2,54	2,91
«Домик в деревне»	3,37	3,00
«Агуша»	2,89	2,90
«Молоко из Ржева»	2,73	3,00

В ходе проведенного анализа, было выявлено то, что содержание белка в исследуемых образцах немного отличаются, от значений, указанных на упаковке, но все они колеблются в допустимых значениях, установленных ГОСТом.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. ГОСТ 25179-90. Молоко. Методы определения белка. – Введ. 1991-01-01. – М.: Стандартиформ, 2009. – С.6.

УДК: 544.777; 544.137

М.Д. Малышев

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СОЗРЕВАНИЯ ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНОГО РАСТВОРА

Руководитель: П.В. Комаров

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Супрамолекулярные гидрогели являются интересными объектами изучения, поскольку на сегодняшний день они широко используются в различных отраслях промышленности. С фундаментальной точки зрения, изучение процессов гелеобразования может помочь выявить общие закономерности самосборки, что является важной проблемой коллоидной и супрамолекулярной химии, решение которой может качественно повлиять на разработку способов конструирования низкомолекулярных желаторов и «умных» материалов.

Относительно простой супрамолекулярной системой, способной к самоорганизации после добавления различных солей металлов при достаточно малом содержании реагентов (~0,01%), является водный раствор L-цистеина и AgNO_3 (ЦСР). Экспериментальные результаты показывают, что при сливании водных растворов L-цистеина и AgNO_3 формируются цвиттер-ионы меркаптида серебра (МС). Далее, при созревании ЦСР, происходит формирование стабилизированных кластеров из МС, что подтверждается результатами динамического светорассеяния и потенциометрии. Несмотря на большой объем данных по свойствам ЦСР и гелей на его основе, остается ряд вопросов, требующих углубленного исследования.

В докладе обсуждаются результаты моделирования процесса созревания ЦСР методом атомистической молекулярной динамики. Результаты моделирования позволяют наблюдать формирование кластеров МС и их объединение в один вытянутый агрегат. При этом неполярные части МС формируют «ядро» агрегата, а полярные (карбоксильная и амино-) группы располагаются преимущественно на его поверхности. В «ядре» агрегата также присутствуют ионы Ag^+ и NO_3^- . Благодаря избыточному содержанию ионов NO_3^- , агрегат МС приобретает отрицательный заряд. Полученные результаты подтверждают идею, что процесс дальнейшей самоорганизации ЦСР происходит за счет объединения кластеров МС, играющих роль супрамономеров, за счет амино- и карбоксильных групп на их поверхности. При этом, наличие большого заряда у супрамономеров обуславливает рост нитеобразных агрегатов на их основе.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-33-00146 мол_а) с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова». Автор также выражает благодарность П.В. Комарову (ИНЭОС РАН, ТвГУ) и П.О. Бабуркину (ТвГУ) за обсуждения и ценные советы.

УДК 548.75

К.А. Мариничева, Н.Я. Вайсбург

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОНОКРИСТАЛЛОВ ГЕРМАНИЯ

Руководитель: А.И. Иванова
Тверской государственной университет
Кафедра прикладной физики

В работе представлены результаты исследования оптического пропускания монокристаллов германия, легированных висмутом, сурьмой, галием, медью.

Оптические элементы (германиевые окна и линзы) являются важными компонентами инфракрасных систем, а также материалом для экранирования электромагнитной интерференции. Высокое оптическое качество германиевых образцов связано с низкой плотностью дислокаций, видом и концентрацией легирующей примеси и качеством оптических поверхностей [1-2].

Цель работы – исследование оптического пропускания и поглощения монокристаллических образцов германия в диапазоне 2-15 мкм.

Исследования проводились на монокристаллах германия, выращенных способом Чохральского в направлении $\langle 111 \rangle$. Обработка поверхностей включала шлифовку и полировку абразивными суспензиями АСМ 40, 28, 10, 5/3, 2/0, и АМ 0,5/0. Тип проводимости кристаллов определялся методом термозонда, удельное сопротивление – четырехзондовым методом. Регистрация спектров пропускания проводилась на Фурье-ИК спектрометре Tensor 27, измерены коэффициенты отражения, подсчитаны коэффициенты ослабления. Результаты представлены в таблице.

	Тип проводимости	Уд. сопр-е Ом · см	Коэффициент пропускания ($\lambda = 10,6$ мкм), %	Коэффициент ослабления ($\lambda = 10,6$ мкм), см ⁻¹
Ge +Sb	n	1,19	45	0,034
Ge +Sb	n	1,86	47	0,0003
Ge +Bi	n	3,58	44	0,05
Ge +Ga	p	19,12	41	0,12

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Каплунов И. А., Колесников А. И., Гавалян М. Ю., Белоцерковский А. В. Оптические свойства крупногабаритных монокристаллов германия // Оптика и спектроскопия. 2016. Т. 120. № 4. С.691–696.
2. Каплунов И. А., Колесников А. И., Талызин И. В., Седова Л. В., Шайович С. Л. Измерение коэффициентов ослабления света кристаллами германия и парателлурита // Оптический журнал. 2005. Т. 72. № 7. С. 76–84.

УДК: 544.4.032.7:542.943-92

О.О.Михайлова

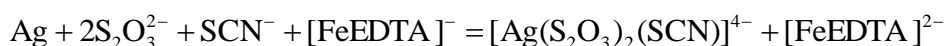
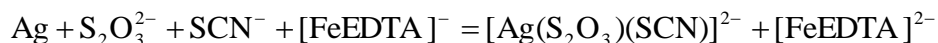
КИНЕТИКА РАСТВОРЕНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО СЕРЕБРА В
СИСТЕМЕ ТИОЦИАНАТ – ТИОСУЛЬФАТ – ОКИСЛИТЕЛЬ
КОМПЛЕКС Fe(III)ЭДТА

Руководитель: Ю.В. Чурсанов

Тверской государственный технический университет

Кафедра химии

В гидрометаллургии благородных металлов продолжают исследования, посвященные поиску реагентов альтернативных цианиду. Для перевода серебра в водную фазу подобные системы должны состоять из раствора комплексанта и окислителя. Перспективными являются растворы, содержащие разнородные лиганды, способные образовывать смешаннолигандные комплексы серебра [1]. В работе изучена кинетика окислительного растворения серебра в присутствии тиосульфата натрия (Ts) и тиоцианата калия (Tcy). В качестве окислителя использовали комплекс железа(III) и этилендиаминтетраацетата. Протекание реакций возможно по схемам:



Скорость растворения серебра определяли с помощью техники вращающегося диска [1] в области концентраций тиосульфата 0–0.5 моль/дм³; тиоцианата 0–0.5 моль/дм³; pH 4–7; температуры 25–35°C; скорости вращения диска 1.6–10.0 с⁻¹. Зависимость скорости растворения от концентрации тиосульфата и тиоцианата в смеси при постоянной суммарной концентрации (изомолярная серия) показывает наличие экстремума в области молярных отношений $C_{\text{Ts}} : C_{\text{Tcy}} = 3 : 2$. Экстремум в отклонении скорости растворения от аддитивности соответствует составу образующегося разнолигандного комплекса $[\text{Ag}(\text{S}_2\text{O}_3)_2(\text{SCN})]^{4-}$.

Методом планирования кинетических экспериментов получена математическая модель процесса, рассчитаны кинетические параметры реакции. Частные порядки реакции составляют: по концентрации лигандов 0.34; окислителя 0.87; частоты вращения диска 0.41. Экспериментальная энергия активации 54 кДж/моль; константа скорости реакции при 298 К $3.08 \times 10^{-5} \text{ моль}^{-0.21} \text{ дм}^{1.63} \text{ с}^{-0.59}$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. В.И. Луцик, Ю.В. Чурсанов, А.В. Старовойтов // Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2018. Т.61. Вып.8. С.25.

УДК 538.953

С.В. Молчанов, Н.Я. Вайсбург

ОПРЕДЕЛЕНИЕ УДЕЛЬНОГО ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ ГЕРМАНИЯ ТЕПЛОВИЗИОННЫМ МЕТОДОМ

Руководитель: А.И. Колесников
Тверской государственный университет
Кафедра прикладной физики

Монокристаллы германия, легированные различными примесями, широко применяются в отраслях полупроводниковой электроники, ИК-оптики, фотоэлектроники и др [1,2]. Для определения однородности удельного электросопротивления и, как следствие, концентрации легирующей примеси по объему кристалла, используется четырёхзондовый метод, основанный на измерении разности потенциалов между парой зондов (всего 4), установленных на измерительной головке прибора [3]. Точность и разрешающая способность данного способа ограничены размерами зонда.

Для улучшения этих параметров, в настоящей работе предложено использование термограмм, регистрирующихся с помощью тепловизионной камеры. На основании анализа температурных профилей и значений в опорных точках (измеренных 4х зондовым методом), разрешающая способность определения удельного электросопротивления увеличивается до 2-3 точек на миллиметр.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Подкопаев О.И., Шиманский А.Ф. и др.//Физика и техника полупроводников, 2016, Т50, вып. 10 С.1309
2. Каплунов И.А., Смирнов Ю.М. и др.//Перспективные материалы. 2003. № 4. С.35.
3. ГОСТ 24392-80 Кремний и германий монокристаллические. Измерение удельного электрического сопротивления четырёхзондовым методом.

УДК: 662.756.3+544.478

М.А. Монжаренко, А.Ю. Симанова

ЖИДКОФАЗНОЕ ГИДРИРОВАНИЕ ЖИРНЫХ КИСЛОТ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ЖИРНЫХ СПИРТОВ

Руководитель: А.А. Степачёва
Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии и химии

Триглицериды - это компоненты биомассы, которые благодаря своему составу могут быть использованы в качестве источника для производства ценных химических веществ. Среди них наиболее полезными в качестве полупродуктов многих соединений являются жирные спирты с углеродным числом C_{10} - C_{18} . Амфифильный характер жирных спиртов обеспечивает их поверхностную активность и определяет их применение в качестве поверхностно-активных веществ, смазочных материалов и эмульгаторов [1]. В настоящее время жирные спирты обычно получают путем гидрирования жирных кислот и альдегидов в присутствии катализаторов на основе металлов платиновой группы, т. е. Pd, Pt, Ru. В качестве растворителей в процессе гидрирования используются различные углеводороды, такие как толуол, гексан, тетрадекан, додекан.

В данной работе было изучено влияние катализаторов на основе платины, палладия и рутения, нанесенных на сверхсшитый полистирол гидротермальным методом. Синтез катализаторов проводился в среде перегретой воды в течение 15 минут при температуре 200 °С и давлении азота 60 атм. Гидрирование стеариновой кислоты (98%, ХимМедСервис, Россия) проводилось в шестиячеечной реакторе Parr Series 5000 Multiple Reactor System (Parr Instrument, США) при следующих условиях: температура – 100 °С, давление водорода – 3 МПа, масса катализатора – 0.05 г, концентрация стеариновой кислоты 1 моль/л. Гексан использовался в качестве растворителя. Образцы жидкой фазы анализировались с помощью хроматографа GC-2010 и масс-спектрометра GCMS-QP2010S (SHIMADZU, Япония).

Основными продуктами реакции были стеариновый альдегид, стеариловый спирт и n-октадекан. Наибольший выход стеарилового спирта (99 %) был получен при использовании Pd-содержащего катализатора.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Rios L.A., Restrepo G.M., Valencia S.H. et al. // Scientia et Technica Año XII, 2006, Vol. 31, p. 221.

УДК: 691.675

Д.Ю. Новоженин

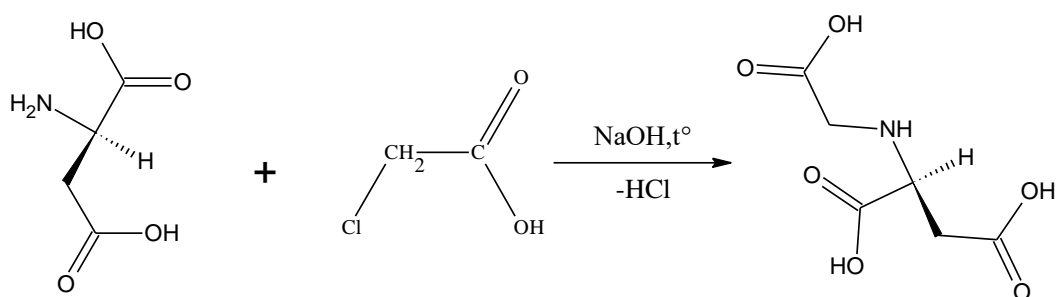
СИНТЕЗ L-N-(КАРБОКСИМЕТИЛ)АСПАРАГИНОВОЙ КИСЛОТЫ

Руководитель: В.М. Никольский

Тверской государственный университет

Кафедра неорганической и аналитической химии

Синтез L-N-(карбоксиметил)аспарагиновой кислоты (L-КМАК) осуществлялся по схеме:



L-аспарагиновая кислота Монохлоруксусная кислота L-N-(карбоксиметил)аспарагиновая кислота

Синтез L-N-(карбоксиметил)аспарагиновой кислоты. В 150 мл воды растворяли 77.5 г (3.2 моль) LiOH, 133 г (1 моль) L-аспарагиновой и 168.0 г (1.2 моль) бромуксусной кислот. Избыток бромуксусной кислоты взят с учетом ее гидролиза в процессе синтеза. Полученный раствор 6 ч нагревали на кипящей водяной бане, после охлаждения до комнатной температуры подкисляли HBr до pH 2–2.5 и разбавляли равным объемом метанола. Выпавший осадок L-КМАК отсасывали на воронке Бюхнера, промывали несколько раз метанолом, сушили на воздухе при 50–60°C и использовали без дополнительной очистки. Выход C₆H₉NO₆ (L-КМАК) – 55%. Молекулярная масса – 191 г/моль, белые кристаллы, t_{пл} = 260°C, растворимость в воде – 0.283 г/100 мл (20°C). Гидроксид лития для создания щелочной среды при синтезе комплексона и бромистоводородную кислоту при подкислении раствора использовали в случае применения метанола для выделения целевого продукта. Этот прием обеспечивал отделение образующегося бромида лития от синтезированного комплексона благодаря высокой растворимости LiBr в метаноле.

Чистота полученного комплексона подтверждена результатами элементного анализа.

C ₆ H ₉ NO ₆	C	H	N
Найдено, %	37,671	4,719	7,348
Вычислено, %	37,696	4,712	7,329

УДК: 541.49: 546.831

А.М. Паламаренко, О.И. Цветкова

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ТВЕРДЫХ КОМПЛЕКСОВ ЦИРКОНИЯ(IV) С АНИОНАМИ С ЦЕФАЛОСПОРИНОВ

Руководитель: В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Путем взаимодействия водных растворов сульфата циркония(IV) и натриевых солей цефалоспориновых антибиотиков цефазолина (НСzl), цефотаксима (НСxm) и цефтриаксона (Н₂Ctx) получены в виде осадков и исследованы их внутрикомплексные соли с Zr(IV). После промывания холодной водой на фильтре, осадки высушены в сушильном шкафу при 80 °С. Состав образцов определен методами синхронного термического анализа на установке Netzsch STA 449 F3 Jupiter и электронно-зондового анализа с помощью энергодисперсионного спектрометра INCA Energy 350, используемого в качестве аналитической приставки к растровому электронному микроскопу JEOL JSM-6610LV. Исследование методом ИК спектроскопии на приборе Bruker Equinox 55 показало смещение полос валентных колебаний $\nu(\text{C}=\text{O})$ амидной и бета-лактамной групп, а также $\nu(\text{C}(\text{O})\text{O}^-)_{\text{as}}$ карбоксилатной группы в сторону более высоких частот по сравнению со спектром соответствующей натриевой соли антибиотика, что можно расценивать как координацию этих групп с Zr(IV).

Образец	$\nu(\text{C}=\text{O})$ β -лактам	$\nu(\text{C}=\text{O})$ амид	$\nu(\text{C}(\text{O})\text{O}^-)_{\text{as}}$
NaCzl	1761	1680	1605
Zr-Czl	1778	1717	1632
NaCxm	1759	1647	1612
Zr-Cxm	1761	1664	1630
Na ₂ Ctx	1740	1649	1610
Zr-Ctx	1769	1664	1630

Полученные твердые комплексные соединения в дальнейшем можно использовать в качестве электродоактивных веществ химических сенсоров, предназначенных для анализа лекарственных форм цефалоспоринов.

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

УДК 537.226.4

Т.Н. Петраханов

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ГИСТЕРЕЗИС В МЕДЬ - И НИКЕЛЬСОДЕРЖАЩИХ КРИСТАЛЛАХ ТРИГЛИЦИНСУЛЬФАТА

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

Настоящая работа поставлена с целью получения информации о диэлектрических свойствах и процессах переключения кристаллов триглицинсульфата (ТГС), содержащих одновременно два лиганда: Cu^{2+} и Ni^{2+} . Исследования проведены на образцах монокристаллов ТГС, содержащих 0,5 мол.% и 3,0 мол.% примесей в растворе и выращенных при температурах 35°C и 52°C.

Емкость образцов измерена с помощью универсального моста Е7-4. Диэлектрическая проницаемость (ϵ) рассчитана по формуле плоского конденсатора. Процессы переключения образцов исследованы с помощью схемы Сойера-Тауэра на частоте 50 Гц. Доменная структура кристаллов выявлена методом растровой электронной микроскопии.

Установлено, что для кристаллов ТГС: Cu^{2+} : Ni^{2+} петли диэлектрического гистерезиса прямоугольны и практически не искажены. По оси ординат петли гистерезиса смещены относительно нулевого уровня, что соответствует униполярному состоянию образцов. Для исследованных кристаллов величины ϵ колеблются от 20 до 50, $\epsilon_{\text{эф}}$ – от $6,4 \cdot 10^4$ до $20 \cdot 10^4$; переключаемой поляризации - $1,5 \cdot 10^{-2}$ до $2,2 \cdot 10^{-2}$ Кл·м⁻², коэрцитивных полей - от $61 \cdot 10^3$ до $88 \cdot 10^3$ В·м⁻¹, тангенса угла диэлектрических потерь - от 0,14 до 0,18, коэффициента униполярности – от 0,3 до 0,5. Однозначной концентрационной зависимости перечисленных характеристик не прослеживается.

Полевые зависимости переключаемой поляризации для кристаллов ТГС: Cu^{2+} : Ni^{2+} резко возрастают в интервале полей $(0,2 - 2,0) \cdot 10^4$ В·м⁻¹ и выходят на насыщение в полях порядка $3 \cdot 10^4$ В·м⁻¹, в то время как для кристаллов беспримесного ТГС требуются поля более высоких напряженностей. Доменная структура кристаллов ТГС: Cu^{2+} : Ni^{2+} состоит из матрицы основного домена, внутри которой располагаются линзовидные микродомены с противоположной ориентацией вектора спонтанной поляризации. В кристаллической решетке кристаллов ТГС ионы меди создают незаряженный, планарный хелатный комплекс $[\text{CuGl}_2]^0$, а ионы никеля - заряженный комплекс $[\text{NiGl}_3]^{-1}$.

УДК: 66.095.63

И.Д. Петухова, Е.Е. Куприянова, М.Е. Маркова

ЖИДКОФАЗНЫЙ СИНТЕЗ ФИШЕРА-ТРОПША НА ЦЕОЛИТНЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ

Руководители: А.А. Степачёва, Э.М. Сульман

Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии и химии

Синтез Фишера-Тропша – гетерогенный синтез углеводородов из синтез-газа в присутствии катализатора. В последнее время большой интерес исследователей вызывает проведение жидкофазного процесса. При этом в жидкой фазе высококипящего инертного растворителя появляется возможность контроля стадии роста цепи за счет снижения растворимости СО, снижения образования кислородсодержащих продуктов и предотвращения реакции конверсии водяного пара [1].

Синтез катализаторов проводился в реакторе высокого давления PARR-4307 при давлении азота (6.0 МПа) и температуре ($T = 473$ К) в течение 15 мин. Полученный катализатор кальцинировали 4 часа при температуре 400 ± 5 °С. В качестве носителя использовали цеолиты H-ZSM-5, H-Beta, H-Mord. Нитраты кобальта, никеля, железа ($\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, х.ч.), гидроксохлорид рутения (RuOHCl_2 , х.ч.) использовали в качестве прекурсоров металла.

Тестирование синтезированных катализаторов было проведено в жидкофазном синтезе Фишера-Тропша. Процесс проводили в стальном реакторе PARR-4307 в присутствии додекана. В качестве синтез-газа использовалась смесь СО и H_2 в объемном соотношении 1:6. Температура процесса составляла 200 °С, общее давление в реакторе – 2 МПа, масса катализатора – 0.1 г, объем растворителя – 30 мл.

Было выявлено, что использование монометаллических катализаторов приводит к формированию циклических и ароматических углеводородов. Наибольшую селективность к алифатическим C_5 - C_7 углеводородам проявляет кобальт-содержащий катализатор, нанесенный на цеолит H-ZSM-5. Использование биметаллических катализаторов приводит к образованию линейных и разветвленных насыщенных C_5 - C_7 углеводородов. Было найдено, что биметаллический 10%Co-1%Ru-HZSM-5 является наиболее оптимальным катализатором для получения жидких углеводородов бензинового ряда.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Брагинский О.Б. // Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева), 2008, Т. ЛП, № 6, сс. 137-146.

УДК: 691.675

О.А. Полунина, Ю.В. Левицкая

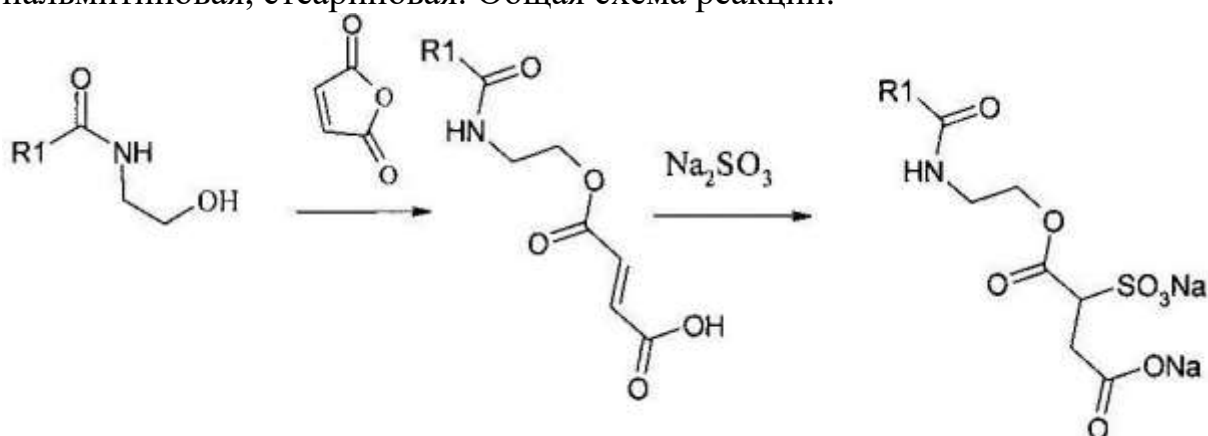
СИНТЕЗ И СВОЙСТВА СУЛЬФОСУКЦИНАТОВ АЛКАНОЛАМИДОВ ЖИРНЫХ КИСЛОТ

Руководитель: С.А. Темникова

Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

Алкилсульфосукцинаты – это один из типов анионных поверхностно-активных веществ (ПАВ), производные янтарной кислоты, которые проявляют хорошее смачивающее, диспергирующее, эмульсифицирующее действие. Применяются в качестве эмульгаторов при эмульсионной и микросуспензионной полимеризации, при получении наноматериалов, вспенивателей резины и пластика, диспергаторов пигментов и красителей, смачивателей в составе клеев, герметиков конструкционных и строительных материалов, при изготовлении косметических и моющих средств.

В данной работе были синтезированы алкилсульфосукцинаты с общей формулой: $\text{RCOHNCH}_2\text{CH}_2\text{OCOCH}(\text{SO}_3\text{Na})\text{CH}_2\text{COONa}$, где $\text{R} = \text{C}_{13}\text{H}_{27}$, $\text{C}_{15}\text{H}_{31}$, $\text{C}_{17}\text{H}_{35}$, на основе малеинового ангидрида и моноэтаноламидов жирных кислот, полученных взаимодействием моноэтаноламина с высшими жирными кислотами – миристиновая, пальмитиновая, стеариновая. Общая схема реакций:



Для синтезированных веществ были определены физико-химические константы: растворимость и температура плавления, исследованы коллоидно-химические свойства их водных растворов. Строение и состав полученных соединений подтверждены данными ИК-спектроскопии.

УДК: 541.64

В.А. Пушкина

ОСОБЕННОСТИ МЕХАНИЗМА ГАЗОЖИДКОСТНОГО ПОЛИАМИДИРОВАНИЯ

Руководитель: В.А Никифоров
Тверской государственный технический университет
Кафедра технологии полимерных материалов

Жирноароматические полиамиды применяются в технологии синтетических бумаг конструкционного и электротехнического назначения, и фильтровальных материалов для тонкой очистки от механических примесей дизельных топлив, технологических растворов, воды специального назначения и электролитов. Перерабатываются жирноароматические полиамиды особыми методами [1].

При переработке необходимо учитывать особенности механизма газожидкостного полиамидирования.

Предложено две версии механизма полиамидирования с получением жирноароматических и алифатических полиамидов.

По конденсационному варианту, стадии начала и образования макромолекул протекают по тонкопленочному механизму, а акцептирование и нейтрализация низкомолекулярного продукта поликонденсации протекает в полном объеме жидкой фазы. Осаждение полимеров происходит по спинодальному механизму из метастабильного растворенного состояния.

По абсорбционному варианту, начало и образование макромолекул протекает в δ -слое жидкой фазы. Концевые группы высокомолекулярных и олигомерных цепей при конденсационном механизме преимущественно карбоксильные, а при абсорбционной версии – аминные.

Практическая ценность выявленных версий при изучении механизма газожидкостной поликонденсации (ГЖПК) полиамидирования состоит в том, что при абсорбционном механизме целесообразен рецикл жидкой фазы для повторного использования аминногрупп олигоамидов. А при тонкослойном конденсационном механизме рецикл нецелесообразен из-за нерреакционной способности концевых карбоксильных групп.

Описанные результаты подтверждены экспериментальными данными на опытных установках ГЖПК [2].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Общая химическая технология полимеров: Учебное пособие / В.А.Никифоров, Е.А. Панкратов, Е.И. Лагушева – Тверь: ТвГТУ, 2014.– 232 с.
2. Газожидкостная поликонденсация: монография / В.А. Никифоров, Е.А. Панкратов, Е.И. Лагушева, А.В. Березкин. – Тверь: ТГТУ, 2004. – 268 с.

УДК 54-328+ 544.527

А.С. Радин

ПРИМЕНЕНИЕ ГЕТЕРОПОЛИКИСЛОТ ТИПА ДОУСОНА ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ГАЗОВЫХ СЕНСОРОВ НА МОНООКСИД УГЛЕРОДА

Руководитель: М. А. Феофанова
Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Монооксид углерода или угарный газ, давно известный своими отравляющими свойствами, выделяется среди других токсических газов отсутствием цвета и запаха, его отравляющий эффект проявляется не сразу, он не сорбируется на угольных фильтрах, что делает его особенно опасным. Данный газ выделяется при неполном сгорании углеродосодержащих соединений - угля, древесины, углеводородного топлива (бензины, керосины), осуществляющегося на сегодняшний повсеместно от печей и бытовых обогревателей до автомобилей, количество которых неуклонно растет, что особенно актуально для мегаполисов с пробками и плохо вентилируемыми участками в виде автомобильных туннелей. Несмотря на дожигатели, концентрация угарного газа все равно достаточно велика, а большинство машин вообще не имеют подобных устройств, потому знать о концентрации окиси углерода просто необходимо.

На сегодняшний день в мире выпускается большое количество газоанализаторов и сигнализаторов угарного газа различного типа: электрохимические, полупроводниковые и термокаталитические, и идея встроить опцию газоанализатора в мобильный телефон, который современный человек носит с собой, становится особенно актуальна. Однако главными преградами для ее реализации являются высокие размеры, стоимость и энергопотребление, или низкая селективность существующих сенсоров.

Одним из путей решения данной проблемы является использование газовых сенсоров на СО резистометрического типа с чувствительным элементом, на основе тонких пленок диоксида кремния, модифицированных гетеролигандными ГПК 2-18 ряда – типа Доусона, в частности вольфрамванадофосфорными, в качестве активного вещества, обеспечивающего селективность и высокую чувствительность на уровне ПДК, по отношению к СО, а также имеющими небольшие размеры и энергопотребление, для того чтобы быть встроенными в смартфон.

В настоящее время нами ведутся исследования в области допирования пленок диоксида кремния различными типами ГПК. Исследуемые нами гетеролигандные ГПК 2-18 ряда на основе ванадия и вольфрама показали свою перспективность в качестве активирующих добавок пленок диоксида кремния для чувствительных элементов сенсоров.

УДК: 621.3.089.52

М. Ю. Рахманин

РАЗРАБОТКА МАЛОШУМЯЩЕГО УСИЛИТЕЛЯ РЧ ДЛЯ ЯМР РЕЛАКСОМЕТРА

Руководитель: А. А. Репин

Тверской государственный университет
Кафедра общей физики

В современной нефтегазовой отрасли широко применяются исследования методом ядерно-магнитной релаксометрии. Из-за высокой стоимости подобного сложного узкоспециализированного оборудования, отсутствия российских аналогов с удовлетворительными техническими характеристиками, было принято решение о самостоятельной разработке ЯМР-релаксометра.

Наиболее жёсткие требования в радиотехнической части устройства выдвигаются к блоку усиления регистрируемого радиочастотного сигнала. При работе на частоте порядка 1 МГц он должен после сигнала возбуждения (до 500 В) регистрировать отклик порядка 10^{-8} - 10^{-9} В и усиливать его с коэффициентом порядка 180 dB.

В результате анализа практического опыта решения подобных проблем при построении малошумящих усилителей (1), (2), а так же подбора современной элементной базы (3), с учетом методов минимизации шумов, фильтрации сигналов, снятия характеристик прибора и пр. на кафедре общей физики был разработан усилитель РЧ для ЯМР-релаксометра со следующими характеристиками:

- Коэффициент усиления (регулируемый) до 180 dB
- Максимальное напряжение на входе 500 В
- Рабочая частота 1 МГц

При этом следует отметить, что при создании использованы общедоступные комплектующие, а себестоимость блока на 2018 год оценивается около 5000 руб.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Low Noise Preamplifier Suitable for High Impedance Sources // *XXV International Scientific Conference Electronics - ET2016, At Sozopol, Bulgaria*
2. Design of ultra low noise amplifiers // *VojtěchJanásek*
3. AD604 - Dual, Ultralow Noise Variable Gain Amplifier // *Analog Devices datasheet*
www.analog.com

УДК: 662.756.3+544.478

Д.В. Рудь, А.А. Гончарова

КОНВЕРСИЯ БИОМАССЫ В БИОДИЗЕЛЬНОЕ ТОПЛИВО ВТОРОГО ПОКОЛЕНИЯ

Руководитель: А.А. Степачёва
Тверской государственный технический университет
Кафедра биотехнологии и химии

В настоящее время конверсия биомассы представляет большой интерес для исследователей. Одним из способов переработки биомассы является производство биотоплива. Биодизель является одним из перспективных видов биотоплива. Как правило, биодизель получают из масел и жиров путем метанолиза [1]. Однако топливо, производимое этим методом, имеет такой недостаток, как плохая стабильность из-за присутствия кислорода. Кроме того, производство биодизеля требует использования сырья определенного качества.

Наиболее перспективным путем для синтеза биодизельного топлива 2-го поколения в виде линейных насыщенных углеводородов с углеродным числом 15-22 является гидроочистка, которая включает следующие процессы – гидродеоксигенирование, гидрокрекинг, гидрирование [2].

В данном исследовании проводилось гидродеоксигенирование стеариновой кислоты в додекане в качестве растворителя. В качестве катализатора использовался палладий, нанесенный на сверхсшитый полистирол типа MN270. Содержание металла варьировалось от 1 до 5% (мас.). Процесс проводился при следующих условиях: давление водорода 0.2 – 0.6 МПа, температура 250 – 300 °С, концентрация стеариновой кислоты 0.05 – 0.2 М. Пробы жидкой фазы отбирались каждый час в ходе процесса и анализировались с помощью ГХМС.

Выявлено, что наиболее эффективной каталитической системой в обоих процессах является катализатор 1%Pd/СПС-MN-270, имеющий высокую площадь поверхности (1300 м²/г) и средний размер пор 4-6 нм. Этот катализатор позволяет достичь высокого выхода гептадекана (99% при 100% конверсии субстрата), при гидродеоксигенировании стеариновой кислоты, выбранной в качестве модельного субстрата.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kalnes T. // International Journal of Chemical Reactor Engineering. 2007. Vol. 5, P. 215.
2. Kubickova I. // Catalysis today. 2005. Vol. 197, P. 106.

УДК:574.24

Л.А. Сквознова

ТЕХНОГЕННОЕ ЗАГРЯЗНЕНИЕ ПОЧВ В ВЕСЬЕГОНСКОМ,
КРАСНОХОЛМСКОМ, БЕЖЕЦКОМ, РАМЕШКОВСКОМ И КАЛИНИНСКОМ
РАЙОНАХ ТВЕРСКОЙ ОБЛАСТИ

Руководитель: А.Ф. Мейсурова
Тверской государственный университет
Кафедра Ботаники

Почвы содержат в себе различные токсичные вещества, в том числе тяжёлые металлы (ТМ). Особый интерес такие исследования представляют в городах, которые не в полной мере охвачены региональной сетью мониторинговых наблюдений [1]. Цель исследования – оценка уровня техногенного загрязнения ТМ почв Весьегонского, Краснохолмского, Бежецкого, Рамешковского и Калининского районов Тверской области.

Общее число пунктов отбора (ПО) почвенных проб в этих районах составило 8: Весьегонский, Бежецкий и Калининский районы по 2 ПО; Краснохолмский и Рамешковский – по 1 ПО. Анализ проб на содержание ТМ проводили с помощью АЭС-ИСП-анализа по стандартной методике [2]. Значения концентраций сравнивали с ПДК. Дополнительно рассчитали суммарный индекс загрязнения почв (Zc) [3].

АЭС-ИСП-анализ почвенных проб из изученных районов позволил выявить 13 ТМ (As, Cd, Cr, Cu, Fe, Mn, Mo, Pb, Sb, Sn, V, W, Zn). Общее число обнаруженных металлов одинаковое во всех изученных районах, кроме Рамешковского, где не была выявлена сурьма. Уровень содержания ТМ не превышает ПДК. Однако, по четырем отдельным металлам (As, Cr, Fe, Sn) имеются превышения в почвенных пробах всех изученных районов. В почвенных пробах из Бежецкого района обнаружено превышение уровня ПДК по свинцу и цинку; Калининского района – по меди и цинку.

Расчёт величин Zc показал разный уровень загрязнения почв. Самый высокий уровень загрязнения почв в Калининском районе (77,2), что связано с близким расположением бывшего полигона ТБО к ПО. В трёх других изученных районах уровень загрязнения соответствует среднему (16–32): Весьегонский – 28,5, Краснохолмский – 23,5; Бежецкий районы – 20,0. В данных районах имеются промышленные предприятия. В Рамешковском районе уровень загрязнений почв самый низкий (5,83).

Таким образом, в почвах изученных районов было выявлено 13 ТМ. Содержание четырех ТМ превышает ПДК повсеместно. Наибольшая величина индекса загрязнения почв выявлена в Калининском районе, где концентрации 6 металлов (As, Cr, Cu, Fe, Sn, Zn) выше нормы; наименьшая величина – в Рамешковском районе, где отмечено 4 металла с концентрацией выше ПДК (As, Cr, Fe, Sn).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Першина Ю.С., Мейсурова А.Ф. Загрязнение почв металлами в Твери; Вестник ТвГУ. Серия: Химия. 2017. № 3. С. 127–138
2. Чегринцев С.Н. Атомно-абсорбционный анализ: методические указания к выполнению лабораторных работ по курсу «Физико-химические методы анализа». Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014. 44 с.
3. Водяницкий Ю.Н. Формулы оценки суммарного загрязнения почв тяжёлыми металлами и металлоидами. Почвоведение, 2010, № 10, с. 1276-1280.

УДК: 54.022

М.И. Скобин, Т.В. Крюков

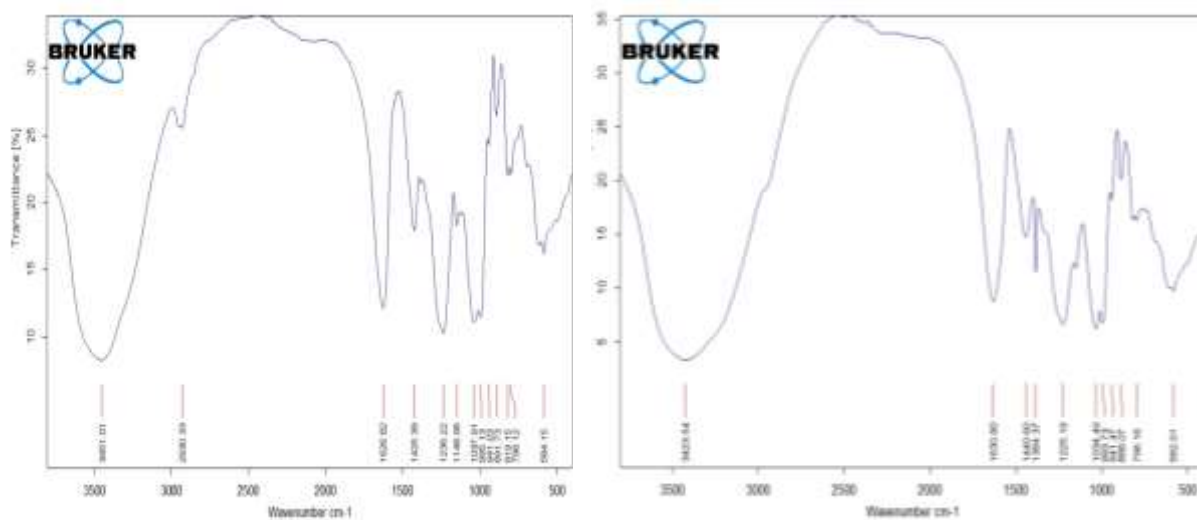
ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТРУКТУРЫ КОМПЛЕКСНОГО СОЕДИНЕНИЯ ВМС ГЕПАРИНА С ЕВРОПИЕМ

Руководитель: М.А. Феофанова

Тверской государственной университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

По результатам проведения ИК спектроскопии были сделаны предположения относительно структуры комплексного соединения $\text{Na}[\text{EuHep}] \cdot n\text{H}_2\text{O}$.

Данные ИК – спектрального отнесения полос поглощения гепарина и $\text{Na}[\text{EuHep}] \cdot n\text{H}_2\text{O}$ показали, что функциональность органической части комплексов сохраняется и является такой же, как и в гепарине.



ИК-спектры ВМС гепарина и $\text{Na}[\text{EuHep}] \cdot n\text{H}_2\text{O}$

К области $1240 - 1220 \text{ cm}^{-1}$, были отнесены асимметричные колебания $\text{O}=\text{S}=\text{O}$, внутри сульфатной группировки. В данной области наблюдается смещение полос поглощения гепарината в низкочастотную область, что объясняется образованием новых связей с ионами Eu^{3+} . В ИК - спектре отчетливо видна полоса поглощения гидроксильной группы ($3500 - 3400 \text{ cm}^{-1}$), которая в результате образования водородных связей сдвигалась в сторону более низких частот. Внутри карбоксильной группы, к симметричным колебаниям связи $\text{C}-\text{O}$ можно отнести полосу поглощения 1430 cm^{-1} , данная полоса сдвигалась в высокочастотную область, что может свидетельствовать об ассоциации, образовании соли. В области отпечатков пальцев у исследуемого образца удалось распознать симметрические валентные колебания $\text{S}=\text{O} - 610 \text{ cm}^{-1}$, где также наблюдался сдвиг в низкочастотную область, относительно гепарина.

УДК: 631.811.98

Е.В. Смирнова

ПОЛУЧЕНИЕ СТИМУЛЯТОРОВ РОСТА СЕЛЬСКОХОЗЯЙСТВЕННЫХ РАСТЕНИЙ ИЗ ОТХОДОВ ЛЕСООБРАБАТЫВАЮЩЕЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

Руководитель: Е.В. Ожимкова

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии и химии

Одной из актуальных проблем рационального природопользования является проблема переработки и утилизации крупнотоннажных промышленных отходов. Лигнин является трудно утилизируемым отходом, который в огромных количествах образуется при переработке древесины на целлюлозно-бумажных и гидролизных предприятиях. Эффективная переработка данного крупнотоннажного отхода лесопереработки в востребованные продукты - актуальная задача комплексного и рационального использования лесных ресурсов. Кроме того, необходимость утилизации существенных объемов лигнина – одна из серьезных экологических проблем.

В работе исследована ростостимулирующая активность образцов лигнина, полученных по методике, представленной в работе [1]. Для проведения экспериментов точную навеску лигнина растворяли в диметилсульфоксиде, после чего готовили серию водных растворов с концентрациями от 10^{-1} до 10^{-9} г/л. Оценку влияния растворов лигнина на прорастание семян проводили в чашках Петри на фильтровальной бумаге, смоченной либо исследуемым раствором, либо водой (контрольный опыт). В каждой серии экспериментов определялись такие параметры, как всхожесть и энергия прорастания семян, средняя длина ростков, прирост сырой биомассы.

Проанализировав полученные экспериментальные данные, установлено, что обработка семян льна раствором лигнина в концентрациях 10^{-1} и 10^{-2} оказывала сильное ингибирующее влияние на прорастание семян. При концентрациях 10^{-3} ... 10^{-4} прорастание семян аналогично контролю, но при концентрациях 10^{-5} ... 10^{-9} отмечается ускоренное прорастание всех семян, начиная со 2-3 дня.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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

УДК 574.24

Д.И. Сойма

**ОЦЕНКА ЗАГРЯЗНЕНИЯ ПОЧВ ТЯЖЕЛЫМИ МЕТАЛЛАМИ В ЛЕСНОМ,
МАКСАТИХИНСКОМ, РАМЕШКОВСКОМ, КАЛИНИНСКОМ РАЙОНАХ
ТВЕРСКОЙ ОБЛАСТИ**

Руководитель: А.Ф. Мейсурова

Тверской государственный университет
Кафедра Ботаники

Почвы способны аккумулировать разнообразные химические вещества и соединения, в том числе тяжелые металлы (ТМ) [1]. Однако спектр измеряемых ТМ обычно не большой. Чаще всего оценку содержания ТМ в почвах проводят в крупных городах, в то время, как в малых городах и небольших населенных пунктах нет [2]. В этой цели работы явилась: оценка содержания ТМ в почвах Восточного и Волжско-Тверецкого хозяйственно-экономических районов Тверской области. Сбор почвенных проб провели на территории Лесного, Максатихинского, Рамешковского и Калининского районов Тверской области. АЭС-ИСП-анализ содержания ТМ провели по стандартной методике с использованием атомно-эмиссионного спектрометра с индуктивно-связанной плазмой iCAP 6300 Duo [1]. Значения концентраций ТМ в пробах сравнивали с ПДК химических веществ в почве (ГН 2.1.7.2041-06, 2006). Оценку суммарной степени загрязнения почв провели по данным о величине суммарного показателя загрязнения (Z_c).

С помощью АЭС-ИСП-анализа в пробах почв изученных районов выявили 13 ТМ (As, Cd, Cr, Cu, Fe, Mn, Mo, Pb, Sb, Sn, V, W, Zn), которые представляют три класса опасности. Содержание большинства ТМ не превышает значения ПДК. Однако среднее содержание по 7 металлам выше нормы. Среди них высокоопасный мышьяк, среднее содержание которого 19,4 мг/кг (ПДК 2мг/кг) и малотоксичное железо с концентрацией 9459,1 мг/кг (ПДК 1000 мг/кг). Наибольшее число ТМ с валовой концентрацией выше ПДК обнаружено в почвенных пробах Максатихинского района – в посёлке Ривицкий, где имеются несанкционированные свалки, проходят автомагистрали и функционирует Максатихинский лесопромышленный комбинат и фанерный цех. В почвенных пробах этого района 7 металлов с концентрацией выше ПДК – As, Cr, Cu, Fe, Pb, Sn, Zn. Расчет величины Z_c показал, что для этого района отмечено самое высокое значение Z_c (18,5). В почвенных пробах Рамешковского района число металлов с концентрациями, превышающими норму наименьшее, как и значение Z_c .

Таким образом, в почвенных пробах изученных районов обнаружили 13 ТМ. Высокий уровень загрязнения почвенного покрова характерен для Максатихинского района (в первую очередь по мышьяку и железу). Самым чистым является Рамешковский район.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мейсурова А.Ф., Иванова С.А. [Техногенное загрязнение почв тяжелыми металлами в г. Вышний Волочек](#)// Вестн. ТвГУ. Сер. Биология и экология. 2018. № 4. С. 203–219.
2. Тихонова А.С., Каплина С.П. Изучение почв поселка городского типа Кесова гора Тверской области // Международный студенческий научный вестник. – 2018. – № 1; URL: <http://www.eduherald.ru/ru/article/view?id=18069> (дата обращения: 25.01.2019).

УДК 541.49:615.33

А.Е. Соловьева, Е.Б. Каштанкина

ГИДРОГЕЛИ НА ОСНОВЕ ЦИСТЕИНА, НИТРАТА СЕРЕБРА И ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ

Руководитель: Д.В. Вишневецкий
Тверской государственный университет, Тверь, Россия
Кафедра физической химии

Гели на основе цистеина, нитрата серебра и полиэтиленгликоля (ПЭГ) разных молекулярных масс (400 и 6000 г/моль) были получены в две стадии. На первой, готовился цистеин-серебряный водный раствор (ЦСР) [1]. Далее, к созревшему в течение 24 ч. ЦСР добавлялся полимер разных концентраций (0.002, 0.01, 0.02, 1 и 2 % масс. в конечной смеси), и наконец к полученной смеси добавлялся сульфат натрия заданной концентрации в качестве инициатора гелеобразования.

Визуальный анализ показал хорошую совместимость ЦСР и полимеров - образование оптически прозрачных гомогенных гелей.

С помощью УФ и ИК-спектроскопии было выяснено, что макромолекулы полимера взаимодействуют с супрамолекулами ЦСР, при этом, не нарушая целостности их структуры.

Исследование реологии полученных композиций методом вибрационной вискозиметрии показало, что добавление полимера вызывает незначительное увеличение вязкостных характеристик гидрогелей по сравнению с контрольным образцом (гидрогель без полимера). При этом гели с ПЭГ-400 оказались более прочными, чем с ПЭГ-6000 тех же концентраций полимера.

Методами рН-анализа, ИК-спектроскопии, измерения размеров образующихся агрегатов и их дзетта-потенциала (ДСР) был подтвержден факт взаимодействия ЦСР и полимеров путем образования водородных связей.

Исследование морфологии гидрогелей (СЭМ) выявило сильное различие в их структуре в зависимости от молекулярной массы ПЭГ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Soft Matter. 2017. V.30. №13. P.5168-5184. DOI: 10.1039/C7SM00772H.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности (проект №4.5508.2017/БЧ) на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.

УДК: 538.9

А.С. Стречень¹, А.А. Вякина², К.К. Сарычева²

МИКРОСТРУКТУРА И МАГНИТНАЯ ДОМЕННАЯ СТРУКТУРА ЧЕЛЯБИНСКОГО МЕТЕОРИТА

Руководитель: Е.М. Семенова

¹Тверской государственной университет, кафедра ФКС

²МОУ «Гимназия №44 г. Твери»

В работе представлены результаты исследования образцов Челябинского метеорита методами оптической (Neophot-30), растровой электронной (*JEOL JSM-6610LV*) и магнитно-силовой (*SolverNext*) микроскопии. Метеорит относится к распространенному классу обыкновенный хондрит, тип *LL5 S4 W0* [1-2].

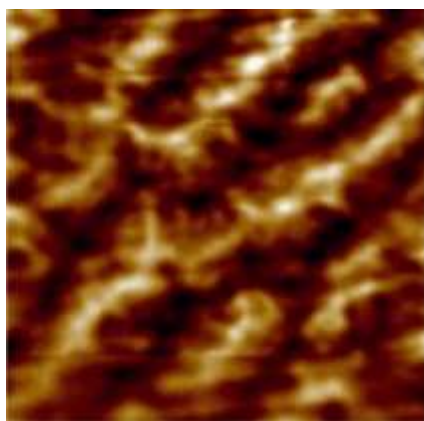


Рис.1. МСМ-изображение на произвольно ориентированной поверхности образца. Размер поля зрения -100x100 мкм.

Микроструктура металлических частиц метеорита ранее исследовалась в работах [1,2], где было показано, что в металлической фазе присутствуют соединения железа-никеля (камасит, тенит), карбиды железа (хаксонит, цементит).

В настоящей работе помимо анализа элементного состава образцов метеорита со светлой литологией выполнялось исследование магнитной доменной структуры. Для выявления доменов наиболее эффективными методами оказались метод магнитного коллоида (Акулова-Биттера) и магнитно-силовой микроскопии. На рис.1 в качестве примера представлено изображение магнитной доменной структуры, выявленной методом магнитно-силовой микроскопии на одной структурных составляющих образцов. Конфигурация доменов типична для магнетиков Fe-Ni типа.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Брусницына Е.В., Яковлев Г.А. // XVI Международная научно-техническая Уральская школа-семинар металлургов – молодых ученых. <http://hdl.handle.net/10995/41849>
2. Брусницына Е.В., Гроховский В.И. // XVII Международная научно-техническая Уральская школа-семинар металлургов-молодых ученых. <http://hdl.handle.net/10995/59747>

УДК 541.49:615.33

Н.-М. Н. Филяровская

ОДНОСТАДИЙНЫЙ СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ ГЕЛЕЙ ИЗ ВОДНОГО РАСТВОРА L-ЦИСТЕИНА С НИТРАТОМ СЕРЕБРА

Руководитель: С. Д. Хижняк

Тверской государственный университет
Кафедра физической химии

Супрамолекулярные гидрогели привлекают повышенное внимание исследователей, как перспективные материалы для биомедицинского применения, и как интересные объекты для изучения процессов самоорганизации. Супрамолекулярные гидрогели могут быть образованы низкомолекулярными соединениями различной природы – пептидами, аминокислотами и их производными и т.д., что обеспечивает их биосовместимость. Целью данной работы является изучение процессов самоорганизации при одностадийном гелеобразовании в низкоконцентрированных водных системах в присутствии хлоридов щелочных металлов.

В образцах на основе L-цистеина (L-Cys) и нитрата серебра варьировали содержание нитрата серебра, при этом молярное соотношение исходных компонентов изменяли в интервале Ag^+/Cys 1,33 – 2,00 мМ, и содержание хлорид-аниона составляло 0,5 – 2,0 мМ. Для исследования процессов гелеобразования были использованы методы – УФ-спектроскопии, динамического светорассеяния (ДСР), вискозиметрии, просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Экспериментально установлено, что при концентрации хлорид-иона в системе менее 0,5 мМ образование геля не происходит, а при концентрации хлорид-аниона, превышающей 2,00 мМ, гели становятся мутными и в них образуется осадок. Гели, в которых концентрация хлорида натрия находится в заявляемых пределах 0,75 – 2,00 мМ устойчивы и через 60 дней их прочность изменяется незначительно. Исследование гелеобразующих растворов методом ДСР показало, что гидродинамический радиус агрегатов, регистрируемых в системе, зависит от концентрации исходных компонентов и времени стояния образца. Результаты, полученные на вибрационном вискозиметре, показывают, что через 10 мин после смешивания исходных компонентов вязкость раствора монотонно возрастает, что свидетельствует о структурировании образца. Согласно данным ПЭМ, в гелях фиксируется сетка пересекающихся цепочек, образованных кластерами. Подобная структура характерна для всех типов гелей, полученных на основе цистеина и нитрата серебра, и, отражает возможную пространственную структуру, формирующейся в сильно разбавленных гелеобразующих растворах.

УДК 621.318.12

А.Е. Хисматулин

ПРОБЛЕМЫ ДОСТОВЕРНОСТИ В ИССЛЕДОВАНИЯХ ПРОЦЕССОВ НАМАГНИЧИВАНИЯ И ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ОБЪЕКТОВ В РАЗОМКНУТОЙ МАГНИТНОЙ ЦЕПИ

Руководитель: А.Г. Пастушенков

Тверской государственной университет
Кафедра физики конденсированного состояния

В настоящее время в магнитоизмерительных устройствах широко используется, так называемая, разомкнутая магнитная цепь, позволяющая располагать вблизи объекта исследования различные системы для дополнительных воздействий, например, нагревания или охлаждения. При реализации индукционно-непрерывного метода и измерении магнитного момента единицы массы в современных измерительных системах, например, вибрационных магнитометрах, используется корректор массы с постоянным шагом дискретизации, могут возникать отклонения в полученных значениях магнитного момента единицы массы ферромагнитных объектов, масса которых изменяется в широких пределах, например, сферы из никеля массой от 6 до 130 мг (диаметром 1 - 3 мм соответственно).

Для решения этой проблемы был сформирован алгоритм оценки достоверности значения ЭДС индукции, возникающей в измерительных катушках, при изменении ширины межполюсного пространства и массы объекта исследования. Учитывалась нелинейность зависимости диаметра объекта исследования от его массы.

Возможные отклонения в полученных значениях магнитного момента единицы массы оценивались в процессе анализа зависимостей ЭДС, возникающей в измерительных катушках от расстояния до объекта исследования для стандартной конфигурации построения межполюсного пространства вибрационного магнитометра ($U_{изм}(X)$). Ширина межполюсного пространства изменялась от 10 до 30 мм, измерительные катушки фиксированы на полюсных поверхностях, их оси параллельны направлению перемагничивающего поля.

Отклонения измеренных значений магнитного параметра при изменении ширины межполюсного пространства от 10 до 30 мм и диаметра исследуемого объекта от 1 до 3 мм изменяется от 13,7 до 4,7%. Изменение диаметра исследуемого объекта от 2 до 3 мм - от 8,5 до 1,5%. Это связано с тем, что постоянство чувствительности в рассматриваемой конфигурации межполюсного пространства некорректируемо и задается его шириной.

УДК 541.49:547.495.9

О.И. Цветкова, А.М. Паламаренко

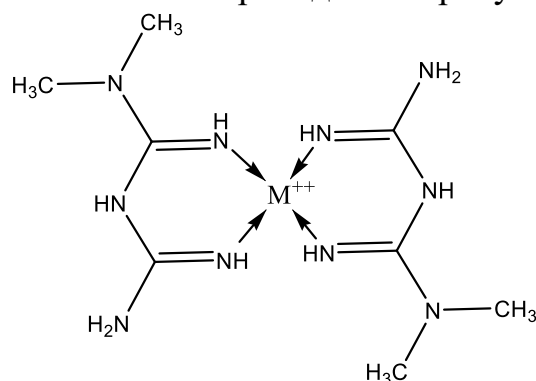
КОМПЛЕКСНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ N,N-ДИМЕТИЛБИГУАНИДА

Руководитель: В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет

Кафедра неорганической и аналитической химии

Комплексные соединения кобальта(II), никеля(II) и меди(II) с N,N-диметилбигуанидом (BG) получены в твердом состоянии в результате взаимодействия водных растворов сульфатов металлов и гидрохлорида BG при pH=10. Образцы были выделены в виде осадков фиолетового (кобальт), оранжевого (никель) и пурпурного (медь) цвета. После промывания на фильтре холодной водой образцы были высушены при комнатной температуре и, затем, при 80 °C в течение 3 часов в сушильном шкафу. Выход продуктов составил: $\text{Cu}(\text{BG})_2\text{SO}_4$ – 33%, $\text{Ni}(\text{BG})_2\text{SO}_4$ – 44%, $\text{Co}(\text{BG})_2\text{SO}_4$ – 28%. Методом электронно-зондового анализа с помощью энергодисперсионного спектрометра INCA Energy 350, используемого в качестве аналитической приставки к растровому электронному микроскопу JEOL JSM-6610LV показано присутствие в образцах углерода, азота, кислорода и серы, а также металла, соответствующего комплексу (меди, никеля или кобальта). Термические характеристики образцов исследованы методом синхронного ТГ/ДСК анализа на установке Netzsch STA 449 F3 Jupiter. Также было проведено исследование методом ИК спектроскопии на приборе Bruker Equinox 55. Предполагаемая структурная формула комплексов приведена на рисунке:



N,N-диметилбигуанид (метформин) широко используется в медицинской практике для лечения сахарного диабета. В лекарственных формах (таблетках) используется в виде гидрохлорида.

Эксперименты выполнены на приборах Тверского регионального межведомственного центра коллективного пользования.

УДК 541.49:615.33

К.А. Чирик, Р.В. Шишова

ГИДРОГЕЛИ НА ОСНОВЕ ЦИСТЕИНА, НИТРАТА СЕРЕБРА, ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА И ПОЛИВИНИЛПИРРОЛИДОНА

Руководитель: Д.В. Вишневецкий
Тверской государственный университет, Тверь, Россия
Кафедра физической химии

Гели на основе цистеина, нитрата серебра и полимеров (поливиниловый спирт – ПВС, поливинилпирролидон – ПВП) были получены в две стадии. На первой, готовился цистеин-серебряный водный раствор (ЦСР) [1]. Далее, к созревшему в течение 24 ч. ЦСР добавлялся полимер разных концентраций (0.002, 0.01, 0.02, 1 и 2 % масс. в конечной смеси), и наконец к полученной смеси добавлялся сульфат натрия заданной концентрации в качестве инициатора гелеобразования.

Визуальный анализ показал хорошую совместимость ЦСР и полимеров - образование оптически прозрачных гомогенных гелей.

С помощью УФ и ИК-спектроскопии было выяснено, что макромолекулы полимера взаимодействуют с супрамолекулами ЦСР, при этом, не нарушая целостности их структуры.

Исследование реологии полученных композиций методом вибрационной вискозиметрии показало, что добавление полимера вызывает увеличение вязкостных характеристик гидрогелей по сравнению с контрольным образцом (гидрогель без полимера). При этом гели с ПВС в 2 раза более прочные, чем с ПВП тех же концентраций полимера. Исследование тиксотропии гидрогелей показало, что системы с ПВС обладают самой высокой стабильностью во времени. Методами рН-анализа, ИК-спектроскопии, измерения размеров образующихся агрегатов и их дзетта-потенциала (ДСР) был подтвержден факт взаимодействия ЦСР и полимеров путем образования водородных связей.

Исследование морфологии гидрогелей (СЭМ) выявило сильное различие в их структуре. Для ПВС в независимости от молекулярной массы получалась регулярная пористая структура, тогда как для ПВП – нерегулярная пористая структура.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Soft Matter. 2017. V.30. №13. P.5168-5184. DOI: 10.1039/C7SM00772H.
Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности (проект №4.5508.2017/БЧ) на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета

УДК: 54-112

Л.А. Шарапова

ОЦЕНКА КАЧЕСТВА ВОДЫ ПРИРОДНЫХ ИСТОЧНИКОВ ВЕРХНЕВОЛЖЬЯ

Руководитель: В.М. Никольский
Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Анализ воды – это наиболее эффективный метод исследования воды, позволяющий с большой точностью определить общие и органолептические показатели, минеральный состав, содержание биогенных элементов, металлов и т.д. Важным аспектом исследования природных вод является оценка их загрязненности в соответствии с гигиеническими и рыбохозяйственными требованиями в условиях постоянного роста масштабов влияния антропогенных факторов. В ходе изучения состава воды из природных источников Тверской области нами были получены данные по наличию солей жесткости (кальция и магния), сульфат и гидрокарбонат ионов, железа, а также кислотность среды. Время отбора проб – осень 2018 года.

Таблица. Результаты оценки качества воды природных источников Верхневолжья

Источник	pH	Кальций, мг/л	Магний, мг/л	Общая жесткость , мг-э/л	Гидрокарбонат – ионы, мг/л	Сульфат- ионы, мг/л	Железо, мг/л
Исток Волги	6,88	7,21	2,92	0,59	29,33	16,12	0,47
Оковецкий родник	8,14	58,91	15,32	4,20	133,31	165,30	0,16
Родник д. Сиговка	7,55	100,20	10,46	5,84	233,15	236,92	0,29
ПДК	6,50- 9,00	-	-	Не более 7,00	400	500	0,30

Из табл. видно, что вода анализируемых источников в основном соответствует гигиеническим требованиям. Так в роднике деревни Сиговка (Осташковский район) и в Оковецком источнике (Селижаровский район) вода имеет среднюю жесткость и содержание в ней железа не превышает ПДК. Однако, вода истока Волги хотя и очень мягкая (практически отсутствуют антропогенные загрязнения), но содержит в своем составе железо в количестве, в 1,5 раза превышающем норму. В связи с тем, что обычно в водоисточниках наблюдаются сезонные колебания жесткости с максимумом осенью, а минимальным этот показатель бывает во время паводка весной, мы планируем осуществить сравнительный анализ весенних проб воды указанных источников.

УДК 547.556.9

Шишкова К.В

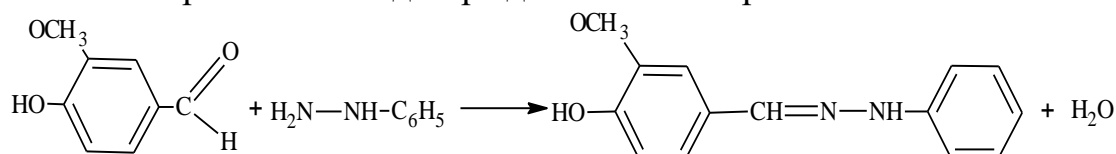
СИНТЕЗ АЗОСОДЕРЖАЩЕГО ЛИГАНДА НА ОСНОВЕ 4-ГИДРОКСИ-3-МЕТОКСИБЕНЗАЛЬДЕГИДА

Руководитель: И.Ю. Егорова

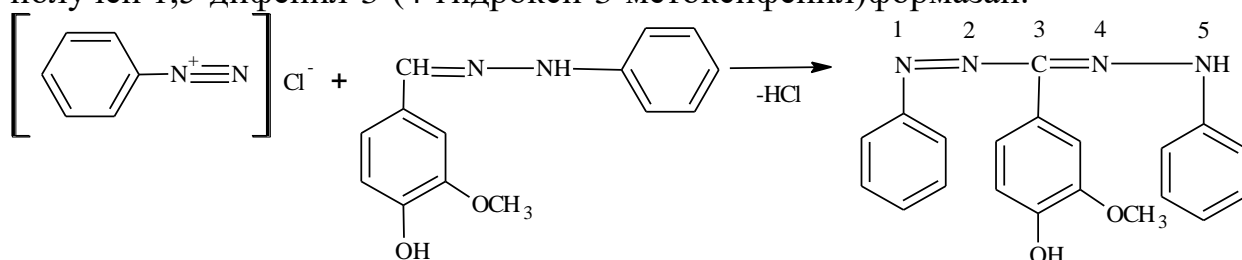
Тверской государственный университет
Кафедра органической и биоорганической химии

К производным гидразина относится азогидразон муравьиной кислоты. Лиганды на основе азогидразона широко применяются в органическом синтезе. На их основе получают химические и электрохимические сенсоры, тест-средства для экспресс-анализа, а также в качестве спектрофотометрических реагентов для определения металлов. Азогидразоновые (формазановые) красители проявляют высокую водо- и светостойкость, хорошие цветовые качества и применяются для крашения различных материалов. Представленная работа посвящена получению азотсодержащего лиганда – 1,5-дифенил-3-(4-гидрокси-3-метоксифенил)формаза на основе 4-гидрокси-3-метоксибензальдегида.

Получение азогидразона проводили в несколько стадий. На первой получен гидразон ванилина (4-гидрокси-3-метоксибензальдегида), строение которого было подтверждено ИК-спектром.



Диазотированием анилина азотистой кислотой в водном растворе получен фенилдиазоний хлорид, который без выделения из раствора, введен в реакцию азосочетания с гидразоном ванилина. В результате чего получен 1,5-дифенил-3-(4-гидрокси-3-метоксифенил)формазан.



Полученное соединение представляет собой мелкокристаллическое вязкое вещество темно-фиолетового цвета. Исследована растворимость и температура плавления. Строение подтверждено данными ИК-спектроскопического анализа.

УДК: 537.226.4

М.В. Шутов

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ОТКЛИК МОНОКРИСТАЛЛОВ 0.955PZN – 0.045PT

Руководитель: И.Л. Кислова

Тверской государственный университет
Кафедра физики конденсированного состояния

Монокристаллы на основе $\text{Pb}(\text{Zn}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$ и PbTiO_3 (PZN-PT) со структурой перовскита относятся к классу релаксорных сегнетоэлектриков. Представляет интерес исследование диэлектрических свойств кристаллических образцов PZN-PT. Монокристаллические срезы в виде пластин характеризуются различными свойствами из-за сложной доменной структуры и фазового состава кристалла.

В настоящей работе исследованы монокристаллические пластины релаксорного сегнетоэлектрика 0.955PZN – 0.045PT. Данный состав принадлежит ромбоэдрической фазе при комнатной температуре. Из монокристалла вырезались пластины с ориентацией (001) и (111). Образцы с ориентацией (001) обладают наиболее ярко выраженными пьезоэлектрическими свойствами. У пластин с ориентацией (111) спонтанная поляризация перпендикулярна плоскости пластины.

Диэлектрические свойства образцов исследовались с помощью измерителя иммитанса E7-20. Установлено, что диэлектрическая проницаемость образцов с ориентацией (001) составляет приблизительно 4000 (при частоте измерительного поля 1 кГц), что значительно превышает значение диэлектрической проницаемости в направлении (111), которое равно ~ 600 . В тоже время величина тангенса угла диэлектрических потерь зависит от ориентации среза незначительно и составляет приблизительно $7 \cdot 10^{-3}$ для направления (001) и $5 \cdot 10^{-3}$ для направления (111). Необходимо также отметить, что дисперсия диэлектрических характеристик в диапазоне $10 - 10^6$ Гц определяется ориентацией монокристаллических пластин релаксорного сегнетоэлектрика 0.955PZN – 0.045PT. Наиболее ярко выраженной дисперсией обладают пластины с ориентацией (001).

Процессы переключения в исследуемых образцах изучены на основе данных петель диэлектрического гистерезиса, которые получены методом Сойера-Гауэра. Петли получены в полях амплитудой до 20 кВ/см. Установлено, что при комнатной температуре остаточной поляризации, определяемой по петле гистерезиса, составляет 40 мкКл/см^2 для пластины среза (111) и 25 мкКл/см^2 для пластины среза (001), величина коэрцитивного поля равна 3 кВ/см и 5 кВ/см, соответственно.

УДК: 662.756.3+544.478

Н.С. Яблокова, А.М. Семенова

СВЕРХКРИТИЧЕСКОЕ ДЕОКСИГЕНИРОВАНИЕ ЖИРНЫХ КИСЛОТ

Руководитель: А.А. Степачёва

Тверской государственный технический университет

Кафедра биотехнологии и химии

Ограниченность ископаемых источников энергии приводит к росту интереса к возобновляемым топливам. Биомасса является наиболее перспективным ресурсом для производства энергии. Сегодня триглицериды являются одним из самых доступных возобновляемых источников сырья для производства биотоплива [1]. Деоксигенирование растительных масел и их компонентов является одной из альтернатив классической переэтерификации. Этот процесс позволяет решать основные проблемы классической переэтерификации, приводящей к получению топлив с более низкой кислотностью, меньшей вязкостью и более высоким цетановым числом (до 99) [2]. Удаление кислорода из триглицеридов путем деоксигенирования происходит на классических катализаторах NiMo/Al₂O₃, CoMo/Al₂O₃ или благородных металлах (Pt/C, Pd/C) [2]. Однако для получения насыщенных бескислородных соединений требуется использование достаточно большого количества водорода. Высокий расход водорода приводит к достаточному увеличению стоимости деоксигенирования, что делает полученное топливо неконкурентоспособным.

В данной работе мы сообщаем о новом методе конверсии жирных кислот в углеводородное топливо без потребления водорода. Деоксигенирование стеариновой кислоты было проведено в среде сверхкритического гексана в присутствии Ni-содержащих катализаторов, синтезированных методом гидротермального осаждения [3]. Изучено влияние носителя и содержания металла на выход целевых продуктов конверсии стеариновой кислоты в углеводороды. Наибольшая селективность к н-гептадекану (более 90 мас. %) наблюдалась при использовании 10% Ni/СПС катализатора. Этот катализатор также показал высокую стабильность.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Peralta-Ruiza Y. et al. // Chemical Engineering Transactions, 2018, Vol. 70, pp. 1045-150.
2. de Sousa F.P. et al. // Fuel Processing Technology, 2016, Vol. 143, pp. 35-42.
3. Stepacheva A.A. et al. // Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis, 2018, Vol. 125, pp. 213-226.

Заочная секция конференции

УДК: 547.458.81

В.С. Антонова

Влияние гидротермических воздействий на удельную поверхность
целлюлозного волокна

Руководитель: И.И. Осовская

Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и
дизайна Высшая школа технологии и энергетики

Проведено исследование термо-, влагообработки на гидрофильные свойства целлюлозных волокон. В качестве целлюлозного волокна использовали сульфатную беленую целлюлозу из лиственных пород древесины. Для эксперимента были отобраны образцы производственной листовой целлюлозы, высушенной на пресс-пате и образцы из потока во влажном состоянии. Обработку воздушно-сухой целлюлозы водяным паром проводили в автоклаве в условиях постоянной относительной влажности 100 % при различных температурах и времени воздействия. В качестве методов исследования целлюлозы были использованы: статический метод сорбции паров воды в широком диапазоне относительных давлений; калориметрический для измерения теплот гидратации модифицированной целлюлозы; вискозиметрический для определения средней степени полимеризации (растворитель - железовиннонатриевый комплекс), рентгенографический для определения степени упорядоченности. Показана возможность использования данной обработки для восстановления субмикроскопической структуры целлюлозы. Исследования выявили полное восстановление капиллярно-пористой структуры водяным паром при температуре 438 К 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. На основании экспериментальных данных рассчитана удельная поверхность целлюлозного волокна, подвергнутого гидротермическим воздействиям при оптимальных условиях обработки, и целлюлозного волокна, не прошедшего стадию сушки. Расчет удельной поверхности показал увеличение пор целлюлозного волокна, обработанного насыщенным паром, на 10 % по сравнению с необработанным целлюлозным волокном. Следовательно, обработка сухого целлюлозного материала насыщенным паром при высокой температуре и малом времени воздействия приводит к раскрытию сомкнувшихся при сушке пор и капилляров, к увеличению сорбирующей поверхности целлюлозы.

УДК: 543.64

И.П. Антонова

КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ АСКОРБИНОВОЙ КИСЛОТЫ В ПРОДУКТАХ РАСТИТЕЛЬНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ МЕТОДОМ ЙОДОМЕТРИЧЕСКОГО ТИТРОВАНИЯ

Руководитель: Баранова Н.В.

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Аскорбиновая кислота, известная всем также как витамин С, участвует в процессах тканевого дыхания, вступая в окислительно-восстановительные реакции, активизирует процессы деления клеток и регенерации тканей, влияет на процессы биосинтеза белка и его состав, повышает иммунитет. Люди должны получать аскорбиновую кислоту с пищей, т.к. она не синтезируется организмом и может поступать только с пищей [1]. Физиологическая потребность для взрослых — 90 мг/сутки (беременным женщинам рекомендуется употреблять на 10 мг больше, кормящим — на 30 мг). Физиологическая потребность для детей — от 30 до 90 мг/сутки в зависимости от возраста. Для курящих людей необходимо увеличить суточную норму потребления витамина С на 35 мг/сутки [1].

В связи с этим была проведена работа по количественному определению аскорбиновой кислоты в продуктах растительного происхождения методом йодометрического титрования. Результаты анализа приведены в таблице 1.

Таблица 1

Содержание аскорбиновой кислоты в продуктах растительного происхождения

Исследуемый продукт	Объем иссл. р-ра, мл	C_{I_2} , моль/л	Объем I_2 , ушедший на титрование, мл	$C_{аск.к-ты}$	$m_{аск.к-ты}$, мг
Яблоко сорта Грени Смит	10	0,0241	0,5	0,00120	21,02
Яблоко сорта Голден Делишес	10		0,4	0,00097	16,97
Яблоко красное	10		0,2	0,00048	8,48
Плоды шиповника	10		14,9	0,03590	631,99

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Машковский, М.Д. Лекарственные средства: в 2 т./М.Д. Машковский. - 18-е изд., перераб. и доп.- М.: Новая волна, 2010. - 1234 с.

УДК: 691.675

М.А. Байголова

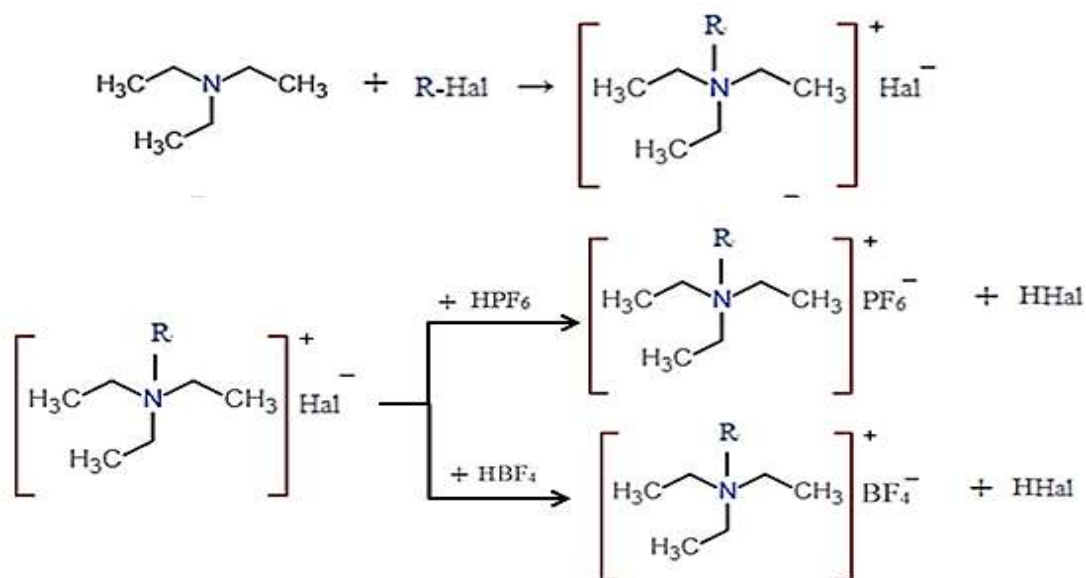
ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ АММОНИЯ НА ИХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Руководитель: О.Е. Журавлев

Тверской государственный университет

Кафедра органической химии

Термин «ионные жидкости» означает класс солей с температурами плавления ниже 100°C. Природа аниона в ионной жидкости (ИЖ) в большей мере влияет на свойства этих соединений, такие как: вязкость, температура плавления, термическая и электрохимическая стабильность, полярность и др. Для применения ИЖ в качестве электролитов, необходимы знания о влиянии структуры ионных жидкостей на их электропроводность как в чистом виде, так и в растворах. Поэтому, целью данной работы было установление влияния структуры катиона и природы аниона на электропроводность разбавленных растворов ИЖ на основе четвертичных солей аммония в ацетонитриле. Синтез ионных жидкостей осуществлялся в две стадии (схема).



R: CH₃, C₄H₉, C₆H₁₃, C₆H₅CH₂;

Hal: Br, I.

Электропроводность была исследована кондуктометрическим методом, путем приготовления серии растворов различной концентрации каждой ионной жидкости в ацетонитриле.

УДК 665

А.М. Бородина, А.П. Васильева

ВЛИЯНИЕ pH СРЕДЫ НА ВЯЗКОСТЬ И ПОВЕРХНОСТНУЮ АКТИВНОСТЬ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ФОРМ ГУАРОВОЙ КАМЕДИ-МАТЕРИАЛА ДЛЯ ОБОЛОЧЕК КАПСУЛ

Руководитель: И.И. Осовская

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

Широкое применение гуаровой камеди обусловлено ее растительным происхождением, нетоксичностью и биоразлагаемостью [1]. Патентный поиск и обзор литературы показали, что гуаровая камедь обладает свойствами, также необходимыми для использования её в качестве полимерного связующего в различных производствах. Из литературы известно, что сильные кислоты и щелочи приводят к изменению свойств гуаровой камеди; однако имеющихся данных недостаточно для научного обоснования этого явления. Изучение этого вопроса имеет прикладное значение в связи с частой необходимостью использования гуаровой камеди в средах с различными pH, в том числе в качестве связующего для получения оболочек капсул.

Новым в работе является получение модифицированных форм гуаровой камеди с целью повышения её поверхностной активности. Изучены коллоидно-химические свойства камеди в широкой области pH и температур. Измерение поверхностного натяжения, определение ККМ, расчет поверхностной активности и адсорбции исследуемых модифицированных гуаровых камедей показало высокие значения измеряемых величин. Установлена стабильность гуаровой камеди модифицированной при температуре не выше 60 °С и pH 6-9. При повышении температуры наблюдается расслоение раствора, которое исчезает при его охлаждении. Выявлены понижение в несколько раз условной вязкости для модифицированной камеди, а именно, с 55 до 11 секунд при концентрации раствора - 1% и резкое снижение времени растворения в сравнении с немодифицированной формой, а именно, с 24 часов до 5-10 минут при температуре 25- 35 °С.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Антипина М. Н. Автореферат дис. Полимерные мультислойные капсулы для обеспечения оптимального биоэффекта лекарственных препаратов и активных веществ, Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского.- Саратов, 2016

УДК 541.127

Е.И. Бочкова

КИНЕТИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГАЛЕНИТА С РАСТВОРАМИ АЗОТНОЙ КИСЛОТЫ

Руководитель: А.Е. Соболев

Тверской государственный технический университет

Кафедра химии

Методами вращающегося диска и полного факторного эксперимента изучена кинетика взаимодействия галенита (сульфида свинца) с растворами азотной кислоты. Комплексный анализ полученных кинетических характеристик позволил установить режимы взаимодействия, определить макромеханизм и выявить лимитирующие стадии процесса.

Установлено, что логарифмическая зависимость скорости растворения галенита W от концентрации азотной кислоты C имеет три области: медленного роста W с увеличением C (при $C < 0,5$ моль/дм³), интенсивного роста W (при $C = 0,5 \dots 6,0$ моль/дм³) и снижения W (при $C > 6,0$ моль/дм³).

В результате анализа кинетических моделей процесса, построенных для каждой из указанных областей, найдено, что при $C < 6,0$ моль/дм³ взаимодействие сульфида свинца с азотной кислотой протекает в кинетическом режиме. Наиболее вероятная стадия процесса – химическое взаимодействие PbS и HNO_3 . Отмечено автокаталитическое действие продуктов восстановления кислоты на скорость окисления: увеличение частоты вращения диска вызывает унос каталитически активных продуктов восстановления кислоты от поверхности и приводит к снижению скорости взаимодействия. На основании полученных данных предложен вероятный механизм взаимодействия галенита с азотной кислотой.

В области малых концентраций HNO_3 (при $C < 0,5$ моль/дм³) отмечено появление диффузионных затруднений. При концентрациях кислоты, больших 6 моль/дм³, реализуется близкий к диффузионному смешанный режим взаимодействия. Показано, что причиной снижения скорости взаимодействия сульфида свинца с концентрированной азотной кислотой является уменьшение растворимости продуктов реакции. Наиболее вероятная стадия процесса – диффузия $Pb(NO_3)_2$ от поверхности диска в объем раствора. Расчет диффузионного потока нитрата свинца подтвердил это предположение. Результаты исследования расширяют базу данных по кинетике гидрохимического окисления сульфидов металлов и могут быть использованы для разработки рекомендаций по эффективному комплексному использованию свинцовых руд и концентратов.

УДК: 546.06

А.А. Варламова

МОДИФИКАЦИЯ АНТИДОТНЫХ КОМПОЗИЦИЙ, ТИПА АЛЬБИТ, С ЦЕЛЬЮ ОПТИМИЗАЦИИ ИХ СОСТАВА

Руководитель: В.М. Никольский
Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Для снижения фитотоксического действия гербицидов на сельскохозяйственные культуры большое распространение получило применение препаратов антидотов (антистрессантов). В [1] показана антистрессовая активность биопрепарата альбит на ряде основных культур.

В состав препарата входит раствор макро- и микроэлементов, хвойный экстракт, хлорофилло-каротиновая паста в присутствии гидролизата бактерий *Pseudomonas aureofaciens* ВКМ В-1973Д и гидролизата бактерий *Bacillus megaterium*, содержащий биополимер поли- β -гидроксимасляную кислоту.

Усовершенствованный состав этого антидота вместо 0,4 % поли- β -гидроксимасляной кислоты включен в качестве мощного комплексообразователя L-изомер универсального и экологически безопасного комплексона N-(карбоксиметил)аспарагиновой кислоты [2].

Наибольшей эффективностью обладают препараты на основе L-изомеров, тогда как D- изомеры либо неэффективны, либо вовсе могут нанести вред растительному организму. Кроме эффективной транспортной функции по доставке в растения макро- и микроэлементов у таких комплексонов проявляется еще одно важнейшее свойство – способность этих соединений на свету в условиях живой природы распадаться на фрагменты, в состав которых входят аминокислоты в усвояемом виде.

В отличие от других препаратов данный комплексон не переходит в окружающую среду и не входит в состав сельхозпродукции, а значит не портит вкус и другие положительные свойства продуктов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гамуев В.В., Рябчинский А.В., Злотников А.К., и др. Альбит в качестве антидота при использовании с гербицидами // Защита и карантин растений, 2007 №7, С. 25-27.
2. Loginova E.S., Nikol'skii V.M. Biodegradable chelating agents. Effect of optical isomerism on the physicochemical characteristics // Russian Journal of Physical Chemistry B, 2017, V. 11, No. 4, P. 708-713.

УДК: 54.057

А.А. Варламова, Е.С. Биберина

СИНТЕЗ БИОРАЗЛАГАЕМОГО L-ИЗОМЕРА N-(КАРБОКСИМЕТИЛ)АСПАРАГИНОВОЙ КИСЛОТЫ

Руководитель: В.М. Никольский
Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

В настоящее время в различных отраслях промышленности широко применяются комплексоны – органические полидентатные лиганды группы аминополикарбоновых кислот. Большинство комплексонов являются производными или аналогами этилендиаминтетрауксусной кислоты. Такие комплексоны являются одними из наиболее опасных загрязнителей окружающей среды. С целью их замены нами синтезирован биологически активный экологически безопасный комплексон L-изомер N-(карбоксиметил)аспарагиновой кислоты (L-КМАК).

Важнейшей особенностью данного комплексона, синтезированного на базе аспарагиновой аминокислоты [1], является экологическая безопасность вследствие того, что под действием солнечного света он способен к разложению.

При исследовании ИК-спектра порошкообразной L-аспарагиновой кислоты было установлено, что в твердом состоянии она имеет бетаиновую структуру. Это подтверждается наличием полосы поглощения при 1610 см^{-1} . В ИК-спектре L-аспарагиновой кислоты отсутствует полоса поглощения в области $1740\text{--}1750\text{ см}^{-1}$, что указывает на то, что протон локализован не при карбоксилат-ионе, а при аминогруппе, что служит дополнительным доказательством наличия бетаиновой структуры. Наличие полосы поглощения при 1418 см^{-1} свидетельствует об образовании водородных связей.

Атом азота L-КМАК имеет более высокую основность ($\text{p}K_3 = 10.42$) по сравнению с рацематом КМАК ($\text{p}K_3 = 9.68$) [2]. Это может быть объяснено образованием дополнительного цикла ионизированной α -карбоксильной группы и протонированной аминогруппы с молекулой воды, образующей этот цикл за счет водородных связей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Loginova E.S., Nikol'skii V.M., Tolkacheva L.N. et all. Synthesis and some properties of complexones, succinic acid derivatives // Russian Chemical Bulletin, 2016, V. 65, No 9, P. 2206-2210, DOI: 10.1007/s11172-016-1569-7/
2. Князева Н.Е., Никольский В.М., Горелов И.П. // Журнал неорганической химии. 2002. Т. 28. № 2. С. 127..

УДК: 538.956

Я.В. Воробьева

ИК-СПЕКТРОСКОПИЯ КОМПОЗИТНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК

Руководитель: Е.В. Барабанова

Тверской государственный университет

Кафедра прикладной физики

В работе методом ИК-спектроскопии исследовались спектры пропускания полимерных пленок на основе полистирола с наполнителем в виде частиц керамики цирконата-титаната свинца (ЦТС). Пленки создавались из раствора полистирола в толуоле. Наполнитель вводился в объемных концентрациях 10, 20, 35 и 50 %. Как видно из рис. 1 спектр полистирольной пленки, полученной из раствора, обладает меньшей прозрачностью, чем эталонная пленка, полученная из расплава. Это можно объяснить рассеянием падающего излучения на порах, формирующихся при застывании пленки из раствора при испарении толуола. К полосам поглощения полистирола в пленке, полученной из раствора, добавляются полосы поглощения толуола. Наиболее интенсивной является полоса при 1072 см^{-1} .

Введение даже небольшого количества керамики в полимер приводит к тому, что пленка становится полностью непрозрачной за исключением небольшого участка в области «отпечатков пальцев». Пики пропускания расположены четко между полосами поглощения полистирола и толуола и соответствуют $449, 889, 935$ и 1228 см^{-1} . Но интенсивность их невелика и уменьшается с увеличением концентрации наполнителя. Следовательно, область прозрачности ЦТС накладывается на область характеристических частот полистирола, что приводит к пропусканию композитной пленки в узком частотном диапазоне. Но при большой концентрации наполнителя происходит рассеяние света на порах и границах зерен, что делает композит полностью непрозрачным.

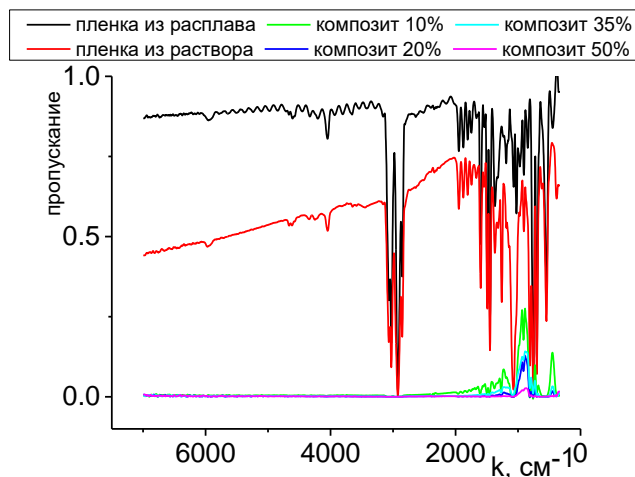


Рисунок 1. Спектр пропускания пленок на основе полистирола.

УДК:543.226

К.Д. Горбач

БИСЧЕТВЕРТИЧНЫЕ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫЕ ВЕЩЕСТВА N-АЛКИЛПИПЕРИДИНИЯ

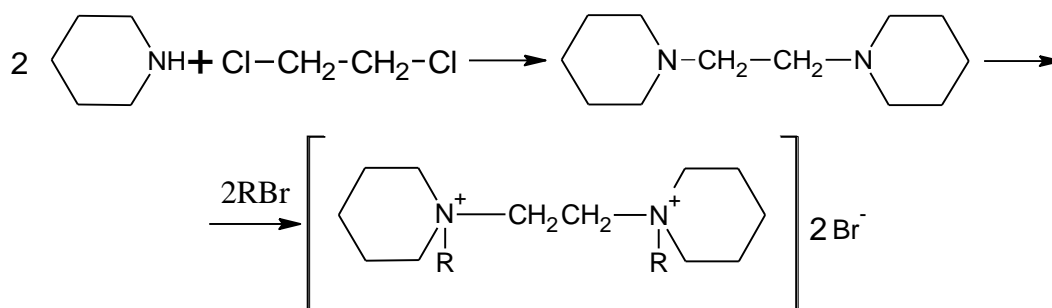
Руководитель: Л.И. Ворончихина

Тверской государственный университет

Кафедра органической химии

Новый класс поверхностно-активных веществ (ПАВ) известный как гемини-ПАВ привлекает к себе внимание и значительный интерес как с теоретической так и с практической точек зрения. Это обусловлено специфическими свойствами ПАВ и показана перспектива использования геминальных ПАВ в качестве среды для химических реакций. Кроме того такие ПАВ образуют везикулы и жидкокристаллические фазы в широкой области концентраций. Это свойство перспективно для практического использования, например для изготовления мезопористых молекулярных сит или темплат.

В настоящей работе синтезированы бисчетвертичные геминальные ПАВ пиперидина (Pip), представляющие собой катионные ПАВ (схема I) и изучена их термическая стабильность.



где R=C₄H₉; C₁₀H₂₁; C₁₂H₂₅; C₁₆H₃₃.

Согласно данным термогравиметрического анализа соединения устойчивы до 200°C, разлагаются в две стадии и длина радикала практически не влияет на термическую стабильность. Соединения перспективны как ингибиторы кислотной коррозии и биологически активные вещества.

УДК 676.41

С.А. Горбачев, М.А. Листратенко

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ОРГАНОНЕОРГАНИЧЕСКОГО ГИБРИДА МКЦ - ОКСИД ТИТАНА

Руководитель: И.И. Осовская
Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и
дизайна
Высшая школа технологии и энергетики

Введение в микрокристаллическую целлюлозу наночастиц оксида титана влияет на фотокаталитическое окисление красителя [1]. Фотокатализаторы под воздействием светового потока способны эффективно функционировать, что дает возможность использовать солнечное излучение для проведения различных химических реакций. Фотокаталитические реакции могут протекать с высокой скоростью даже при сравнительно низких значениях температуры. Установлено, что фотокаталитическое окисление способно разрушить практически любые органические соединения до неорганических веществ, что может быть достаточно эффективно использовано для очистки окружающей среды. В эксперименте источником солнечного света явилась ультрафиолетовая лампа со светофильтром, имитирующим дневной свет [2]. В данном исследовании проводилось фотокаталитическое окисление метиленового голубого. Под действием УФ облучения гибрид окисляет краситель, интенсивность его окраски понижается. Эксперимент показал, что полученный гибрид способен практически в 10 раз снизить концентрацию красителя за короткий промежуток времени.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Daghbir R., Drogui P., Robert D. Modified TiO₂ for environmental photocatalytic applications: a review //Industrial & Engineering Chemistry Research. – 2013. – V.52. – №. 10. – P. 3581-3599.
2. Осовская И.И., Горбачев С.А., Листратенко М.А., Химич Н.Н. Синтез органо-неорганического гибрида микрокристаллическая целлюлоза - оксид титана. Химические волокна 5, с 30- 33 (2018).

УДК: 547-304.2

С.С. Давинян

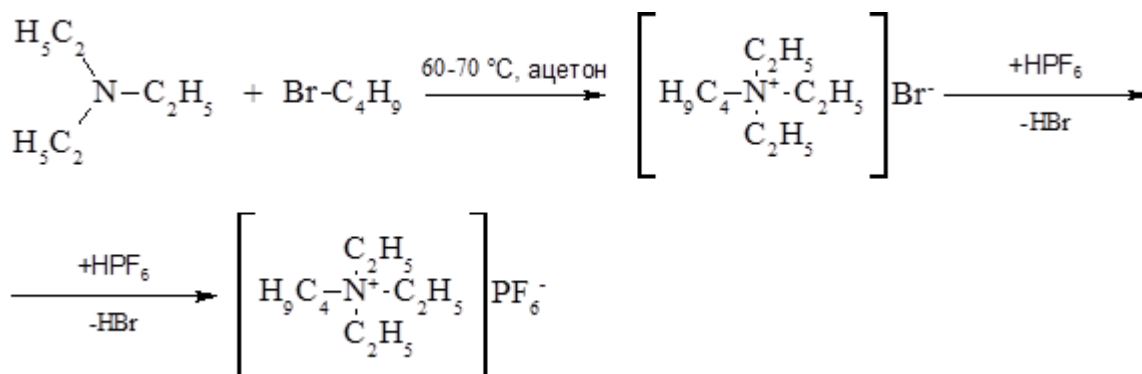
СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ ТРИЭТИЛАМИНА

Руководитель: Журавлев О.Е.

Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

Ионные жидкости – 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 ионные жидкости с катионом триэтилбутиламмония и различными неорганическими анионами (BF_4^- , PF_6^- , $\text{N}(\text{CN})_2^-$). Проведен синтез гексафторфосфата, тетрафторбората и дицианамида триэтилбутиламмония. На рисунке представлена схема синтеза гексафторфосфата триэтилбутиламмония из триэтиламина.



Бромид триэтилбутиламмония синтезирован из триэтиламина и 1-бромбутана по реакции нуклеофильного замещения в ацетоне при нагревании.

Ионные жидкости получали по реакции метатезиса из четвертичной соли и соответствующих неорганических реагентов в водном растворе при постоянном перемешивании. Полученные соединения представляют собой твердые вещества белого или желтого цвета. Определены основные физические константы для всех синтезированных соединений. Структура полученных ионных жидкостей подтверждена данным ИК-спектроскопии. Чистота соединений подтверждена ТСХ.

УДК 546.26-162

А.А. Давыдова, Ю.В. Берестнева, Е.В. Ракша,
А.Н. Вдовиченко

ПРЕДПОСЫЛКИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ СОЕДИНЕНИЙ СОИНТЕРКАЛИРОВАНИЯ НИТРАТА ГРАФИТА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОЧАСТИЦ

Руководитель: М.В. Савоськин

Государственное учреждение «Институт физико-органической химии и углехимии
им. Л.М. Литвиненко»

Синтезированы бинарные и тройные соединения соинтеркалирования нитрата графита (ССНГ). Тройные ССНГ получали последовательной обработкой нитрата графита двумя соинтеркалантами. В качестве соинтеркалантов использовали широкий ряд соединений различной химической природы – этилформиат, диметиловый эфир диэтиленгликоля, 1,4-диоксан, уксусную кислоту, муравьиную кислоту, ацетонитрил, ацетон, этилацетат, бутилацетат, N,N-диметилацетамид, воду. Образование соединений соинтеркалирования нитрата графита подтверждали методом рентгенофазового анализа. На основе дифрактограмм были найдены период идентичности и высота заполненного интеркалантом слоя для синтезированных соединений.

Методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), исследованы морфология поверхности и элементный состав образцов. Образцы нитрата графита, соинтеркалированные этилформиатом и уксусной кислотой (рис. 1 – а), а также этилформиатом и этилацетатом (рис. 1 – б) проявляют вспученную структуру без дополнительной термообработки. Это свидетельствует о пониженной стабильности таких ССНГ, что является благоприятным фактором для дальнейшего получения углеродных наночастиц.

Проведенные систематические исследования физико-химических свойств полученных ССНГ свидетельствуют о возможности получения углеродных наночастиц на их основе.

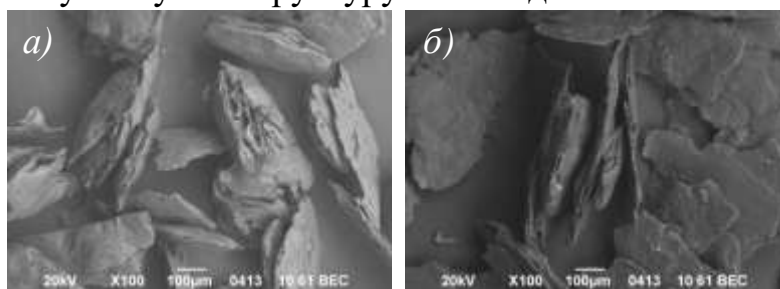


Рис. 1 – СЭМ-микрофотографии нитрата графита а) этилформиатом и уксусной кислотой; б) этилформиатом и этилацетатом

УДК 547.556.9

М.К. Елистратова

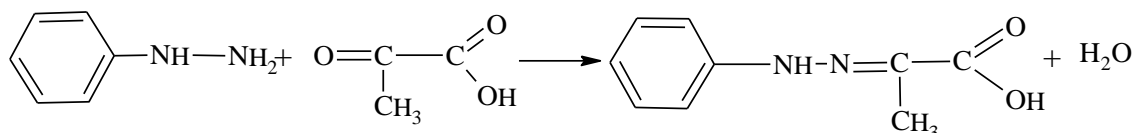
ПОЛУЧЕНИЕ 3-МЕТИЛ-1,5-ДИФЕНИЛФОРМАЗАНА

Руководитель: И.Ю.Егорова

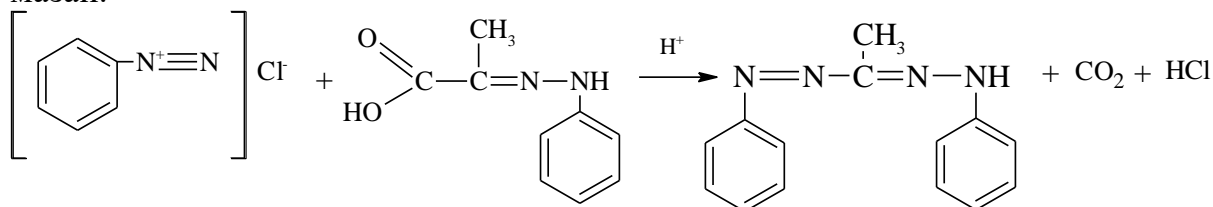
Тверской государственной университет
Кафедра органической и биоорганической химии

Формаза́ны относятся к производным гидразина – азогидразоны муравьиной кислоты. Лиганды на основе азогидразона широко используются как прекурсоры в органическом синтезе, как вещества, генерирующие заряды. Одно из важнейших свойств формаза́нов – их способность образовывать комплексные соединения с ионами металлов, благодаря чему они продолжают вызывать интерес как мультидентантные лиганды. Широкое применение формаза́нов в качестве термо- и фотохромных веществ, красителей тканей, красителей технического назначения и, особенно в биохимии и медицине привело к лабораторному и промышленному производству многих представителей арил- и гетарилформаза́нов. Сейчас открываются новые области применения формаза́нов как оптических фильтров, термочувствительных элементов и катализаторов. Представленная работа посвящена получению азотсодержащего лиганда на основе незамещенного фенилгидразина – 3-метил-1,5-дифенилформаза́на.

Получение формаза́на (азогидраза́на) проводили в несколько этапов. Реакцией окисления молочной кислоты получена пировиноградная кислота, строение которой было подтверждено качественной реакцией. Конденсацией фенилгидразина с пировиноградной кислотой синтезирован фенилгидразон пировиноградной кислоты.



Реакцией взаимодействия фенилдиазония хлорида с фенилгидразоном пировиноградной кислоты получен азогидразон – 3-метил-1,5-дифенилформаза́н.



Синтезированное соединение представляет собой мелкокристаллическое вещество темно-коричневого цвета. Исследованы физические свойства 3-метил-1,5-дифенилформаза́на: температура плавления и растворимость. Строение подтверждено данными ИК-спектроскопического анализа.

УДК: 547.1 – 326

П.И. Ефимова

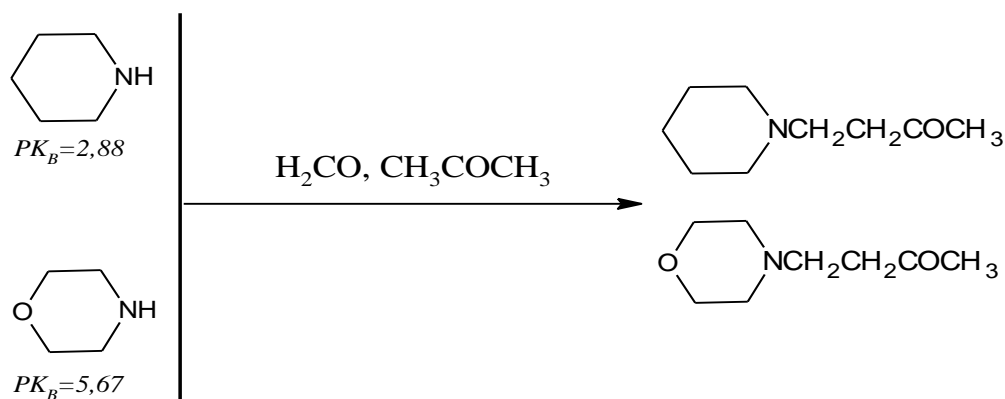
РЕАКЦИЯ МАННИХА – КАК МЕТОД СИНТЕЗА N-ПРОИЗВОДНЫХ ПИПЕРИДИНА И МОРФОЛИНА

Руководитель: Л.И. Ворончихина

Тверской государственный университет

Кафедра органической химии

Реакция Манниха имеет большое значение при синтезе ряда алкалоидов, β - ненасыщенных кетонов и β - дикарбонильных соединений. В настоящей работе реакция Манниха была использована нами для синтеза N-производных пиперидина и морфолина, содержащих в радикале карбонильную группу. Четвертичные соли таких производных, содержащих длинноцепочечные радикалы могут представлять интерес как катионные поверхностно-активные вещества, бактерицидные препараты, а также ингибиторы коррозии металлов. Пиперидин и морфолин выбраны нами в качестве аминной компоненты для реакции Манниха в связи с тем, что, как известно из литературы, их производные проявляют высокую физиологическую активность и используются в качестве анальгетиков, анестетиков, кроме того, они также входят в состав различных алкалоидов, таких как анабазин, морфин, бобелин, трофин и др. В качестве C-Н кислотной компоненты применяли ацетон.



Реакцию Манниха проводили нагреванием смеси ацетона, формалина(35%) и хлоргидрата амина в течение 12 часов. Температура реакции не превышала $50-60^\circ$ из-за летучести формальдегида. На первой стадии реакции образуется хлоргидрат N-производного амина. Выход продукта 70-80%, после перекристаллизации из ацетона хлоргидраты представляли собой белые кристаллические вещества с четкой температурой плавления с литературными данными.

УДК: 54.057

А. Г. Зайкова

СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНОГО БИЦИКЛО[2.2.1]ГЕПТЕНА ПО РЕАКЦИИ ДИЛЬСА-АЛЬДЕРА

Руководитель: А.А. Мананкова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
Отделение химической инженерии Исследовательской школы природных ресурсов

Реакция Дильса-Альдера является одним из возможных способов получения гетероциклических соединений в органической химии. Диеновый синтез с участием циклопентадиена приводит к образованию производных бицикло[2.2.1]гептена, являющийся универсальными мономерами для процесса полимеризации [1].

Целью данной работы является получение ангидрида 5-норборнен-2,3-дикарбоновой кислоты по реакции Дильса-Альдера. При взаимодействии циклопентадиена и малеинового ангидрида образуются две изомерные формы эндикового ангидрида с различными температурами плавления (рис.1) [2]. Температура плавления синтезированного эндикового ангидрида, составляет 165 °С, что указывает на эндоформу.

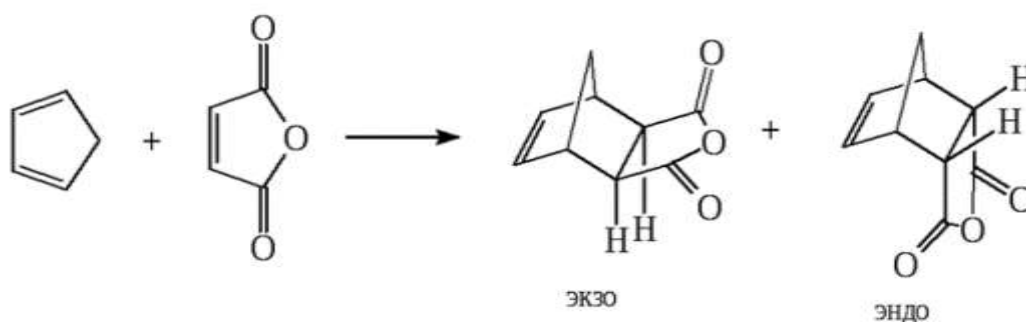


Рис. 1 Образование эндикового ангидрида

Структура ангидрида подтверждена методом ИК и ЯМР - спектроскопии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. David Huertas, Melinda Florscher and Veljko Dragojlovic Solvent-free Diels–Alder reactions of in situ generated cyclopentadiene // GreenChemistry. – 2009. – Vol.11. – P.91-95.
2. Richard E. Pincock, Keith R. Wilson, Thomas E. Kiovsky Thermal isomerization in polycrystalline exo- and endo-5-norbornene-2,3-dicarboxylic anhydrides // Journal of the American Chemical Society. – 1967. – Vol.89. – P.6890-6897.

УДК: 543.062

И.А. Заполина

КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ АСКОРБИНОВОЙ КИСЛОТЫ В СОКАХ

Руководитель: Н.В. Баранова

Тверской государственный университет
Кафедра неорганической и аналитической химии

Аскорбиновая кислота (АК) относится к числу наиболее важных витаминов, поддерживающих нормальное функционирование человеческого организма и участвующих во многих метаболических процессах, поэтому определение содержания аскорбиновой кислоты в различных продуктах является важной аналитической задачей.

Для количественного определения содержания АК был выбран метод окислительно-восстановительного титрования [1]. Титрование проводили двумя способами (йодатным и йодометрическим). В качестве титранта брали два вещества: KIO_3 и I_2 в KI .

Таблица

Результаты количественного определения аскорбиновой кислоты в различных соках

Исследуемый образец		Количество аскорбиновой кислоты, мг/10 мл сока	
		Йодатный метод	Йодометрический метод
Любимый сад	яблоко	$5,71 \pm 0,06$	$5,64 \pm 0,05$
	виноград, яблоко	$1,88 \pm 0,02$	$1,71 \pm 0,01$
Добрый	яблоко	$1,74 \pm 0,02$	$1,59 \pm 0,01$
	виноград	$0,87 \pm 0,01$	$0,88 \pm 0,01$
Фруктовый сад	яблоко	$1,82 \pm 0,02$	$1,76 \pm 0,01$
	виноград-яблоко	$0,60 \pm 0,01$	$0,58 \pm 0,01$

Из полученных результатов видно, что:

1. Яблочные соки содержат большее количество АК, чем виноградные соки.
2. Наибольшее содержание АК в яблочном соке «Любимый сад», это обусловлено тем, что в соках АК может использоваться в качестве консервантов, что согласуется с рецептурой приготовления соков.
3. Употребляя соки, мы поставляем в свой организм жизненно важные витамины, один из которых — аскорбиновая кислота.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Государственная фармакопея XIII. – Т. 1. – М.: Медицина, 2015. – 811 с.

УДК: 544.654.2

К.А. Камышева

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

Руководители: Р.Ф. Шеханов, С.Н. Гридчин
Ивановский государственный химико-технологический университет
Кафедра технологии электрохимических производств,
Кафедра аналитической химии

Исследованы процессы электролитического осаждения олова, никеля и их сплавов из сульфатно-оксалатных и фторид-хлоридного электролитов. Поляризационные кривые снимали с помощью потенциостата Р-30J «Элинс» при скорости развертки потенциала 5 мВ/с. Рассеивающую способность электролитов определяли с использованием щелевой ячейки. Суммарный коррозионный ток исследуемых двухэлектродных систем определяли по методу Розенфельда. Микрорельеф поверхности исследовали с помощью атомно-силового микроскопа Solver 47 Pro. Атомно-абсорбционным методом установлен химический состав сплавов олово-никель. При осаждении из оксалатно-сульфатных электролитов содержание никеля составило 23%, а из фторид-хлоридного 30%. Оксалатно-сульфатные электролиты для получения сплавов олово-никель характеризуются высокой поляризуемостью в рабочем интервале плотностей тока, которая наряду с высокой поляризацией, способствует образованию мелкокристаллических осадков сплава олово-никель. Максимальный наклон поляризационных кривых, полученных в оксалатных электролитах соответствует интервалу катодной плотности тока 0.12-1.0 А/дм². Исследование рассеивающей способности показало, что у фторид-хлоридного электролита она достаточно низкая и составляет 9.9%, тогда как для оксалатных электролитов осаждения сплавов олово-никель эта величина возрастает почти в четыре раза и достигает 37.2%. Высокая рассеивающая способность сульфатно-оксалатных электролитов дает возможность нанесения покрытий олово-никель на сложнопрофильные изделия. Защитная способность олово-никелевых покрытий, полученных из оксалатно-сульфатных электролитов в три раза выше аналогичных покрытий из фторид-хлоридного электролита. Повышение поляризации при электроосаждении сплавов из оксалатных электролитов обеспечивает увеличение микротвердости и коррозионной устойчивости покрытий.

УДК: 542.6

С.С. Капустина

СОВРЕМЕННЫЕ ЭКОЛОГИЧЕСКИ-БЕЗОПАСНЫЕ НЕЗАМЕРЗАЮЩИЕ ЖИДКОСТИ

Руководитель: Н.В. Веролайнен
Тверской государственный университет
Кафедра органической и биоорганической химии

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

В настоящее время в качестве средств для очистки стекол используют стеклоомыватели на водно-спиртовой основе с добавлением поверхностно-активных веществ и других добавок. Применение метанола в качестве спиртовой компоненты в России запрещено. Недостатком омывающей жидкости на основе этилового и изопропилового спиртов является то, что они являются агрессивными агентами, которые вызывают набухание резины, коррозию металлических частей, раздражающе действует на верхние дыхательные пути.

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

В качестве поверхностно-активных веществ в работе использовались синергические смеси сульфонол – неолол АФ 9-12 подобранные в соответствии с параметром взаимодействия смешанных бинарных систем. В составленные композиции дополнительно были введены трилон Б и ацетат натрия. Для новых незамерзающих жидкостей определяли температуру замерзания, степень пожароопасности, показатели моющей способности, коррозионное воздействие на металлы, воздействие на резину по известным методикам, приведенным в ГОСТах.

УДК: 661.1

Е.С. Касекиви, Д.А. Портнова

НЕИОНОГЕННЫЕ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫЕ ВЕЩЕСТВА КАК ЭМУЛЬГАТОРЫ ЭМУЛЬСИЙ

Руководитель: Н.В. Веролайнен
Тверской государственный университет
Кафедра органической и биоорганической химии

В последние годы возрос ассортимент перспективных продуктов имеющих форму паст и кремов, сложные процессы изготовления которых не обходятся без эмульгаторов. Для стабилизации концентрированных эмульсий часто стали использовать композиции из эмульгаторов, состоящие из неионогенных поверхностно-активных веществ и поверхностно-активных веществ других классов.

Действие эмульгаторов обусловлено их способностью адсорбироваться на границе двух жидких несмешивающихся фаз и снижать межфазное натяжение; создавать вокруг капель защитный слой, который препятствует коагуляции и коалесценции [1].

В качестве модели для исследования в работе были выбраны: миндальное масло и масло авокадо. Для составления синергических смесей использовали додецилсульфат натрия, сульфанол и синтанолы промышленного производства ДС-10, ДС-4; ДС-20, ЭС-3 [2]. Для всех неионогенных поверхностно-активных веществ были исследованы коллоидно-химические свойства. Показано, что синтанолы ЭС-3 и ДС-10 эффективнее других снижают поверхностное натяжение на границе водный раствор – воздух. В работе также изучено влияние синтанолов ДС-10, ДС-4, ДС-20 и ЭС-3 на стабильность эмульсий миндального масла и масла авокадо. Оказалось, что лучшим стабилизирующим действием обладает синтанол ЭС-3. При исследовании стабилизирующего действия синергических смесей поверхностно-активных веществ установлено, что бинарная система синтанол ЭС-3 и сульфанол наиболее эффективно эмульгировала масло авокадо.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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

УДК 547-386: 54.057

Е.Н. Кравцова

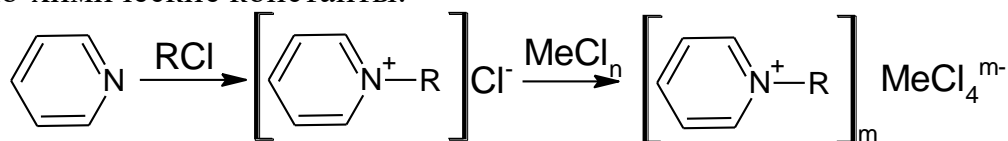
СИНТЕЗ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ ПИРИДИНИЯ С МЕТАЛСОДЕРЖАЩИМИ АНИОНАМИ

Руководитель: О.Е. Журавлев

Тверской государственный университет
Кафедра органической химии

Ионные жидкости находят применение как термически устойчивые растворители, экстрагенты и со-растворители. Недавно японские ученые сообщили о новых свойствах ионных жидкостей, полученных ими на основе 1-бутил-3-метилимидазолий хлорида, 1-бутиронитрил-3-метилимидазолий хлорида и хлорида железа (III) [1]. Авторы этой работы упоминали об аномально сильной магнитной восприимчивости полученных солей к небольшому постоянному магниту, таким образом, имея сходство с классическими магнитными жидкостями с частицами магнетита.

Нами были синтезированы четвертичные соли пиридиния, с различной длиной алкильного заместителя и на их основе получены парамагнитные ионные жидкости с анионами $[\text{FeCl}_4]^-$, $[\text{MnCl}_4]^{2-}$, $[\text{CoCl}_4]^{2-}$, $[\text{NiCl}_4]^{2-}$. Полученные жидкости были охарактеризованы по данным спектроскопии в видимой области для подтверждения наличия комплексных неорганических анионов в их структуре. Данными ИК-спектроскопии была подтверждена структура органического катиона. На рисунке изображена схема получения четвертичных солей пиридиния и ионных жидкостей на их основе. Все полученные соединения являются твердыми легкоплавкими или жидкими при комнатной температуре окрашенными веществами. Для всех соединений определены основные физико-химические константы.



где R: CH_3 , C_4H_9 ; $\text{C}_{10}\text{H}_{21}$.
Me: Fe, Co, Ni, Mn.

Значения магнитной восприимчивости солей близка к магнитной восприимчивости водных растворов соответствующих хлоридов никеля, марганца, кобальта и железа. Отклик на магнит качественно была такой же, как и в работе [1], однако такая магнитная восприимчивость на несколько порядков меньше чем у классических магнитных жидкостей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. S. Hayashi and H. Hamaguchi // Chem. Letters. 2004. V. 33. P. 1590.

УДК: 678.844

М.Ю. Литвинов

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОДОПОГЛОЩЕНИЯ
ПОЛИФЕНИЛСИЛСЕСКВИОКСАНПОЛИДИОРГАНОСИЛОКСАНОГО
БЛОК-СОПОЛИМЕРА

Руководитель: И.И. Осовская

Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и
дизайна

Кафедра физической и коллоидной химии

В последнее время для повышения термостойкости кремнийорганических эластомеров используются полимеры, имеющие лестничную структуру. Известно, что лестничный фенилсилсесквиоксан обладает повышенной по сравнению с прямоцепочечными термостойкостью: потери массы наблюдаются лишь при температуре 525°C. Однако температура стеклования такого полимера высока и составляет 40-50°C.

Одним из наиболее развивающихся направлений получения термоморозостойких силоксановых полимеров является синтез блок-сополимеров, состоящих из жестких фенилсилсесквиоксановых блоков с высокой температурой стеклования и гибких полидиорганосилоксановых блоков с низкой температурой стеклования.

Такие полимеры нашли применение в качестве основы для получения наполненных и ненаполненных покрытий для приборов и деталей, работающих при температурах от -60°C до +300°C.

Покрытия на основе данных блок-сополимеров должно быть устойчиво в среде водяного пара и должно обладать гидрофобностью. Таким образом, целью данной работы являлись синтез и исследование водопоглощения полифенилсилсесквиоксанполидиорганосилоксанового блок-сополимера.

Блок-сополимеры получали путем согидролиза фенилтрихлосилана и α, ω -дихлоролигодиметилсилоксана в среде толуола, с последующей отмывкой полученного согидролизата от солянокислого раствора до нейтральной реакции и выделением полимера путем водной дегазации.

Водопоглощение определяли методом сорбции паров воды над P/P_0 , равном 0,84 и 0,975 (P/P_0 – относительное давление пара над насыщенным раствором KCl и K_2SO_4).

Согласно полученным данным образцы полученного полимера не поглощают пары воды, что свидетельствует об устойчивости исследуемого блок-сополимера в среде водяного пара.

УДК: 661.258

Д.К. Маркина

ПРОИЗВОДСТВО СЕРНОЙ КИСЛОТЫ ПЕРЕРАБОТКОЙ КИСЛЫХ ГУДРОНОВ

Руководитель: А.В. Тихомирова

Кузбасский государственный технический университет
имени Т.Ф. Горбачева

Кафедра химии, технологии неорганических веществ и наноматериалов

В настоящее время в нашей стране обострились проблемы экологического характера, которым следует уделить особое внимание. Среди них особое внимание следует уделить образованию и переработке кислых гудронов. Кислые гудроны – одни из основных отходов нефтехимической и нефтеперерабатывающей промышленности. Объемы кислых гудронов оцениваются в 300 тыс. т/г. А степень использования этих отходов не превышает 25 %. Опасность представляет способ их хранения. На сегодняшний момент отсутствуют рациональные методы их утилизации, эти отходы складировать в заводских прудах-накопителях, которые занимают довольно значительные площади. В результате окислительно-восстановительных процессов, которые самопроизвольно происходят на поверхности этих хранилищ, выделяется большое количество диоксида серы.

Так как серная кислота занимает первое место среди важнейших продуктов химической промышленности, а ее содержание в отходах составляет 24–90%, то целесообразно применять кислые гудроны как исходное сырье для производства товарной серной кислоты. Для этих целей предлагается применять метод регенерации серной кислоты высокотемпературным термическим расщеплением кислых гудронов (огневой метод). Процесс проводят при высокой температуре, что позволяет органическим соединениям полностью разложиться. Получается сернистый газ с высоким содержанием диоксида серы. На выходе получается готовая товарная серная кислота. Данное производство очень актуально в настоящее время, так как позволит увеличить масштабы получения основного продукта химической промышленности, повысит экономические показатели страны и решит проблемы экологического характера.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Луканин А.В. // Инженерная экология: защита литосферы от твердых промышленных и бытовых отходов. 2018. 497 с.

УДК: 544.654.2

Н.Е. Мокрецов

ЭЛЕКТРООСАЖДЕНИЕ СПЛАВОВ ЦИНК-ЖЕЛЕЗО ИЗ РАСТВОРОВ ЯНТАРНОЙ КИСЛОТЫ

Руководители: Р.Ф. Шеханов, С.Н. Гридчин
Ивановский государственный химико-технологический университет
Кафедра технологии электрохимических производств,
Кафедра аналитической химии

В настоящей работе исследованы процессы электролитического осаждения цинка и железа из сукцинатных электролитов, и разработан электролит для получения двойного сплава цинк-железо. При экспериментальном исследовании процессов электроосаждения сплавов цинк-железо начальная концентрация $ZnSO_4 \cdot 7H_2O$ варьировалась от 0 до 30 г/л, $FeSO_4 \cdot 7H_2O$ – от 0 до 30 г/л, $H_2C_4H_4O_4$ – от 50 до 120 г/л, KCl – от 0 до 10 г/л, 25% раствор аммиака – до необходимого значения pH (в интервале от 3.0 до 8.0). Диапазон температуры составлял от 18 до 60°C. Покрытия осаждали с помощью лабораторного блока питания MPS-3005L-3 Matrix. Для поддержания температуры электролита использовался термостат UTU-2. Для анализа структуры покрытий использовали метод сканирующей электронной микроскопии, прибор SOLVER 47 PRO (режим полуконтактный). Структуру и состав сплавов изучали на приборе PHENOM PRO X – настольный сканирующий электронный микроскоп с интегрированной системой EDS (энерго-дисперсионный спектральный анализ). Покрытия осаждали на предварительно подготовленные (обезжиренные и активированные) образцы из ламельной ленты (сталь 08кп). Процесс осаждения проводился при катодной плотности тока 1 А/дм². Исследование электрохимического осаждения сплавов цинк-железо проводили путем снятия катодных поляризационных кривых из сукцинатных электролитов. Потенциодинамические кривые снимали с использованием потенциостата Р-30J «Элинс» со скоростью развертки потенциала 5 мВ/с. Результаты выполненных исследований показывают, что введение в электролиты янтарной кислоты обеспечивает получение равномерных мелкокристаллических покрытий сплавами цинк-железо, имеющих хорошее сцепление с основой и характеризующихся высокой микротвёрдостью и коррозионной стойкостью.

УДК 661.728

Момзякова К.С., Афанасьев А.С., Ибрагимов А.В.

ПОЛУЧЕНИЕ ПОРОШКОВОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ ИЗ ЛЬНА

Руководитель: Р.Я. Дебердеев

Казанский национальный исследовательский технологический университет
Кафедра технологии переработки полимеров и композиционных материалов

Определены оптимальные условия получения порошковой целлюлозы (ПЦ) из льна на модифицированной экструзионной установке.

ПЦ получали в несколько стадий. На первом этапе проводили щелочную обработку льняного сырья [1] смесью 3% NaOH и 0,1% H₂O₂ в течение 60 мин при температуре 95°C и гидромодуле 1:10 для удаления из целлюлозы гемицеллюлоз и других примесей. На втором этапе осуществляли (физико-химическую активацию) ФХА, полученной после первого этапа, массы целлюлозы на модифицированной экструзионной установке. В состав установки ФХА может входить до 4 рабочих зон. Установка состоит из центрального шнека и шнеков-сателлитов, выполняющих функцию измельчающих элементов. С целью определения оптимальных условий получения ПЦ из льна на установке ФХА, варьировали количество зон, а также количество и тип шнеков-сателлитов.

Дисперсный состав образцов ПЦ, полученных после ФХА, определяли с использованием метода непрерывного взвешивания седиментационного осадка на седиментометре СВ-1 [2].

По результатам работ получено, что тип рабочих элементов (сателлитов) не оказывает значимого влияния на размеры частиц. Введение дополнительных зон экструдера приводит к увеличению доли более мелких частиц, причём использование более двух секций экструдера нецелесообразно.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пат. 2343240 РФ, МПК: D21C5/00, D21C1/06, D21B1/16, D01C1/02. Способ получения полуцеллюлозы / О.К.Нугманов, Н.П.Григорьева, Н.А.Лебедев, В.Н.Хлебников, Р.Н.Яруллин -№ 2007115320/12; Заявлено 12.04.2007; Опубл. 10.01.2009. - 6 с.
2. Воюцкий С.С. Курс коллоидной химии. М.: Химия, 1975.- С.68-77

Результаты исследования получены в рамках выполнения госзадания проект 10.1718.2017/4.6

УДК: 544.72

М.В. Моренко, С.А. Юрчило

АДСОРЦИЯ БРОМФЕНОЛОВОГО СИНЕГО НА ЧАСТИЦАХ ФЕРРИТА ВИСМУТА СО СТРУКТУРОЙ ПЕРОВСКИТА В ВОДНОЙ СУСПЕНЗИИ

Руководитель: С.С. Статуева, А.Ю. Сошникова
МОУ Лицей №37 г. Донецка
ГУ Институт физико-органической химии и углехимии
им. Л.М. Литвиненко, г. Донецк

Значительное количество научных публикаций в мире направлено на получение новых экологически чистых методов очистки воды от органических загрязнений. В основе многих из них лежит фотокаталитическое разложение органики при использовании в качестве катализаторов некоторых полупроводников. Благодаря своим уникальным физическим свойствам феррита висмута со структурой перовскита – BiFeO_3 (BFO) может использоваться в качестве фотокатализатора в видимой области спектра.

Практически во всех работах, перед началом стадии фотокатализа в видимой области спектра, суспензия BFO в водном растворе загрязнителя предварительно выдерживается некоторое время в темноте: от 20 до 60 минут. Фотокаталитическая активность BFO и его адсорбционная способность зависит от способа его получения. В этой работе, в качестве фотокатализатора используется BFO, который был получен твердофазным синтезом в Южно-Российском государственном политехническом университете им. М.И. Платова. В BFO в качестве примесей присутствуют феррит висмута со структурой муллита ($\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$) и силленита ($\text{BiFe}_{25}\text{O}_{39}$).

Целью данной работы является изучение процесса адсорбции бромфенолового синего (БФС) на поверхности BFO в водной суспензии индикатора при 303К. В качестве загрязнителя использовался водорастворимый БФС ($\text{C}_{19}\text{H}_{13}\text{O}_5\text{Br}_4\text{NS}$). Концентрацию индикатора контролировали по максимуму светопоглощения на спектрофотометре SpectroVis®Plus. Загрузка механоактивированного в аргоне BFO составляла 0,8 грамм на 100 мл раствора БФС ($1,46 \cdot 10^{-5}$ М).

Обработанные с помощью программы Origin 8.1 экспериментальные данные, показали, что полное заполнение поверхностных активных центров BFO наблюдается через 3 часа: $A_\infty = (3,30 \pm 0,08) \cdot 10^{-4}$ моль/кг. Однако, процесс сорбции/десорбции практически доходит до стадии равновесия через 60 минут, что позволяет начинать процесс фотокаталитического разложения БФС. При нагревании реакционной смеси до температуры 343К и магнитном перемешивании в течении 2 часов БФС полностью десорбируется с поверхности BFO, что подтверждает физический тип адсорбции в данной системе.

УДК: 546.06

Л.А. Низаметдинова, Г.Э. Шарафутдинова

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ *L*-ЦИСТЕИНА С СУЛЬФАТ-АНИОНОМ

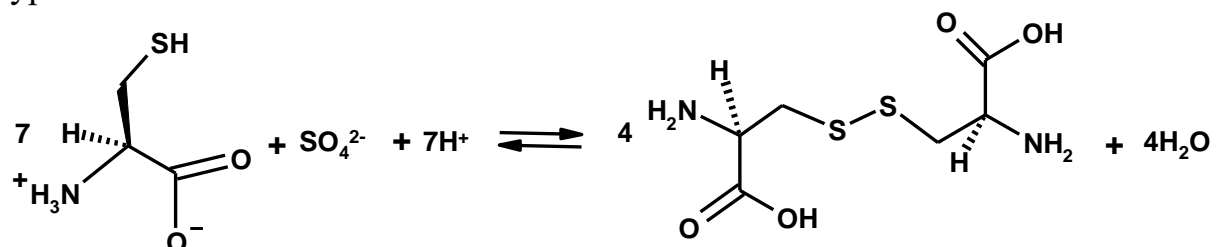
Руководитель: Берестова Т.В.

Башкирский государственный университет
Кафедра физической химии и химической экологии

Биологическую значимость и метаболическую функцию в организме серосодержащих аминокислот, в частности, *L*-цистеина, трудно переоценить. Изучение функции подобных соединений важно для понимания процессов внутриклеточной сигнализации и окислительной модификации серосодержащих белков [1].

Изучено взаимодействие *L*-цистеина с хлоридами и сульфатами солей переходных и непереходных металлов в зависимости от pH среды. Показано, что реакция растворов сульфатов таких металлов как Na^+ , Ca^{+2} , Mn^{+2} , Co^{+2} , Zn^{+2} и некоторых др. с *L*-цистеином в течение несколько часов приводила к образованию *L*-цистина с выходом, достигающим 80% даже при $\text{pH} < 7$. Использование в аналогичной реакции хлоридов перечисленных выше металлов не приводило к образованию *L*-цистина.

По-видимому, в данном случае мы наблюдаем окислительно-восстановительную реакцию сопропорционирования *L*-цистеина с сульфат-ионом, которая проходит в кислой среде согласно следующему уравнению:



Следует отметить, что реакции *L*-цистеина с Cu^{+2} и Fe^{+3} хорошо известны и приводят в той или иной степени к образованию *L*-цистина, вне зависимости от природы аниона и pH.

Таким образом, выявлена общая закономерность образования *L*-цистина в окислительно-восстановительной реакции *L*-цистеина с сульфат-анионом в кислой среде.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Берестова Т.В., Низаметдинова Л.А., Носенко К.Н., Хамитов Э.М., Мустафин А.Г. // Вестник Башкирск. Ун-та. 2018. Т. 23. С. 641-646.

УДК: 543.421.424

К.Н. Носенко

ОЦЕНКА УСТОЙЧИВОСТИ КАРБОКСИЛСОДЕРЖАЩИХ МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСОВ ПОЛИМЕРОВ МЕТОДОМ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ МНПВО

Руководитель: Берестова Т.В.

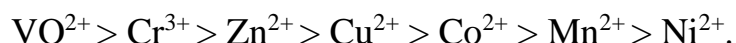
Башкирский государственный университет
Кафедра физической химии и химической экологии

Известно, что определение констант устойчивости металлокомплексов полимерных соединений часто затруднено, так как они отличаются неопределенной структурой и непостоянством состава. Однако, определение устойчивости металлокомплексов полимеров и выстраивание соответствующего ряда важно для разработки и внедрения различных полимерных материалов и покрытий, медицинских препаратов и т.д.

В работе описан способ оценки устойчивости комплексов карбоксилсодержащих полимеров с d-металлами методом ИК-спектроскопии МНПВО на примере металлокомплексов с цитрусовым пектином (ЦП) (таблица).

Соединение	$\nu_{as,s}(C=O)$ ($\nu_{as}(COO)$)	$\nu_s(COO)$	$\Delta\nu_{as,s}$ (COO)	$\nu_{as,s}(C-O-C)$	$\nu(CH, CH_2)$	δ (пиранозн ые кольца)
ЦП	1635, 1720	1404	231	1095, 1157	2939	748 - 702
(Ni[(ЦП) ₂]) _n	1566	1412	154	1072, 1119	2939	625
(Mn[(ЦП) ₂]) _n	1605	1420	185	1026, 1188	2955	640
(Co[(ЦП) ₂]) _n	1620	1420	200	1057, 1102	2939	612 - 763
(Cu[(ЦП) ₂]) _n	1612	1412	200	1018-1196	2947-3186	625 - 771
(Zn[(ЦП) ₂]) _n	1638	1420	218	1056, 1075, 1099	2919	617, 690
(Cr[(ЦП) ₂]) _n	1631	1409	222	1038, 1127, 1194	2818, 2969	605, 673
(VO[(ЦП) ₂]) _n	1642	1417	225	1045, 1101, 1145	2940, 2976	602, 668

Данный метод основан на установлении и сравнении значения разницы ассиметричных и симметричных валентных колебаний карбоксилат-иона $\Delta\nu_{as,s}(COO)$ [1], участвующего в реакции комплексообразования с металлом. Так, согласно полученным данным по сродству к цитрусовому пектину, d-металлы можно расположить в следующий ряд:



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Berestova T. V., Kuzina L. G., Amineva N. A., Faizrakhmanov I. S., Massalimov I. A., Mustafin A. G. ATR-FTIR spectroscopic investigation of the *cis*- and *trans*-bis-(*a*-amino acids) copper(II) complexes // J. Mol. Struct. 2017. No 1137. p. 260-266.

УДК 541.6

М.А. Понкратов, Э.Д. Алхасова

ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ Х-ЗАМЕЩЁННЫХ ЭТАНА И АЛКИЛЗАМЕЩЁННЫХ БЕНЗОЛА

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

Цель данной работы - установление количественных корреляций «структура –энтальпия образования» в Х-замещённых этана и алкилзамещённых бензола с помощью феноменологических методов, основывающихся на концепции попарных и более сложных взаимодействий атомов в молекуле.

Для достижения поставленной цели в работе решались следующие задачи:

Оценка состояния численных данных по энтальпии образования исследуемых соединений.

Анализ экспериментальных данных.

Проведение численных расчетов,

Построение и анализ графических зависимостей “энтальпия образования – число углеродных атомов”, “энтальпия образования – 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 энтальпии образования Х-замещённых этана и алкилзамещённых бензола.

Например:

$$P_{C_6H_{6-l}X_l} = a + bl + cl^2 + \varphi^l(d, e) \quad (l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6)$$

Где a, b, c, φ - параметры выраженные через внутримолекулярные взаимодействия.

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

УДК 541.6

Е.А. Романюк

ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ ПРОСТЫХ ЭФИРОВ

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

Целью настоящей работы является – установление количественных корреляций “структура – свойство” в простых эфирах с помощью феноменологических методов, основывающихся на концепции попарных и более сложных взаимодействий атомов в молекуле..

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

- анализ экспериментальных данных по исследуемым соединениям,
- проведение численных расчётов,
- построение и анализ графических зависимостей “энтальпия образования – число углеродных атомов”, “энтальпия образования – степень замещения”.

Для решения поставленной задачи в работе применялись – феноменологические методы, методы статистического анализа и линейной алгебры.

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.

В работе также выведены расчётные формулы и проведены численные расчеты по энтальпии образования простых эфиров.

$$P_{C_lH_{2l+1}OC_lH_{2l+1}} = h_{cc}p_{cc} + h'_{co}p'_{co} + x_{cc1}\Gamma_{cc} + x_{co1}\Gamma_{co} + \\ + x_{ccc1}\Delta_{ccc} + x_{cco1}'\Delta_{cco} + x_{cc2}\tau_{cc} + x_{co2}\tau_{co}$$

где h_{cc} – число связей СС; h_{co} – число связей СО; x_{cc1} – число связей СС через один атом; x_{ccc1} – число связей ССС через один атом; x_{cco1} – число связей ССО через один атом; x_{co2} – число связей СО через два атома; x_{cc2} – число связей СС через два атома, Γ_{cc} , τ_{cc} , ... – эффективные взаимодействия соответственно пар атомов С через один атом, два атома, Δ_{ccc} , Δ_{cco} – эффективный вклад взаимодействия тройки атомов С, атомов С и О около одного и того же скелетного атома и т.д.

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

УДК: 691.675

К.А. Смирнова

БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ СОЛЕЙ N,N- ДИАЛКИЛПИПЕРИДИНИЯ

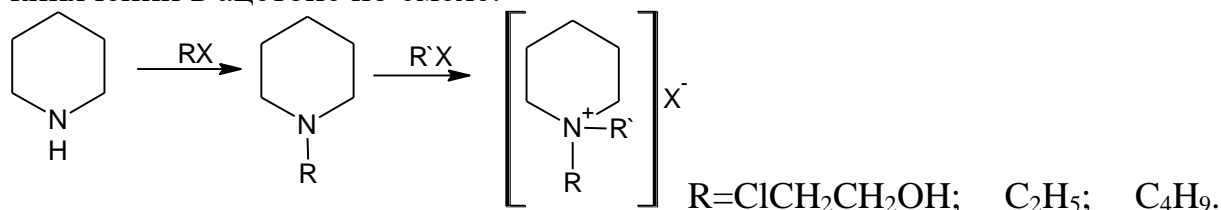
Руководитель: Л.И. Ворончихина

Тверской государственный университет

Кафедра органической и биоорганической химии

Пиперидин является наиболее типичным представителем шестичленичных насыщенных гетероциклов, его производные и, в особенности, соли, обладают бактерицидным и бактериостатическим действием.

В настоящей работе получены четвертичные соли N-алкилпиперидиния и изучены их бактерицидные свойства в отношении грамположительных и грамотрицательных бактерий. Алкилирование пиперидина проводили взаимодействием с алкилгалогенидами при соотношении 2:1 без растворителя при 70-80° С. Четвертичные соли N-алкилпиперидиния получены кватернизацией алкилгалогенидами при кипячении в ацетоне по смеси:



$\text{R}' = \text{C}_4\text{H}_9; \text{CH}_2\text{C}_6\text{H}_5. \text{X}^- = \text{Cl}; \text{Br}.$

Антимикробное действие синтезированных солей исследовали по величине зоны подавления роста патогенного стафилококка (грамположительные бактерии) и кишечной палочки (грамотрицательные бактерии) методом наложения стерильных (бумажных) дисков, смоченных в 0,05% водном растворе солей на газонный посев микробной культуре.

Как показали исследования, N-алкилированный пиперидин и гидрохлорид пиперидина проявляли практически одинаковую активность в отношении обеих видов бактерий. Зона подавления роста бактерий 12 и 7 мм соответственно. Бензильные производные оказались наиболее эффективными из числа исследованных соединений, зона подавления составляла 30-35 мм.

УДК 632.153

Е.А. Соколова

ВЛИЯНИЕ ПРОМЫШЛЕННЫХ ВЫБРОСОВ ГОРНЫХ ПРЕДПРИЯТИЙ НА ВОДОЕМЫ КЕМЕРОВСКОЙ ОБЛАСТИ

Руководитель: А.В.Тихомирова

Кузбасский государственный технический университет
имени Т.Ф. Горбачева

Кафедра химии, технологии неорганических веществ и наноматериалов

Любое действующее предприятие оказывает воздействие на окружающую среду и экологическую обстановку в стране. При работе предприятия стараются минимизировать вредное воздействие, путем установки очистных сооружений. Однако совсем избежать выбросов не удается.

Для анализа вредного воздействия предприятия Кемеровской области на водоемы были отобраны пробы воды из двух точек: выше и ниже ведения горных работ. Результаты исследований представлены в таблице.

Результаты анализа воды

Определяемые показатели	Результаты исследований		Величина допустимого уровня	Единицы измерения	НД на методы исследования
	выше ведения горных работ	ниже ведения горных работ			
Ион аммония	0,615±0,215	0,862±0,302	1,93	мг/дм ³	ПНД Ф 14.1:2:3.1-95
Нитраты	20±3	14±2	45,0	мг/дм ³	ПНД Ф 14.1:2:4.4-95
Фенолы летучие	0,0013±0,0006	0,0011±0,0005	0,001	мг/дм ³	ПНД Ф 14.1:2:4.182-02
Цинк	0,0052±0,0017	0,0023±0,0008	1,0	мг/дм ³	ФР.1.31.2004.00987
Марганец	0,045±0,011	0,062±0,015	0,1	мг/дм ³	ФР.1.31.2004.01322
Медь	0,0021±0,0008	0,0082±0,0032	1,0	мг/дм ³	ФР.1.31.2004.00987
АПАВ	0,042±0,017	0,054±0,022	0,5	мг/дм ³	ПНД Ф 14.1:2:4.158-2000
Запах при 20°С	4±1, нефтепродуктов	3±1, химический	2	баллы	ПНД Ф 12.16.1-10
Запах при 60°С	5±1, нефтепродуктов	4±1, химический			

Качество воды оценивалось согласно требованиям СанПиН 2.1.5.980-00 «Гигиенические требования к охране поверхностных вод»; ГН 2.1.5.1315-03 «ПДК химических веществ в воде водных объектов хозяйственно-питьевого и культурно-бытового водопользования».

При анализе данных можно заметить, что имеются превышения уровня ПДК таких показателей, как фенолы летучие, запах при 20°С, запах при 60°С.

УДК 620.3

В.О. Томилов

ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ НАНОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ ДЛЯ ОПТО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

Руководитель: А.В. Кадомцева
ФГБОУ ВО «Приволжский исследовательский медицинский университет»
МЗ России, Нижний Новгород
Кафедра общей химии

Целью исследования является разработка эффективного метода получения наночастиц германия, пригодных в субмикро- и нанофизики, а также для создания новых функциональных фотонных материалов, для элементов солнечных батарей.

Предлагаемый подход имеет потенциальную технологическую реализацию и может позволить существенно уменьшить толщину полупроводниковых солнечных элементов при сохранении требуемых свойств, что снизит их стоимость.

В настоящее время германий находит широкое применение в микро- и наноэлектронике, фотовольтаике, а также в современной полупроводниковой промышленности. Мировое потребление германия увеличивается с каждым годом, стоимость германия находится на достаточно высоком уровне, порядка 2000 \$/кг. Таким образом, остро стоит вопрос о снижении себестоимости германия, а также увеличение промышленной и экологической безопасности его производства.

В настоящее время существует несколько технологий получения германия, однако, все методы получения германия имеют ряд существенных недостатков.

В ходе работы разработан каталитический метод восстановления тетрахлорида германия водородом, позволяющий снизить температуру процесса с 973К до 423К и сократить количество стадий получения германия, а также процесс получения катализатора.

Установлены кинетические характеристики восстановления тетрахлорида германия водородом в отсутствие катализатора ($E_a=48.5\text{кДж}\cdot\text{моль}^{-1}$, $n=0$).

В ходе исследования определена скорость каталитического восстановления тетрахлорида германия водородом, найдены эффективная энергия активации в зависимости от природы катализатора. Установлено, что катализатор имеет кажущуюся энергию активации на 43 кДж·моль⁻¹ меньше в сравнении с некаталитическим способом проведения реакции. Предложена схема каталитического восстановления тетрахлорида германия водородом на поверхности катализатора.

УДК: 504.054

А.В. Яковлева, А.С. Яковлев

ТЕХНОЛОГИЯ ВИНИЛИСКОЖИ: ЗАЩИТА ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

Руководитель: В.В. Лебедев

Тверской государственный технический университет
Кафедра «Безопасность жизнедеятельности и экология»

Технологии переработки материалов сопровождаются выделениями побочных продуктов в окружающую среду. Поэтому необходимо использовать коллективные средства защиты работающих, например, приточно-вытяжную вентиляцию. Однако обеспечение санитарно-гигиенических условий труда приводит к загрязнению вентиляционного воздуха вытяжных систем веществами различного класса опасности, что приводит к загрязнению окружающей среды [1].

При производстве обувной кожи применяется промазкой способ, основанный на принципе намазки ПВХ-пасты на движущуюся тканевую основу с последующей обработкой полотна в терможелировочной камере. Пленка получает большую прочность, износостойчивость и эластичность. В состав ПВХ-композиции входят следующие основные компоненты: ПВХ-смолы суспензионные и эмульсионные; наполнитель – мел, микрокальцит; пластификаторы – диоктилфталат и др.; стабилизатор – кальций- и цинксодержащие соли органических кислот, эпоксицированное соевое масло; пигменты – диоксид титана, углерод технический.

Основными технологическими процессами при производстве, связанными с выбросами загрязняющих веществ в атмосферу, являются: развеска сырьевых материалов и загрузка их в смеситель; приготовление ПВХ-композиции – в атмосферу выбрасывается пыль ПВХ, карбонат кальция, диоксида титана, сажа (здесь выбросы диоктилфталата не учитываются ввиду его малой летучести, $T_{кип} = 386^{\circ}\text{C}$); намазка ПВХ-пасты на движущуюся тканевую основу с последующей обработкой полотна в терможелировочной камере – при этом выбрасываются пары пластификатора – диоктилфталата.

Возникает необходимость устанавливать нормативы предельно допустимых выбросов (ПДВ) в атмосферу, что регламентируется Законом РФ «Об охране окружающей среды» [2].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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

Научное издание

XXV КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ

Всероссийская научно-техническая конференция

молодых учёных

«Физика, химия и новые технологии»,

посвященная Международному году

Периодической таблицы химических элементов

Тезисы докладов

28 марта 2019 года

г. Тверь

Подписано в печать 02.04.2019. Формат 60x84 ¹/₁₆.

Усл. печ. л. 8,2. Тираж 100. Заказ № 104.

Редакционно-издательское управление
Тверского государственного университета

Адрес: 170100, г. Тверь,

Студенческий пер. 12, корпус Б.

Тел. РИУ (4822) 35-60-63.