

**СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ КИСЛОГО  
ГИДРАТИРОВАННОГО КОМПЛЕКСА ДОДЕКАВОЛЬФРАМОСИЛИКАТА  
С НАТРИЙКАПРОЛАКТАМОВЫМИ ФРАГМЕНТАМИ СОСТАВА  
(H<sub>3</sub>O)<sub>4</sub>[Na<sub>6</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>10</sub>NO)<sub>6</sub>][SiW<sub>12</sub>O<sub>40</sub>]**

**А.Ф. Степнова<sup>1</sup>, Г.З. Казиев<sup>1</sup>, Нгуен Ван Банг<sup>1</sup>, В.Н. Хрусталева<sup>2</sup>, В.А. Перминова<sup>1</sup>,  
S. Holguin Quinones<sup>3</sup>,**

<sup>1</sup>Московский педагогический государственный университет, г. Москва

<sup>2</sup>Российский университет дружбы народов, г. Москва

<sup>3</sup>Universidad Autonoma Metropolitana (Azcapotzalco), México

Синтезирован и исследован методом РСА кислый гидратированный комплекс додекавольфрамосиликата с шестью натрийкапролактовыми фрагментами (H<sub>3</sub>O)<sub>4</sub>[Na<sub>6</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>10</sub>NO)<sub>6</sub>][SiW<sub>12</sub>O<sub>40</sub>]. Кристаллы моноклинные, пр. гр. P2<sub>1</sub>/n; параметры элементарной ячейки: a = 13.744(2), b = 11.0726(19), c = 23.464(4) Å, α = 90, β = 90,202(3), γ = 90°, V = 3570,7(11) Å<sup>3</sup>, ρ<sub>выч</sub> = 4.100 мг/м<sup>3</sup>, Z = 2.

**Ключевые слова:** полиметаллаты, гетерополисоединения, ГПА, рентгеноструктурный анализ, поливольфраматы.

**ХЕЛАТНЫЕ КОМПЛЕКСЫ НА ОСНОВЕ МЕЛЕМА И МЕТАЛЛОВ  
ПЕРЕМЕННОЙ ВАЛЕНТНОСТИ**

**М.Л. Ерицян<sup>1</sup>, Н.О. Зулумян<sup>1,2</sup>, А.В. Мирзаханян<sup>1</sup>, С.С. Саканян<sup>1</sup>, А.Р. Исаакян<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Армянский государственный педагогический университет им. Х. Абовяна, Ереван

<sup>2</sup>Институт общей и неорганической химии НАН Республики Армения, Ереван

Исследованы реакции между мелемом и ацетатами металлов Ni(II), Fe(II) и Mn(II). Установлено, что в результате указанного взаимодействия образуются комплексы хелатного типа. С целью выяснения гибридных состояний ионов металлов в комплексах определены их эффективные магнитные моменты. Синтезированные комплексы исследованы ПМР- и ИК-спектроскопией, методом дифференциально-термического анализа, определен их элементный состав.

**Ключевые слова:** мелем, хелат, гептазин, металлокомплекс.

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КИСЛОТНО-ОСНОВНЫХ РАВНОВЕСИЙ В РАСТВОРЕ ЦЕФУРОКСИМА

А.П. Дрынина<sup>1</sup>, В.Г. Алексеев<sup>2</sup>

<sup>1</sup> ЭкоВторРесурс, г. Тверь

<sup>2</sup> Тверской государственный университет, г. Тверь

С использованием программы Ерик теоретически рассчитаны константы кислотно-основных равновесий в водном растворе цефуроксима. Прогнозируется диссоциация протонов карбоксильной ( $pK_a = 2.56 \pm 0.94$ ), амидной ( $pK_a = 12.90 \pm 2.22$ ), карбаматной групп ( $pK_a = 13.03 \pm 0.95$ ) и возможность протонирования карбаматной группы по атому кислорода ( $lgK = 1.41 \pm 2.22$ ). Экспериментально методом рН-метрического кислотно-основного титрования определена константа диссоциации карбоксильной группы ( $pK_a = 2.43 \pm 0.01$ ) при 25 °С на фоне 0.1 моль/л  $KNO_3$ .

**Ключевые слова:** кислотно-основные свойства цефалоспоринов, цефуроксим, теоретический расчет констант кислотности.

## СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ОБРАЗЦОВ ЧАЯ И ЕГО ЗАМЕНИТЕЛЕЙ НА СОДЕРЖАНИЕ РУТИНА

Н.П. Христова, Т.И. Смирнова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь

В образцах чёрного и зелёного чая различных торговых марок и заменителей чая (мате, ройбусе, ферментированном и неферментированном листе кипрея узколистного) определено содержание веществ с Р-витаминной активностью. Обнаружено, что максимальной антиоксидантной активностью характеризуется неферментированный лист кипрея.

**Ключевые слова:** антиоксиданты, витамины, флавоноиды, чай, заменители чая.

## АНАЛИЗ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ЛИСТЬЕВ *CONVALLARIA MAJALIS* L. В ФИТОЦЕНОЗАХ С РАЗЛИЧНОЙ АНТРОПОГЕННОЙ НАГРУЗКОЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ФУРЬЕ-ИК-СПЕКТРОСКОПИИ

М.А. Кучеренко, М.Г. Виноградова

Тверской государственной университет, г. Тверь

Проведен ИК-спектральный анализ образцов листьев ландыша. Установлена высокая степень благоприятности условий для произрастания ландыша и определенная устойчивость химического состава растения к антропогенной нагрузке. Особое внимание привлекает область валентных и деформационных колебаний на частотах  $\sim 1365\text{--}536\text{ см}^{-1}$ , поскольку именно в ней установлены основные различия для ряда характеристических полос поглощения. Обнаружено закономерное появление ряда сульфосодержащих групп, составляющим веществом которых является сернистый ангидрид — загрязнитель атмосферы.

*Ключевые слова:* ландыш майский, Фурье-ИК-спектроскопия, антропогенное воздействие, полосы поглощения, ИК-спектры, фитоценозы.

## СИНТЕЗ ТЕТРАФТОРБОРАТОВ И ГЕКСАФТОРФОСФАТОВ 1-БУТИЛ-3-МЕТИЛИМИДАЗОЛИЯ И ИЗУЧЕНИЕ ИХ ПОВЕДЕНИЯ В РАСТВОРАХ

О.Е. Журавлев, Н.И. Кротова, Л.И. Ворончихина

Тверской государственной университет, г. Тверь

Синтезированы ионные жидкости с катионом 1-бутил-3-алкилимидазолия и анионами  $\text{Br}^-$ ,  $\text{BF}_4^-$  и  $\text{PF}_6^-$ . Состав и структура соединений подтверждена данными элементного анализа и ИК-спектроскопией. Изучена электропроводность растворов синтезированных соединений в ацетонитриле, рассчитаны константы ассоциации, эквивалентная электропроводность при бесконечном разведении, а также энергия Гиббса ассоциации.

*Ключевые слова:* ионные жидкости, синтез, электропроводность, ассоциация, ацетонитрил.

## **ВЛИЯНИЕ ПОТЕНЦИАЛА ЛЕННАРДА–ДЖОНСА НА ОРИЕНТАЦИОННЫЙ ПОРЯДОК В ПОЛИМЕРНЫХ СИСТЕМАХ**

**О.Г. Максимова**

Череповецкий государственный университет, г. Череповец

Для исследования ориентационного порядка и фазовых переходов в полимерных сегнетоэлектрических и жидкокристаллических системах модифицирована модель Готлиба, в которой учитываются как ориентационные, так и деформационные взаимодействия. Рассчитаны зависимости дальнего ориентационного порядка от температуры при различных значениях константы межцепных взаимодействий и глубины потенциальной ямы в потенциале Леннарда-Джонса. Показано, что увеличение глубины потенциальной ямы приводит к смещению точки фазового перехода.

***Ключевые слова:** ориентационный порядок, фазовый переход, сегнетоэлектрик, жидкий кристалл, метод Монте-Карло.*

## **ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА Ru КАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ СВЕРХСШИТОГО ПОЛИСТИРОЛА**

**А.Е. Филатова, И.Ю. Тямина, А.И. Сидоров, А.В. Быков,  
В.Г. Матвеева, Э.М. Сульман, М.Е. Григорьев**

Тверской государственный технический университет, г. Тверь

Работа посвящена исследованию физико-химических свойств Ru катализаторов на основе сверхсшитого полистирола. Была разработана методика синтеза Ru-содержащих катализаторов на основе полимерной матрицы сверхсшитого полистирола. Был проведен широкий спектр физико-химических исследований полученных катализаторов.

***Ключевые слова:** сверхсшитый полистирол, катализаторы, рутениевые катализаторы, наночастицы рутения.*

## **АНАЛИЗ КИНЕТИКИ ФЕРМЕНТАТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ БИОКАТАЛИТИЧЕСКОГО СИНТЕЗА АМИНОКИСЛОТ В ХОДЕ БИОКОНВЕРСИИ ОРГАНИЧЕСКОГО СЫРЬЯ**

**В.П. Молчанов, Ю.Ю. Косивцов, М.Г. Сульман, К.М. Хуснутдинова**

Тверской государственный технический университет, г. Тверь

В статье рассмотрены вопросы кинетического моделирования и оптимизации ферментативных процессов биокаталитического синтеза свободных аминокислот в ходе биоконверсии органического сырья.

***Ключевые слова:** кинетическое моделирование, оптимизация биокаталитического синтеза, синтез свободных аминокислот, биоконверсия.*

## **ИССЛЕДОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИХ СПОСОБОВ БИОКОНВЕРСИИ ТОРФОНАВОЗНЫХ СМЕСЕЙ И ОТХОДОВ ПИЩЕВОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ**

**В.П. Молчанов, М.Г. Сульман, Е.И. Шиманская, Ю.Ю. Косивцов**

Тверской государственный технический университет, Тверь

В статье представлены результаты экспериментов по исследованию влияния отходов пищевой промышленности на процесс биоконверсии органического сырья, на кинетику накопления биологически активных веществ, состав продуктов биокаталитической конверсии, синтез ферментов и показатели ферментативной активности.

***Ключевые слова:** биоконверсия, отходы пищевой промышленности, сельскохозяйственные отходы, торфонавозные смеси, утилизация отходов, ресурсосберегающие технологии, экологически чистые технологии, органические удобрения.*

Вестник ТвГУ. Серия: Химия. 2017. № 4. С. 73–78  
УДК 541.6

## **ГРАФИЧЕСКИЕ ЗАВИСИМОСТИ В ИЗУЧЕНИИ КОРРЕЛЯЦИЙ СТРУКТУРА– СВОЙСТВО ТИОСПИРТОВ**

**М.Г. Виноградова**

Тверской государственной университет, г. Тверь

Построены и проанализированы графические зависимости энтальпии образования тиоспиртов от отдельных факторов химического строения. Найдено, что в одних случаях наблюдается симбатное изменение энтальпии образования топологического индекса (ТИ), это свидетельствует о хорошей корреляции между ними. В других случаях такой корреляции нет.

*Ключевые слова:* графические зависимости, энтальпия образования, топологические индексы

Вестник ТвГУ. Серия: Химия. 2017. № 4. С. 79–84  
УДК 541.6

## **ЭНЕРГИИ РАЗРЫВА СВЯЗЕЙ В АЛЬДЕГИДАХ. ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЁТЫ И ОСНОВНЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ**

**П.Н. Крылов, М.Г. Виноградова**

Тверской государственной университет, г. Тверь

Приведены численные расчеты энергий разрыва связей в альдегидах. Сделаны предсказания. Результаты расчетов согласуются с экспериментом. Выявлены определенные закономерности.

*Ключевые слова:* энергия разрыва связи, взаимодействия атомов, численные расчёты.

Вестник ТвГУ. Серия: Химия. 2017. № 4. С. 85–90  
УДК 544.623

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ РАСТВОРОВ ПИРИДИНИЕВЫХ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ**

**О.Е. Журавлев, Н.И. Кротова, Л.И. Ворончихина**

Тверской государственной университет, г. Тверь

Синтезированы ионные жидкости – гексафторфосфаты N-алкилпиридиния. Структура соединений подтверждена данными ИК-спектроскопии. Изучена электропроводность растворов синтезированных соединений в ацетонитриле.

*Ключевые слова:* ионные жидкости, синтез, гексафторфосфаты, электропроводность, ацетонитрил.

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТОЧКИ ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЯ ПОЛИМЕРСОДЕРЖАЩИХ СОСТАВОВ ВИБРАЦИОННЫМ МЕТОДОМ

А. В. Богословский, И. С. Кожевников, Л.А. Стасьева, Л.К. Алтунина

Институт химии нефти СО РАН, г. Томск

Рассмотрено применение вибрационного метода для определения точки гелеобразования полимерсодержащих составов. Предложен вискозиметр двойного резонанса, предназначенный для контроля кинетики потери текучести.

**Ключевые слова:** реокинетика, гелеобразующие составы, точка гелеобразования, вибрационная вискозиметрия.

## ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ СУЛЬФИДОВ КАДМИЯ И СЕРЕБРА

Т.В. Михайличенко, Л.А. Калинина, Е.В. Кошелева,  
М.А. Пентин, М.В. Андреев, Ю.Н. Ушакова

Вятский государственный университет, Институт химии и экологии, г. Киров

Рассмотрена возможность получения нестехиометрических сульфидов кадмия и серебра с контролируемым составом, исследованы симметрия и ширина области гомогенности, определены парциальные мольные величины растворения серы в сульфиде кадмия и процесса вывода серы из сульфида серебра. Использован комбинированный метод, включающий кулонометрическое изменение состава образцов и метод ЭДС на базе твердоэлектролитной системы с проводимостью по ионам серы. Предложены механизмы дефектообразования в дальтонидах фазах на основе сульфидов кадмия и серебра. Обоснована целесообразность изучения двухсторонних фаз электрохимическим методом с помощью и катион - и анионопроводящих твердых электролитов.

**Ключевые слова:** кулонометрическое титрование, нестехиометрия, область гомогенности, дефектообразование, твердый электролит, вакансионный механизм, электрохимическая ячейка, токообразующая реакция.

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДИЛАТОМЕТРИЧЕСКОГО МЕТОДА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СТРУКТУРНОГО СОСТОЯНИЯ ВОДЫ И ЧИСЛА ГИДРАТАЦИИ ИОНОВ

О.Г. Теленкова, Н.Ф. Фаращук, Е.О. Маркова

Смоленский государственный медицинский университет, г. Смоленск

Образование аква-иона в результате ион-дипольного взаимодействия катиона или аниона растворенной соли с молекулами воды раствора количественно характеризуется числом гидратации или числом молекул воды, связанных с ионом. При оценке явления гидратации возникает проблема, поскольку числа гидратации ионов, найденные различными методами, варьируют в очень широких пределах. Установлены количественные содержания молекул воды в гидратной оболочке ионов растворов хлорида натрия разной концентрации с применением дилатометрического метода. Результаты исследования коррелируют с теми значениями чисел гидратации, которые получены другими исследователями.

*Ключевые слова:* раствор, число гидратации, дилатометрический метод.

## КИНЕТИКА РЕАКЦИИ КОНДЕНСАЦИИ БЕНЗОИЛХЛОРИДА И СОЛЕЙ ГУМИНОВЫХ КИСЛОТ В УСЛОВИЯХ ИНВЕРСИОННОГО ТРАНСФАЗНОГО КАТАЛИЗА

С.Л. Хилько, Р.Г. Семенова, Р.А. Макарова

Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко, г. Донецк

Изучен процесс ацилирования низкотемпературных (экстракция при 20 °С) и высокотемпературных (экстракция при 100 °С) фракций натриевых солей гуминовых кислот хлористым бензоилом в условиях инверсионного трансфазного катализа (ИТК). Методом потенциометрического титрования показано, что реакция взаимодействия солей гуминовых кислот с бензоилхлоридом может протекать как по гидроксильным (-ОН), так и по карбоксильным (-COOH) группам.

*Ключевые слова:* соли гуминовых кислот, реакция ацилирования, инверсионный трансфазный катализ, потенциометрическое титрование.



## ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ ОТКЛИК ПОЛИАНИЛИНОВОГО АКТУАТОРА, ДОПИРОВАННОГО РАЗЛИЧНЫМИ НЕОРГАНИЧЕСКИМИ АНИОНАМИ

А.А. Крылов, С.С. Рясенский

Тверской государственной университет, Тверь

Изучено влияние неорганических допантов с разным радиусом аниона на электромеханические свойства полианилинового актуатора

**Ключевые слова:** полианилин, актуатор, допирование

## ОДНОСТАДИЙНЫЙ МЕТОД ЖЕЛИРОВАНИЯ L-ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНЫХ РАСТВОРОВ

М.М. Овчинников<sup>1</sup>, В.С. Лагусева<sup>2</sup>, С.Д. Хижняк<sup>2</sup>, П.М. Пахомов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Тверской государственной медицинский университет

<sup>2</sup>Тверской государственной университет

Разработан одностадийный метод желирования низкоконцентрированных водных растворов, содержащих аминокислоту L-цистеин, нитрат серебра и хлорид натрия. Процессы самоорганизации и механизм гелеобразования в системе изучены с помощью методов УФ-спектроскопии, динамического светорассеяния (ДСР), просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и вискозиметрических исследований. Установлено, что на процесс гелеобразования существенное влияние оказывает соотношение концентраций исходных компонентов (ионов серебра и L-цистеина), и концентрация хлорида натрия.

**Ключевые слова:** нитрат серебра, L-цистеин, гидрогель, фрактальный кластер, супрамолекулярная структура.

**ИЗМЕНЕНИЕ ФОСФОЛИПИДНОГО СОСТАВА СЫВОРОТКИ КРОВИ У  
БОЛЬНЫХ КО-ИНФЕКЦИЕЙ ТУБЕРКУЛЁЗ/ВИЧ  
ПОД ВЛИЯНИЕМ АНТИРЕТРОВИРУСНОЙ ТЕРАПИИ**

**П.В. Макаров, А.В. Асеев, В.К. Макаров**

Тверской государственной медицинский университет, г. Тверь

Исследовали показатели фосфолипидных фракций сыворотки крови у 50 здоровых лиц, 50 больных ко-инфекцией туберкулёз/ВИЧ без антиретровирусной терапии и 50 больных ко-инфекцией туберкулёз/ВИЧ, получавших антиретровирусную терапию. Изучено относительное содержание следующих фракций общих фосфолипидов: суммарных лизофосфолипидов, сфингомиелина, фосфатидилхолина, фосфатидил-эаноламина. У больных ко-инфекцией туберкулёз/ВИЧ антиретровирусная терапия приводила к восстановлению почти до нормы метаболизма фосфолипидов, что проявлялось существенно более низким уровнем общих фосфолипидов, содержанием суммарных лизофосфолипидов, сфингомиелина, фосфатидилхолина и фосфатидилэаноламина по сравнению с пациентами без данной терапии. Это может служить доказательством обоснованной эффективности применения антиретровирусной терапии у больных туберкулёзом и ВИЧ-инфекцией. Процентное содержание фосфатидилэаноламина у больных ко-инфекцией туберкулёз/ВИЧ было в два раза выше, чем у пациентов, не получавших АРВТ.

***Ключевые слова:** ко-инфекция, ВИЧ-инфекция, туберкулёз, антиретро-вирусная терапия.*

**К 150-ЛЕТИЮ В.Н. ИПАТЬЕВА – РУССКОГО ХИМИКА-ОРГАНИКА,  
ОСНОВОПОЛОЖНИКА КАТАЛИТИЧЕСКОГО ОРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА**

**А.С. Левина, О.Е. Журавлев, Л.И. Ворончихина**

Тверской государственной университет, г. Тверь