**О т ч е т**

**о научно-практической конференции по результатам научно-исследовательской деятельности профессорско-преподавательского состава Института химии СГУ**

**по итогам научной работы за 2017 год**

**Кафедра органической и биоорганической химии**

Научно-практическая конференция профессорско-преподавательского состава кафедры органической и биоорганической химии состоялась 8 февраля 2018 года. Были заслушаны доклады научных групп кафедры по итогам научной работы за 2017 год и представлены основные научные результаты.

**Профессор Федотова О.В., доцент Крылатова Я.Г.**: на основании совокупности спектральных данных было установлено, что арилметиленбис-4-гидрокси-6-метил-2Н-пиран-2-оны как в изолированном твердом состоянии, так и в растворах существуют в диенольной таутомерной форме, дополнительно стабилизированной внутримолекулярными водородными связями в асимметричной трео-конформации. Экспериментально полученные данные хорошо согласуются с теоретическими квантовохимическими расчетами. Характер полученных от них диоксимов является подтверждением установленного строения арилметиленбис-4-гидрокси-6-метил-2Н-пиран-2-онов, их образование свидетельствует о возможности существования в кислой среде арилметиленбис-4-гидрокси-6-метил-2Н-пиран-2-онов в (гидрокси)оксо-формах по положениям С-4 гетероколец. Основную роль в смещении таутомерного равновесия в сторону оксо-формы играет уксусная кислота.

**Профессор Кривенько А.А., асс. Василькова Н.О.**: при трехкомпонентной конденсации тиофенкарбальдегида, циклогексанона и 3-амино-1,2,4-триазола получены триазологексагидроиназолины, изомерные по типу сочленения колец и положению в них двойных связей, строение которых установлено спектрами ЯМР-1Н. Хромато-масс-спектрометрический мониторинг реакции позволил установить схему образования конечных продуктов через первоначальное формирование азометина (продукта конденсации тиофенкарбальдегида и аминотриазла), а не возможного предполагаемого α, β – непредельного кетона (2-тиенилиденциклогексанона). Такой маршрут реакции подтвержден анализом масс-спектра азометина, полученного в чистом виде, данные которого полностью соответствуют отнесениям, сделанным при его регистрации в реакционной смеси. Исследованы превращения кросс-сопряженных диеноновых производных циклогексанона несимметричного и асимметричного строения с С-нуклеофилами (малонодинитрил). Выявлена зависимость строения исходных α, β – непредельных соединений и направления реакций, протекающих с образованием функциональнозамещенных гидрохинолинов, -хроменов. Впервые вместо гидроксида натрия (в аналогичных реакциях) использован в качестве катализатора триэтиламин, что значительно облегчило выделение и очистку продуктов.

**Профессор Сорокин В.В.** Изучена многокомпонентная конденсация 2-аминобензимидазола, замещённых бензальдегидов и циклоалканонов в условиях термической и микроволновой активации. Получены ряд ранее неизвестных потенциально биологически активныхбензимидазолохиназолинов,различающихся размером алициклического фрагмента (С6-С8), природой замещающих групп (электронодонорные, электроноакцепторные) в бензольном кольце и их положением. Установлено влияние на выход продукта условий проведения реакций и размера циклоалканоновой компоненты и характера замещения в бензальдегиде.

Показано, что трёхкомпонентная конденсация динитрила малоновой кислоты, гидразинов, и оксосоединений, в условиях микроволновой активации, может быть использована для удобного однореакторного синтеза аминоцианов пиразольного и спиропиразолинового типа.

**Профессор Клочкова И.Н., доцент Аниськов А.А.**: разработаны методики регио- и стереонаправленного синтеза тетразамещенных пирролидинов и спирооксоиндолпирролизидинов посредством 1,3-диполярного циклоприсоединения моноенонов с использованием для генерации диполя изатина, пролина и бензиламина. На основании анализа тонкой структуры продуктов циклоприсоединения установлена стереоселективность и регионаправленность взаимодействия, протекающего как тандемный синхронный процесс 1,3-диполярного циклоприсоединения. Проведены экотоксикологические исследования, позволяющие выявить влияние гетероциклических представителей основания Манниха на простейщие растения, микроорганизмы, гидробионты (включающие таксономические группы), что является первым этапом решения актуальной задачи установления границ экологической безопасности синтетических биологически активных соединений. Установлено отсутствие выраженного отрицательного эффекта на жизнедеятельность указанных видов в широком интервале изученных концентраций.

**Профессор Егорова А.Ю., доц. Гринев В.С.**: отчитались о работе по гранту РНФ № 15-13-10007 «Базовые принципы химической трансформации соединений, содержащих фураноновый(и их аналогов) фрагмент – путь к созданию новых мультифункциональных веществ и материалов» 2015-2018 г.г., по гранту РФФИ "Селективная модификация фуранонов и их N-гетероаналогов как путь создания новых гетероциклических ансамблей с практически полезными свойствами» 2016-2018 г.г.

**Профессор Пчелинцева Н.В.** Разработаны новые условия синтеза 1,5-диарил- и 1,3,5-триарилпентан-1,5-дионов с использованием ПЭГ-400 (10 представителей, содержащих гидрокси-, метокси-, нитро- и иодзаместители в 1,5- или 3 бензольных колец).Осуществлен переход от насыщенных к непредельным 1,5-дикетонам с использованием иодоксибензойной кислоты и осуществлен. Получены продукты моно- и дибромирования пентанионов с применением системы неорганических солей K2S2O8-KBr в водной уксусной кислоте.

Зав. каф. Федотова О.В. подвела итоги НИР, данные представлены в таблице

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| № | Ф.И.О. | Статьи | | Тези-сы | Патен-ты | Уч. пособ., метод. ст./  монографии | Общее число публ. | Участие в конф. | Гранты | Руко-во асп./  защиты |
| Ж | Cб. тр. |
| 1 | Проф.  Федотова О.В. | 4 | 7 | 10 | - | - | 21 | 12 | г/б  исполнитель  РФФИ  (Астрахань) | Соискатель Страшилина И.В.  Иванова А.Л.  Кострицкий А.Ю. |
| 2 | Проф.  Кривенько А.П. | 4 | 5 | 3 | - | - | 12 | 7 | - | - |
| 3 | Проф.  Клочкова И.Н. | 5 | 3 | 1 | - | - | 9 | 3+1 | - | Тумский Р.С.  Борисова С.В. |
| 4 | Проф.  Егорова А.Ю. | 9 | 7 | 8 | - | - | 24 | 7 | г/б  РФФИ  РНФ  руководитель | Осипов А.К.  Линькова Е.И. |
| 5 | Проф.  Сорокин В.В. | 1 | 3 | 1+  1 у.д. | - | - | 5 | 3 | - | Ивонин М.А. |
| 6 | Проф.  Пчелинцева Н.В. | 5 | 4+2 эл.  1 редакт. | 4 | - | - | 15 | 8 | - | - |
| 7 | доц.  Аниськов А.А. | 6 | 5 | 2 | - | - | 13 | 3 | - | - |
| 8 | доц.  Крылатова Я.Г. | 1+1 эл. | 4 | 2+  3 у.д. | - | 3 эл. | 11 | 4 | - | - |
| 9 | доц.  Гринев В.С. | 7 | 3 | 2 | - | - | 12 | 4 | РНФ  исполнитель | - |
| 10 | асс.  Василькова Н.О. | 3 | 7 | 3 | - | - | 13 | 7 | - | - |

**Кафедра физической химии**

Научно-практическая конференция профессорско-преподавательского состава кафедры физической химии состоялась 2 февраля 2018 года. Были заслушаны доклады научных групп кафедры по итогам научной работы за 2017 год и представлены основные научные результаты.

**Профессор Казаринов И.А.** Были представлены результаты проведенных в отчетном году исследований по теме «Физико-химические комплексных гранулированных наноструктурированных сорбентов различного назначения на основе природного бентонита». В исследованиях активное участие принимали аспиранты, магистранты и студенты, специализирующиеся на кафедре физической химии: аспирант Никитина Над.В., магистранты Никитина Нат.В., Тарасова Н.С., студенты-дипломники Плужникова К.В., Чеснокова Т.В., студентка Фартукова Е.В.

Сделано сообщение о результатах исследований по теме «Конверсия сточных вод, содержащих органические вещества, в электрическую энергию с помощью микробных электрохимических технологий». В исследованиях активное участие принимали магистранты и студенты, специализирующиеся на кафедре физической химии: магистрант Мещерякова М.О., студентка-дипломница Карамышева Л.В., студентка Ловягина Ю.В.

**Доцент Бурашникова М.М., доцент Храмкова Т.С.** Сделано сообщение на тему: «Изучение методом импедансной спектроскопии отрицательного электрода с добавкой наноструктурированного углерода для свинцово-кислотного аккумулятора». Актуальным направлением для решения проблемы необратимой сульфатации отрицательной активной массы является поиск добавок в активную массу, в частности добавок различных типов углерода. Для исследования свойств и диагностики электрохимических систем в настоящее время находит широкое применение метод импедансной спектроскопии. Было показано, что введение в отрицательный электрод СКА углеродной добавки марки НСУ «С» приводит к увеличению емкости электрода и Кисп активной массы, а также снижает необратимую сульфатацию активной массы

Методом импедансной спектроскопии изучены процессы, протекающие на границе свинцовый электрод/раствор серной кислоты. Показано, что импеданс пористого свинцового электрода в заряженном состоянии может быть представлен эквивалентной схемой, включающей в себя сопротивление электролита *R*1, элемент *СРЕ*, соединенный параллельно с сопротивлением *R*2 и блоком, состоящим из параллельно соединенных ёмкости *С* и сопротивления *R*3. Емкость *С* представляет собой емкость двойного электрического слоя на границе электрод/электролит, *R*3 – сопротивление переносу заряда через плотно прилегающую пленку сульфата свинца. Блок *СРЕ* - *R*2 отвечает за вклад неоднородного возмущения тока на макропористой поверхности электрода, обусловленный рыхлой пленкой сульфата свинца. Показано, что импеданс пористого свинцового электрода в разряженном состоянии может быть представлен эквивалентной схемой, включающей в себя сопротивление электролита *R*1, блок *СРЕ* - *R*2 и *CPE*2 - *R*3 - *W*1. Сопротивление *R*2 можно отнести к сопротивлению переноса заряда через пленку сульфата свинца, *R*3 – к сопротивлению кристаллизации сульфата свинца, *W*1 – к диффузии соединений свинца в растворе

Рассчитаны элементы предложенных эквивалентных схем. Показано, что добавка углерода в активную массу пористого свинцового электрода снижает сопротивление переноса заряда через пленку сульфата свинца и повышает коэффициент диффузии соединений свинца.

**Профессор Иванищев А.В., доцент Гамаюнова И.М.** Представлены результаты исследований, проведённых Иванищевым А.В. — руководителем проекта РНФ №15-13-10006 «Фундаментальные аспекты создания электродов литий-ионного аккумулятора на основе литиевых интеркалятов и сплавов с высокими показателями удельной мощности и энергоемкости». Ответственным исполнителем проекта является доцент Ушаков А.В., исполнителями: доцент Гамаюнова И.М., доцент Иванищева И.А.

Представлены результаты исследований, проведённых Иванищевым А.В — руководителем проекта РФФИ №16-03-00023 «Взаимосвязь структурных и электрохимических свойств комплексных сульфатов и фторсульфатов лития и переходных металлов как перспективных материалов катода литий-ионного аккумулятора». Ответственным исполнителем проекта является доцент Гамаюнова И.М.

Иванищевым А. В. – защищена диссертация на соискание ученой степени доктор химических наук по специальности 02.00.05 – Электрохимия, научный руководитель – профессор Чуриков А.В., на тему «Методология получения и свойства интеркаляционных систем для литиевой электрохимической энергетики»; дата защиты - 11.04.2017, дата приказа и номер приказа об утверждении в ВАК№826/нк от 24.07.2017 г.

**Доцент Иванищева И.А.** Представлены результаты исследований, проведённых доцентом Иванищевой И.А. — руководителем проекта РФФИ №16-33-00328 «Разработка послойно комбинированных интеркалируемых литием структур на основе соединений Mn+1AXn (тройных карбидов и нитридов (X) переходного металла (M) и элемента главной подгруппы III-V групп (A)) и комплексных оксидов, фосфатов и силикатов лития и переходных металлов как перспективных материалов катода литий-ионного аккумулятора».

**Доцент Ушаков А.В.** Представлены результаты исследований, проведённых доцентом Ушаковым А.В. — руководителем проекта РФФИ № 16-33-00591 «Разработка электродных материалов на основе ванадатов с общей формулой LiMVO4 (M = Co, Cu, Fe, Mn, Ni) для литий-ионного аккумулятора».

Доценту Ушакову А. В. присуждено Второе место в номинации «За выдающиеся достижения в области науки» по результатам Саратовского областного конкурса на соискание Молодежной премии имени П. А. Столыпина.

Результаты по выполненным научным проектам представлены каждым из докладчиков в соответствии с его индивидуальным планом в рамках годового плана по каждому из проектов.

Заведующий кафедрой Казаринов И. А. подвел итоги НИР за 2017 г., данные представлены в таблице.

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| № | Ф.И.О. | Статьи | | Тези-сы | Патен-ты | Уч. пособ., метод. ст./  монографии | Общее число публ. | Участие в конф. | Гранты,  хоз. договоры,  выставки | Руководство аспирантами/  защиты |
| Ж/  ВАК | Cб. тр. |
| 1 | профессор  Казаринов И.А. | 1 | 7 | 5 | - | 1/- | 13 | 2 | Научный руководитель:  Доп. соглашение №1 от 01.02.2017 г. к договору № 18/15 от 01.08.2015;  договор № 11/17 от 10.07.2017 г.; договор № 56/17 от 25.10.2017 г.; договор № 14/17 от 29.11.2017 г.; договор № 15/17 от 20.12.2017 г.).  IX Саратовский индустриальный форум. 2017. | Никитина Н.В.,  Лосева А.С. |
| 2 | доцент  Бурашникова М.М. | - | 5 | - | - | - | 5 | 2 | Ответственный исполнитель:  Доп. соглашение №1 от 01.02.2017 г. к договору № 18/15 от 01.08.2015; договор № 11/17 от 10.07.2017 г.; договор № 56/17 от 25.10.2017 г.; договор № 14/17 от 29.11.2017 г.; договор № 15/17 от 20.12.2017 г.). | Данилова В.О.,  Сапишева А.А. |
| 3 | доцент  Храмкова Т.С. | - | 1 | - | - | - | 1 | - | - | - |
| 4 | профессор  Иванищев А.В. | 7 | - | 9 | - | -/- | 16 | 3 | РНФ № 15-13-10006  РФФИ № 16-03-00023 | Акмаев А.С.;  Махов С.В. |
| 5 | доцент  Иванищева И.А. | 4 | - | 3 | - | -/- | 7 | - | РФФИ № 16-33-00328  РНФ № 15-13-10006  РФФИ № 16-03-00023 | - |
| 6 | доцент  Гамаюнова И.М. | 2 | - | 2 | - | -/- | 4 | - | РФФИ № 16-03-00023  РНФ № 15-13-10006 | - |
| 7 | доцент  Ушаков А.В. | 5 | - | 6 | - | -/- | 11 | 2 | РФФИ № 16-33-00591  РНФ № 15-13-10006  РФФИ № 16-33-00328  РФФИ № 16-03-00023 | - |

**Кафедра аналитической химии и химической экологии**

Научно-практическая конференция профессорско-преподавательского состава кафедры аналитической химии и химической экологии состоялась 25 января 2018 года. Были заслушаны доклады научных групп кафедры по итогам научной работы за 2017 год и представлены основные научные результаты.

**Зав. каф. Русанова Т.Ю.** Разработаны тест-системы на основе нановолокон, полученных методом электроформования, для определения ионов никеля в природных и сточных водах. Изучено влияние природы полимера для формирования волокна (полиакрилонитрил, тефлон), условий электроформования, концентрации вводимого реагента (рубеановодородная кислота, диметилглиоксим, α-фурилглиоксим) и условий определения (рН, время регистарции сигнала, канал цветности) на метрологические характеристики тест-систем. Изучено мешающее влияние других металлов на определение Ni(II). Достоинством данных тест-систем является простота изготовления тестов, отсутствие пробоподготовки и проведение анализа в полевых условиях.

**Профессор Штыков С.Н.** Синтезированы наночастицы магнетита размером, по данным ПЭМ 7±2 нм, которые модифицировали хитозаном с толщиной оболочки 3.0±1.0 нм. Модификацию поверхности МНЧ подтверждали методом ИК-спектроскопии. Показано, что концентрация хитозана в растворе уменьшает, а его сшивка глутаровым альдегидом увеличивает величину и стабильность дзета-потенциала наночастиц. Установлено, что с увеличением времени хранения модифицированных наночастиц магнетита их размер уменьшается, а ζ-потенциал системы возрастает, что обусловлено снижением степени агрегирования частиц. В статических условиях изучена зависимость степени сорбции на модифицированном магнетите анионных азокрасителей Е-110, тропеолина 0, тропеолина 000 от нескольких параметров (pH, времени контакта с сорбентом, концентрации красителя, массы сорбента). Установлено, что степень сорбции при рН 4-5, в зависимости от природы азокрасителя, варьирует в интервале 88-94%.

**Профессор Чернова Р.К.** Получены новые твердоконтактные сенсоры на синтетические пищевые красители Е 133 и Е 102 на основе новых ионофоров красителей с катионными ПАВ разной природы. Изучены условия получения, физико-химические и электроаналитические свойства ионофоров. Разработаны методики экспрессного определения указанных красителей в продуктах питания, пасхальном наборе, жевательном мармеладе, пяти безалкогольных напитках.

Разработаны простые и экспрессные способы экстракционно-фотометрического определения синтетических пищевых красителей непосредственно в мицеллярной фазе нПАВ в безалкогольных напитках, мармеладах, готовых желе, концентратах желе и киселей. Относительная погрешность определения от 6 до 9% при содержании СПК от 2 до 49 мг/л.

**Профессор Панкратов А.Н.** На уровнях теории HF/6-311++G(3*df*,3*pd*), MP3/6-311++G(3*df*,3*pd*), CISD/6-311++G(3*df*,3*pd*), QCISD/6-311++G(3*df*,3*pd*), CCSD/6-311++G(3*df*,3*pd*), B3LYP/6-311++G(3*df*,3*pd*) с привлечением NBO-анализа и квантовой теории Р.Ф.У. Бейдера “Атомы в молекулах” (QTAIM) исследована пространственная и электронная структура гидропероксид-аниона −OOH, представляющего собой протолитическую разновидность одной из активных форм кислорода - пероксида водорода H2O2 - и предшественник другой - гидропероксидного радикала •OOH. В свете взаимодействия с электрофильными агентами (включая протон и ионы металлов) - жёсткими и мягкими кислотами Дж.Н. Льюиса - проанализировано состояние гибридизации орбиталей несвязывающих (неподелённых) электронных пар атомов кислорода. Обсуждены связывание между атомами кислорода и взаимодействие O**…**H в анионе. По атомно-связево-аддитивным схемам оценены некоторые QSAR-свойства гидропероксид-аниона: ван-дер-ваальсова поверхность и объём молекул, рефракция, поляризуемость и индекс липофильности (гидрофобности) lg*P*. На уровне MP2(full)/6-311++G(3*df*,3*pd*) определён размер ключевых малых молекул, играющих важную роль в химии, технике, технологии, окружающей среде и живой природе. Развита методология выявления природы взаимодействий между валентно не связанными атомами в небольших и/или напряжённых молекулярных системах, в малых и средних квазициклах.

**Профессор Кулапина Е.Г.** Разработаны планарные потенциометрические сенсоры на основе соединения тетрадециламмония с комплексом серебро (I) – цефотаксим (ЭАС), чувствительные к некоторым цефалоспориновым антибиотикам. Установлены оптимальные составы мембран, углеродсодержащих материалов (графит, углеродные нанотрубки). Оценены электроаналитические характеристики планарных цефотаксим-селективных сенсоров: интервал линейности электродных функций составляет 1∙10-4 - 1∙10-1, угловой коэффициент 45±4, время отклика 50 с, концентрация ЭАС 2-5%. Сенсоры применены для определения цефотаксима в водных средах и ротовой жидкости.

#### **Профессор Сумина Е.Г.** Продолжены, расширены и развиты подходы к совершенствованию хроматографических методов анализа, основанные на использовании модифицированных (гибридных) мицеллярных подвижных фаз, содержащих органический растворитель и мицеллы катионных, анионных или неионных поверхностно-активных веществ (ПАВ) и циклодекстрины. Показано, что использование модифицированных мицеллярных элюентов в нормально-фазовом варианте хроматографирования позволяет в 2-3 раза улучшить эффективность и в 5-6 раз селективность разделения аналитов, а также в 2-3 раза повысить чувствительность их определения по сравнению с водно-органическими элюентам. Методом планарной хроматографии (ТСХ) установлено, что основой улучшения хроматографических параметров является разная степень солюбилизации исседуемых веществ в мицеллярные и вклад в удерживании сорбатов трех видов равновесий в системах: растворитель-сорбент, растворитель-мицелла и мицелла-сорбент. В вариантах нормально-фазовой ТСХ в модифицированных мицеллярных подвижных фазах, разработаны методики раздельного определения олеаноловой и глицирризиновой кислот в некоторых фармацевтических препаратах и пищевых продуктах. Sr составляет 0,01 - 0,02, что существенно ниже по сравнению с водно-органическими ПФ.

**Профессор Доронин С.Ю.** Применена методология «cloud point» экстракции для извлечения и концентрирования 14 синтетических пищевых красителей (СПК) из продуктов питания. Установлены значения температур помутнения в системах нПАВ – Н2О. На примерах 60 синтетических красителей разных классов показана универсальная экстрагирующая способность мицеллярных фаз нПАВ. Изучено влияние заряда ионных форм СПК на параметры экстракции моноазосоединений, образующих одно-, двух- и трехзарядные анионы. Показано, что для моноазосоединений с одинаковой степенью гидрофобности, содержащих от 1 до 3 сульфогрупп, наблюдается снижение степени экстракции пропорционально увеличению заряда аниона от 98.2% до 76.5% и от 83.7 до 44.1% соответственно.

**Профессор Смирнова Т.Д.** Изучено влияние концентрации модификатора, - ионов европия, на морфологические характеристики синтезированных наночастиц серебра. Показана зависимость интенсивности сенсибилизированной флуоресценции европия в наноаналитических системах на основе наночастиц серебра от липофильных свойств производных тетрациклина. Разработаны флуориметрические методики определения доксициклина с использованием серебряных наночастиц в лекарственном препарате и волжской воде.

**Доцент Косырева И.В.** Разработаны интегральные показатели для оценки суммы тяжелых металловв водных объектах, построены лепестковые диаграммы, написана программа (своместно с КНИТ) для цифровой обработки тест-изображений.

Зав. каф. Русанова Т.Ю. подвела итоги НИР, данные представлены в таблице.

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Ф.И.О. | Статьи | | Тези сы | Патен ты | Уч. пособ., метод. ст./ монограф. | Общее число публ. | Участие в конф. | Гранты | Руко-во асп./защиты |
| Ж. ВАК | Cб. тр. |
| Зав. каф. Русанова Т.Ю. | 3 | 2 | 6 | - | 1 / - | 12 | 3 | 1 | Юрова Н.С., Доронин Д.С. / - |
| Проф.  Штыков С.Н. | 7 | 3 | 8 | - | - | 18 | 5 | 1 | Егунова О.Р.,  Решетникова И.С. / Егунова О.Р. |
| Проф.  Чернова Р.К. | 9 | 3 | 9 | 1 | 1 / 2 | 25 | 4 | - | - / - |
| Проф.  Кулапина Е.Г. | 7 | - | 4 | - | - / - | 11 | 1 | - | - / - |
| Проф.  Панкратов А.Н. | 4 | 10 | - | - | - / - | 14 | 3 | - | - / - |
| Проф. Смирнова Т.Д. | 3 | 4 | 5 | - | - / - | 12 | 3 | 1 | Желобицкая Е.А., Данилина Т. / - |
| Проф. Сумина Е.Г. | 2 | 4 | 4 | - | - / - | 10 | 4 | 1 | - / - |
| Проф.  Доронин С.Ю. | 4 | 6 | 7 | - | 1 / 1 | 19 | 3 | - | Данчук А.И., Махова Т.М., Габидулина М.К., Такшаитова  Э. / - |
| Доц. Косырева И.В. | - | 7 | 3 | - | 25 / - | 35 | 6 | - | - |

**Кафедра полимеров на базе ООО «АКРИПОЛ»**

Научно-практическая конференция состоялась 12 февраля 2018 года

**Зав. кафедрой Шиповская А.Б.** Исследованы физико-химические свойства индивидуальных водных растворов *L*-аспарагиновой кислоты и растворов с добавкой хитозана. Установлено, что взаимодействие хитозана с аспарагиновой кислотой сопровождается формированием полимерной соли, диссоциирующей в водной среде с образованием поликатиона хитозана [~(NH3)+] и свободных противоионов аспарагиновой кислоты. Отмечено, что в растворах *L*-аспарагиновой кислоты с добавкой хитозана с ростом концентрации полимера возрастает поверхностное натяжение, оптическая плотность, показатель преломления, изменяются гидродинамические свойства макромолекул. В разбавленных растворах макромолекулы полисоли проявляют полиэлектролитные свойства. С повышением температуры термодинамическое качество водного раствора аспарагиновой кислоты как растворителя хитозана ухудшается, что приводит к уменьшению размера полимерных клубков и, соответственно, к уменьшению характеристической вязкости системы.

Методами сканирующей электронной микроскопии и гравиметрии визуализированы морфологические особенности и проведена оценка убыли массы микротрубок хитозана при биодеструкции *in vitro* в модельных средах: ферментативной среде лизоцима и фосфатном буфере. Установлено, что в процессе выдерживания в ферментативной среде происходит изменение рельефа и морфологии поверхности микротрубки, выражающееся в появлении микропор, трещин и объемных дефектов. При выдерживании образцов в фосфатном буфере существенные дефекты не формируются, наблюдается лишь образование небольшого количества микропор. Убыль массы образцов через 180 суток выдерживания в ферментативной среде составила 30%, в фосфатном буфере ‒ 7%.

**Зав. кафедрой Шиповская А.Б., ассистент Малинкина О.Н.** "One pot" золь-гель синтезом полученыгибридные глицерогидрогели на основе тетраглицеролата кремния и хитозана. Оценено влияние компонентного состава (концентрации темплата и прекурсора), низкомолекулярного ускорителя (NaCl) и условий проведения процесса (рН, температура) на время гелеобразования. Методом АСМ в полуконтактном режиме визуализирован микрорельеф поверхности глицерогидрогелей и рассчитаны стандартные параметры шероховатости. Установлено, что кремнийхитозансодержащие глицерогидрогели имеют сложный поверхностный рельеф. Твердая золь-гель матрица глицерогидрогелей характеризуется равномерным распределением элементов неорганической фазы и развитой микропористой структурой с аморфно-кристаллическим упорядочением. Масштаб неровностей поверхности глицерогидрогелей, как и структурно-морфологические особенности и степень кристалличности твердой золь-гель матрицы, определяется массовым соотношением темплат/прекурсор и молекулярной массой полимера.

**Зав. кафедрой Шиповская А.Б., доцент Байбурдов Т.А.** Проведён поиск, анализ и обобщение научной, патентной и научно-технической русскоязычной литературы за 2000–2017 г.г., посвящённой проблеме разработки сорбентов на основе полимерных материалов, пригодных для сбора разливов нефти и нефтепродуктов с поверхности водоёмов. Выделены основные классы современных полимерных сорбционных материалов, даны характеристики предлагаемых нефтесорбентов. Оценена перспективность применения полимерных сорбентов для очистки поверхностей водоёмов от нефтяных разливов.

**Доцент Шмаков С.Л.** Критически оценена модель возбуждённого состояния Д.С. Сандитова для расчёта температуры размягчения *T*g стёкол и стеклообразных материалов: обнаружено, что она даёт завышенные на порядок величины *T*g. Уточнено выражение для относительного критического смещения возбуждённого атома в его связи с параметром Грюнайзена на основе потенциала Морзе. Проведено сравнение ряда характеристик испытаний металлических материалов на твёрдость (методы Бринелля, Виккерса и Роквелла) по отечественным и зарубежным стандартам.

**Доцент Шмаков С.Л., доцент Байбурдов Т.А.** Проведен литературный и патентный поиск в англоязычной литературе по синтезу полимеров-сорбентов нефти, петрогелей. Сшитый аэрогель хитозана, полученный путём сшивания и сублимационной сушки, по сравнению с обычными сорбентами, обладает уникальными свойствами − низкой плотностью (0,0283 г/см3), высокой пористостью (97–98%) и высокой адсорбцией (41,07 и 31,07 г/г для сырой нефти и дизельного топлива соответственно).

**Доцент Федусенко И.В.** Методом электроформования с предварительным исследованием условий получения и физико-химических параметров прядильных растворов были получены нетканые материалы на основе ПА-6 с антибактериальной добавкой полигексаметиленгуанидин гидрохлорид. Установлено, что путем изменения скорости вращения электрода в процессе электроформования и увеличения концентрации прядильного раствора можно получить тонкий и воздухопроницаемый двухслойный материал.

**Доцент Гребенюк Л.В.** Проведена оценка состояния озеленения территории города и оценка стабильности растений по уровню асимметрии морфологических структур. Проведена оценка уровня загрязнения приземного слоя атмосферы выбросами автотранспортных средств по концентрации окиси углерода. Проведен анализ основных рекреационных зон города Саратова. Проведено биотестирование почвогрунта после экспозиции композитных пленок на основе крахмала и L-аспарагиновой кислоты.

**Доцент Степанов М.В.** Проведен анализ основных рекреационных зон города Саратова. Проведена оценка состояния озеленения территории города и оценка стабильности растений по уровню асимметрии морфологических структур. Проведено биотестирование почвогрунта после экспозиции композитных пленок на основе крахмала и L-аспарагиновой кислоты.

**Ассистент Малинкина О.Н.** Проведен синтез новых органо-неорганических гибридных глицерогидрогелевых кремнийхитозансодержащих материалов в тонком слое на основе *L-* и *D*-аскорбата хитозана и полиолатами кремния. Оценено влияние физико-химических параметров хитозана, изоформы аскорбиновой кислоты, рН и ионной силы среды на скорость гелеобразования, а также стабильность гидрогелевых структур. Оптимизированы условия синтеза и получения стабильных гибридных гидрогелевых материалов.

**Доцент Чикарев В.Н.** Проведена научно-исследовательская работа, в которой рассмотрены проблемы вовлечения женщин в преступления террористической направленности. Выявлены и раскрыты особенности социально-психологических факторов вовлечения женщин в террористическую деятельность. Проведен анализ каждого из представленных факторов на примере исследования биографических данных террористок-смертниц, участвующих в терактах на территории Российской федерации. Детально изученные факторы десоциализации молодёжи и их влияние на рекрутирование молодых женщин в террористические организации позволит выработать более эффективные способы борьбы с терроризмом.

Общее количество публикаций сотрудников кафедры полимеров на базе ООО «АКРИПОЛ» за 2017 г.: 1 патент на изобретение РФ, 2 заявки на изобретение РФ, 1 учебно-методическое пособие для студентов бакалавров, 1 глава в монографии, 9 статей в журналах из БД WOS, Scopus и РИНЦ, 25 статей в сборниках научных трудов, 19 тезисов докладов. Сотрудники кафедры приняли участие в 17 научных конференциях (10 Всероссийских и 7 Международных). Зав. каф. Шиповская А.Б. подвела итоги НИР, данные представлены в таблице.

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| № | Ф.И.О. | Статьи | | | Тези  сы | Патенты/  заявки | Моно  графии | Уч. пособ., методички | Общее  число  публ. | Участие в конф./ доклады | Гранты/  иниц. темы/ хоздоговора | Руко-во  асп./  защиты |
| WoS  Scopus | ВАК | Сб.  трудов |
| 1 | Зав. каф. Шиповская А.Б. | 5 | 1 | 16 | 11 | 1/2 | 1 | - | 37 | 9/27 | «Сосуд» (руководитель)  «Нефтесбор»  (руководитель) | Бабичева Т.С. (2-й год обуч.) |
| 2 | Доц. Федусенко  И.В. | − | 1 | 2 | − | − | − | − | 3 | 2/2 | − | − |
| 3 | Доц. Шмаков  С.Л. | − | 2 | 3 | − | − | − | − | 5 | 1/3 | «Нефтесбор» (исполнитель) | − |
| 4 | Доц. Байбурдов  Т.А. | − | − | 1 | − | − | − | − | 1 | 1/1 | − | − |
| 5 | Доц. Гребенюк  Л.В. | − | − | 2 | 2 | − | − | − | 4 | 3/4 | − | − |
| 6 | Доц. Степанов  М.В. | − | − | 1 | 8 | − | − | − | 9 | 8/9 | − | − |
| 7 | Доц. Чикарёв  В.Н. | − | − | 1 | − | − | − | − | 1 | 1/1 | − | − |
| 8 | Асс. Малинкина  О.Н. | 2 | 1 | 7 | 6 | 1/1 | 1 | − | 19 | 8/13 | − | − |

**Кафедра нефтехимии**

Конференция состоялась 17 января 2018 года. Заслушаны доклады.

**Проф. Кузьмина Р.И.** Проведены систематические исследования активности и селективности высококремнистых цеолитов типа ZSM-5 в превращении низших спиртов C2-C5 и установлено, что модифицирование цеолита сульфатом циркония (IV) приводит к повышению активности гетерогенной системы 1% Zr-ZSM-5 во вторичных реакциях изомеризации промежуточных углеводородов С4-С14. Показано, что степень превращения спиртов C2-C5 достигает 99,9%, в интервале температур 300-400 °С преобладают реакции изомеризации *н-*парафинов (селективность по реакциям изомеризации достигает 40%), при 400-500 °С увеличивается вклад реакций ароматизации (селективность по ароматизации-33%).

Исследования физико-химических свойств и состояния активных центров поверхности цеолитных систем типа ZSM-5 показали, что модифицирование цеолита ZSM-5 сульфатом циркония (IV) позволяет увеличить кислотность центров Льюиса (с 35,6 до 61,3 мкмоль/г) и центров Бренстеда (с 0 до 199,4 мкмоль/г), приводящих к перераспределению вклада реакций изомеризации, крекинга и ароматизации углеводородов.

Установлены закономерности превращений гексена-1, этилена, *н-*гексана как полупродуктов превращения этилового спирта*.* Проанализированы все возможные направления образования алифатических и ароматических углеводородов на поверхности каталитической системы 1% Zr-ZSM-5 и предложена схема превращения этанола, включающая элементарные реакции карбкатионов с образованием олефинов С3-С6, парафинов линейного и изостроения С4-С14. Разработаны математическая модель превращения этанола и углеводородов на каталитической системе 1% Zr-ZSM-5 и программный комплекс компьютерного моделирования для решения обратной задачи химической кинетики, позволяющий получить основные кинетические величины, характеризующие скорость реакций углеводородов на поверхности каталитической системы 1% Zr-ZSM-5 Результатом решения обратной кинетической задачи явилось нахождение 86 приведенных констант скоростей элементарных реакций углеводородов, протекающих на поверхности каталитической системы 1 % Zr-ZSM-5 в интервале температур 300-500 °С, что в свою очередь позволило рассчитать константы равновесия для каждой элементарной химической реакции.

**Доц. Никифоров И.А.** Разработана компьютерная модель реактора окисления циклогексана и внедрена в промышленное применение в составе учебно-тренажерного комплекса по обучению оперативного персонала реального производства действиям в различных – штатных и нештатных ситуациях. Созданная модель основана на модели идеального смешения, перемешивание моделировалось с помощью «однопараметрической диффузионной модели». При моделировании учитывались реакции образования гидроперекиси циклогексила, циклогексанона, циклогексанола, дикарбоновых кислот - адипиновой, глутаровой, янтарной, щавелевой, одноосновных кислот - муравьиной, уксусной, эфиров адипиновой и муравьиной кислоты.

Разработана математическая модель процесса адсорбции воды из природного газа, подобраны оптимальные условия осушки на цеолите NaA 4A и алюмогеле при давлении 20 – 25 МПа и температуре 5-40 °С. Полученные результаты расчета модели хорошо согласуются с экспериментальными данным, согласно которым точка росы при давлении 20МПа и температуре 30 0С на алюмогеле составляет -70°С (расчетные -72 °С). Это дает основание полагать, что выбранный метод расчета является достаточно точным, и позволяет оценить преимущества и недостатки использования адсорбентов цеолита NaA 4A и алюмогеля в качестве осушителей природного газа для АГНКС при давлениях 20 – 25 МПа.

**Доц. Аниськова Т.В.** Проведено исследование каталитической системы на основе цеолита ZSM-5 (М=60), промотированной пятиокисью ванадия. И оценка влияния модифицирующей добавки V2O5 на превращения н-нонана. С ростом температуры наблюдается интенсификация реакций крекинга, о чем свидетельствует увеличение суммарного содержания газообразных продуктов С1-С5 как для промотированного катализатора, так и для носителя, в интервале температур 450 - 550 ºС. При температуре 600 ºС для каталитической системы V2O5/ZSM-5(M-60) наблюдается резкое уменьшение содержание газообразных углеводородов С1-С5, что, связано с частичной перестройкой структуры ванадиевого катализатора и, как следствие, данный катализатор теряет свою активность.

В результате проведенных исследований установлено, что введение модифицирующей добавки позволяет получать ценные газообразные продукты (бутан- бутиленовую и пропан-пропиленовую фракций, а также сухого газа (фр. С1-С2), используемого в качестве топлива для нужд НПЗ) и жидкие продукты, которые являются компонентами моторных топлив, с высоким октановым числом, а также сырьем предприятий нефтехимического профиля.

**Доц. Ромаденкина С.Б.** Исследована гидроочистка смолы термической переработки сланца Коцебинского месторождения. Проведена фракционная разгонка сланцевой смолы для удаления легкокипящих компонентов, выход этой фракции составил 28 масс.%. Проведена каталитическая очистка сланцевой смолы от серосодержащих соединений на промышленном катализаторе DN-200. Определена степень очистки сланцевого сырья от сернистых соединений, которая составила 94%.

Основным показателем оценки активности катализаторов являлась гидродесульфидирующая способность, т.е. степень очистки углеводородной смеси. Степень очистки сланцевой смолы на катализаторе DN-200 составляет от 83 до 94%, что свидетельствует о высокой эффективности данного процесса гидроочистки. Содержание сернистых соединений в сланцевой смоле после проведения процесса гидроочистки составило от 0.17 до 0.33 %.

Таким образом, экспериментально установлено, что процесс каталитической гидроочистки сланцевой смолы на катализаторе DN-200 позволил снизить содержание сернистых соединений в сланцевой смоле до 0.2 мас.% с высокой степенью очистки (до 94%). Полученный продукт отвечает требованиям ГОСТ 2669-81 и может использоваться для получения сланцевого кокса.

**Доц. Угланова В.З.** Разработаны и предложены организационно-технических мероприятий по повышению безопасности персонала при воздействии вредных факторов – электромагнитных излучений (ЭМИ) промышленных частот и шума на промышленном производственном объекте. В качестве объекта исследования рассмотрено производство листового стекла (г. Саратов). Непосредственные исследования проводили в цехе по варению и разливу стеклосодержащей массы, где источниками ЭМИ и шума являлись: операторская стекловара, шкафы управления стекловарной печью, ПУ-230.На основании полученных данных, а также с учетом территориальных особенностей площадки и уже реализующихся мероприятий по снижению опасности предложены организационно-технические мероприятия по повышению безопасности персонала.Установлено, что уровень звука, воздействующий на персонал, находящийся в зоне открытого типа, в некоторых случаях превышает предельно-допустимый на 12÷21 %. С учетом требований нормативно-правовой базы предложен ряд мероприятий на объекте, позволяющих минимизировать негативное воздействие шума.

**Доц. Иванюков М.И.** На основе анализа наличия пожароопасных веществ, объемно-планировочных характеристик производственных зданий произведена оценка пожарной опасности, рассчитаны показатели индивидуального, коллективного и пожарного рисков промышленного объекта.

Исследовались подходы защиты технологических трубопроводов от статического электричества при транспортировке по ним нефтепродуктов. На основе анализа возможных опасностей на районных газораспределительных станциях и возможных сценариев развития аварий на них выработаны практические рекомендации по безопасной эксплуатации газовых приборов в быту.

Разработан для использования в учебном процессе комплект учебных программ для оценки пожарной безопасности технологических процессов на базе табличного процессора Mikrosoft Excel, обучающихся фильмов, плакатов, буклетов, альбомов по дисциплинам: «Безопасность и жизнедеятельности», «Хранение и транспортировка опасных грузов», «Надежность технических систем и техногенный риск».

**Доц. Свешникова Е.С.** Исследован процесс термолиза твердого илового осадка очистки сточных вод. Термоаналитическое исследование твердого остатка процесса пиролиза ила проведено в интервале температур 20-1000°С. Анализ кривых термогравиметрии и диференциально-термического анализа показал, что процесс можно разделить на несколько стадий: 20-70°С – без изменения массы материала; в интервале температур 70-250°С убыль массы составляет 6%; в интервале температур 250-570°С происходит медленное уменьшение массы, о чем можно судить по положению кривой ТГ (очень пологая). Убыль массы составляет 39%.

В этом интервале на кривой ДТА наблюдается размытый экзотермический эффект с двумя нечеткими максимумами при 320 и 450°С. Убыль массы и наличие экзотермического эффекта свидетельствуют о выгорании (окислении) органической составляющей исходного образца. Выше 570°С на ДТА отсутствуют эффекты, а положение кривой ТГ свидетельствует о медленной убыли массы и к 1000°С общая убыль составляет 44-45%.

В работе твердый остаток ила после пиролиза использовали в качестве сорбента для сбора нефти с поверхности воды. Количество сорбента в эксперименте определялось необходимостью полного сбора нефти. Большей сорбционной способностью по нефти обладают мелкодисперсные образцы 4,3 г/г, (что составляет 9-86% от общего количества нефти на поверхности воды в модельной системе). На крупнодисперсном продукте сорбция составила 3,2 г/г (64%). В случае значительных разливов, с увеличением толщины слоя нефтепродукта на поверхности воды, наблюдается повышение сорбционной способности твердого остатка по нефти - до 4,7 г/г (94%).

Таким образом, твердый остаток ила после пиролиза может быть использован в качестве сорбента для сбора нефти с поверхности воды.

**Доц. Бурухина О.В.** Исследовано превращение синтез-газа на различных катализаторах: оксиде меди, оксиде никеля, оксиде железа и их смесей, нанесенных на оксид алюминия. Исследование проводили при атмосферном давлении, в интервале температур от 200оС до 600оС. На основе хроматографического исследования выявлено, что в состав полученных продуктов входят углеводороды С1-С6. Рассчитаны выходы продуктов, степень конверсии сырья и селективность по углеводородам. Выявлены температурные зависимости степени превращения и селективности. В результате исследования установлено, что смешанный катализатор 3%CuO,3%Fe2O3/Al2O3 позволяет улучшить эффективность проведения процесса, но даже в этом случае степень превращения не превышает 30%, а максимальная селективность по углеводородам С5+ не превышает 15%.

Зав. каф. Кузьмина Р.И. подвела итоги конференции, результаты которой сведены в таблице.

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Ф.И.О. | Статьи | | Тезисы | Патенты | Уч.сооб.,  метод  Ст./  монографии | Общее  число  публ. | Участие  в конф. | Гранты | Рук-во асп./  защиты |
| Ж/ВАК | Сб.тр |
| Кузьмина Р.И. | 4 | 12 | 1 | - | 1 | 18 | 1 | - | - |
| Иванюков М.И | - | 2 | - | - | - | 2 | 1 | - | - |
| Никифоров И.А. | 1 | 1 | - | - | - | 2 | 1 | - | Кривоносов А.А./ |
| Ромаденкина С.Б. | 5 | 3 | - | - | - | 8 | - | - | Сверчков А.А. |
| Аниськова Т.В. | 2 | 6 | - | - | - | 8 | 1 | - | - |
| Угланова В.З. | 2 | 6 | 4 | - | 2 | 14 | 1 | № 15-03-99704 | - |
| Бурухина О.В. | 2 | 13 | - | - | - | 15 | 3 | - | - |
| Свешникова Е.С. | 1 | 2 | - | - | - | 3 | 1 | - | - |

**Кафедра общей и неорганической химии**

Конференция состоялась 15 января 2018 года, протокол заседания кафедры №9.

**Профессора Черкасов Д.Г., Ильин К.К.**

Изобутиловый спирт находит широкое применение в качестве растворителя в лакокрасочной промышленности, производстве пестицидов, душистых веществ, пищевых эссенций, лекарственных средств. Поэтому актуальной задачей является определение растворимости изобутилового спирта в различных растворителях, в частности, в воде в широком интервале температур. Фазовые равновесия в смесях компонентов двойной системы H2O–*i*-С4Н9OH изучали визуально-политермическим методом в стеклянных ампулах при давлении паров в интервале температур –15-135°С. Состав раствора, соответствующий критической точке растворимости, определяли экспериментально методом отношения объемов жидких фаз и подтверждали графически путем построения диаметра Алексеева на поле расслоения фазовой диаграммы системы. В системе при –2.4°С происходит нонвариантная монотектическая фазовая реакция: ℓ 2 ⮀ ℓ1+S, где ℓ1 — органическая фаза, ℓ2 — водная фаза, S — твердая фаза, представляющая собой кристаллы льда. Ниже нонвариантной температуры осуществляется двухфазное моновариантное состояние ℓ1+S, представляющее собой насыщенный в отношении кристаллов льда раствор. Выше нонвариантной температуры осуществляются два моновариантных состояния: насыщенный в отношении кристаллов льда раствор с большим содержанием воды в жидкой фазе ℓ2+S и равновесие двух жидких фаз ℓ1+ℓ2. Область расслоения ограничена бинодальной кривой с экспериментально найденной ВКТ, соответствующей температуре 133.9°С и содержанию спирта в растворе 35.79 мас.%. Бинодальная кривая отделяет поле расслоения ℓ1+ℓ2 от поля гомогенно-жидкого состояния, индексированного как ℓ1 или ℓ2. На поле двухжидкофазного состояния построены ноды (рисунок) и определены графически составы равновесных жидких фаз при пятнадцати температурах. Найдены составы равновесных водной и органической фаз монотектического состояния (содержание спирта в них равно 9.2 и 86.6 мас.%, соответственно), полученные методом графической экстраполяции линий кристаллизации и ветвей бинодальной кривой на монотектическую прямую. Через середины нод проведен диаметр Алексеева, который позволил графически подтвердить состав и температуру критического раствора (ВКТ). Полученные нами результаты по взаимной растворимости, температуры монотектического состояния компонентов двойной системы вода–изобутиловый спирт в целом хорошо согласуются с литературными данными.

Методами сечений и изотермического титрования при 25°С впервые изучены фазовые диаграммы тройных систем карбонат калия–вода–углеводород (толуол, н.додекан). Фазовые диаграммы обеих систем относятся к диаграммам тройных систем с высаливанием двойной гетерогенной системы. Твердой фазой монотектического равновесия является полутораводный кристаллогидрат карбоната калия. На поле расслоения фазовой диаграммы каждой тройной системы построено девять нод. Все ноды поля расслоения пересекаются в вершине концентрационного треугольника, отвечающей толуолу или н.додекану, и расходятся веером по направлению к стороне карбонат калия–вода. В соответствии с концепцией Мерцлина это указывается на преобладающее взаимодействие компонентов двойной системы карбонат калия–вода.

Результаты работы используются при чтении специальных курсов лекций «Физико-химический анализ в химической технологии, синтезе новых веществ и материалов», «Основы физико-химического анализа», бакалавры, Институт химии СГУ. Результаты исследований будут интересны для широкого круга исследователей и технологов. По итогам проведенных исследований опубликованы 4 работы в соавторстве со студентами, защищены 2 выпускные квалификационные работы.

**Доцент Смотров М.П.**

*i*-Масляная кислота находит широкое применение в качестве растворителя в лакокрасочной промышленности, для экстракции щелочноземельных металлов, при производстве пластификаторов для лаков на основе эфиров целлюлозы, для синтеза душистых веществ в парфюмерии и ароматизирующих веществ в пищевой промышленности. Поэтому актуальной задачей является определение растворимости *i*-масляной кислоты в различных растворителях, в частности, в воде в интервале температур. Фазовые равновесия в смесях компонентов двойной системы H2O–*i*-С4Н8O2 изучали визуально-политермическим методом в стеклянных ампулах при давлении паров в интервале температур –10-30°С. Состав раствора, соответствующий критической точке растворимости, определяли экспериментально методом отношения объемов жидких фаз и подтверждали графически путем построения диаметра Алексеева на поле расслоения фазовой диаграммы системы. В системе при –1.8оС происходит нонвариантная монотектическая фазовая реакция: l2⮀l1+S, где l1 – органическая фаза, l2 – водная фаза, S – твердая фаза, представляющая собой кристаллы льда. Ниже нонвариантной температуры осуществляется двухфазное моновариантное состояние l1+S, представляющее собой насыщенный в отношении кристаллов льда раствор. Выше нонвариантной температуры осуществляются два моновариантных состояния: насыщенный в отношении кристаллов льда раствор с большим содержанием воды в жидкой фазе l2+S и равновесие двух жидких фаз l1+l2.

Область расслоения ограничена бинодальной кривой с экспериментально найденной ВКТ, соответствующей температуре 25.8°С и содержанию кислоты в растворе 39.51 мас.%. Бинодальная кривая отделяет поле расслоения l1+l2 от поля гомогенно-жидкого состояния, индексированного как l1 или l2. На поле двухжидкофазного равновесия построены ноды и определены графически составы равновесных жидких фаз при пятнадцати температурах. Определены составы равновесных жидких фаз монотектического состояния, полученные методом графической экстраполяции линий кристаллизации и ветвей бинодальной кривой на монотектическую прямую. Через середины нод проведен диаметр Алексеева, который позволил графически подтвердить состав и температуру критического раствора (ВКТ).

**Доцент Акмаева Т.А.**

Исследовано влияние температурно-временного режима, различных плавней, влияние модификатора нитрата висмута на оптические свойства кристаллофосфора красного цвета свечения Y2O2S:Eu. Исследовано влияние галогенид-ионов на (Zn,Cd)S∙Ag,In.

Было установлено, что образцы люминофоров с лучшей кристаллической структурой получаются при использовании в качестве плавня-минерализатора карбоната натрия.

Подобран оптимальный температурно-временной интервал отжига Y2O2S:Eu. Установлено, что модифицирование поверхности люминофора при 900 °С приводит к изменению кристаллической структуры люминофора Y2O2S:Eu. Добавка 0,2 ат. % модификатора увеличивает интенсивность спектра ФЛ на 10 %.

Установлено, что свойства люминофоров зависит от химической природы введенных галогенид - ионов.

Установлено, что более высокой интенсивностью фотолюминесценции обладает люминофор (Zn,Cd)S∙Ag,In обработанный бромидом аммония. Образцы, полученные с помощью обработки иодидом аммония, имеют координаты цветности соответствующие «более красному» цвету свечения х = 0,575; y = 0,425. Обработка хлорсодержащими ионами приводит к агломерации частиц люминофоров и не может быть рекомендована для получения люминофоров с красным цветом свечения. По итогам исследования опубликована статья.

В 2017 году выполнена выпускная квалификационная работа «Влияние галогенид-ионов на фотолюминесценцию люминофора на основе системы ZnS-CdS» студенткой 4 курса Института Химии специальности 020101 Химия Кузьмичевой Дарьей Геннадьевной. Выполнен курсовой проект студенткой 3 курса Института Химии специальности 020101 Химия Пономаревой Татьяной «Влияние поверхностной обработки зерен люминофора на свойства люминофора на основе оксосульфида иттрия, активированного европием» под руководством доц. Акмаевой Т.А..

По направлению «Педагогическое образование» изучена взаимосвязь процесса обучения и психологического состояния студентов. Показана роль химического эксперимента при подготовке будущих учителей химии. По итогам данного исследования опубликованы две статьи.

**Доцент Варламова Т.М.**

Системы иод – иодид – растворитель являются перспективным объектом исследования в электротехнике в качестве электролитных композиций для химических источников тока, молекулярных сенсоров и т.д. Технологические процессы с использованием иодидов различных металлов нашли применение для извлечения и рафинирования металлов, пропитки иодных фильтров в ядерных установках для улавливания радиоактивного иода из газообразных отходов. Визуально-политермическим методом в интервале 5–30°С исследованы фазовые равновесия и критические явления в тройной системе иодид калия–вода–третичный бутиловый спирт. Построены политермы фазовых равновесий изученных сечений системы KI–H2O–t-BuOH. Определена температура критической ноды монотектического равновесия, соответствующая началу расслаивания в тройной системе. Установлены зависимости содержания иодида калия и третичного бутилового спирта в критических растворах от температуры. Результаты политермических исследований использованы для построения изотермических фазовых диаграмм тройной системы KI–H2O–t-BuOH при различных температурах.

**Доценты Захарова Т.В., Макушова Г.Н.**

Представлены результаты расчета геометрии возможных комплексных соединений eвропия с анионами альгиновой кислоты (HAlg- и Alg2-) методом PM7/Sparkle с учетом сольватационной модели COSMO. Показано, что с увеличением числа лигандов в координационной сфере стабильность соединений существенно уменьшается, при этом возрастают их электронно-акцепторные свойства. Сопоставление рассчитанных спектров возбуждения с экспериментальными данными показало, что в растворе, содержащем анионы европия и альгиновой кислоты наиболее вероятно наличие соединений состава Eu(HAlg)(Alg) и [Eu(Alg)3]3-.

Проведено квантово-химическое исследование комплексов Eu и Tb с некоторыми углеводами (крахмалов и продуктами его термического разложения – глюкозой, фруктозой и левоглюкозаном). Установлено, что наиболее термодинамическим выгодным является образование комплексов со звеньями крахмала состава 1:5, а наименее выгодным – комплекса Eu с левоглюкозаном. Вероятность образования комплексов европия с исследованными лигандами увеличивается с появлением дополнительных связей, придающим устойчивость соединениям. Из исследованных соединений наиболее эффективными донорами являются комплексы со звеньями крахмала, причем с увеличением числа звеньев донорные свойства ослабевают. Комплексы с индивидуальными молекулами глюкозы, фруктозы и левоглюкозана малоактивны, т.к. энергии граничных орбиталей расположены существенно ниже уровня Ферми.

Проведено исследование люминесцентных свойств растворов, содержащих таниновую кислоту и хлорид тербия в соотношении 1:1. По данным спектров испускания можно предположить, что связывание органического лиганда с ионом тербия частично происходит, т.к. полосы тербия и лиганда заметны в режиме замедленной съемки. При увеличении длины волны источника возбуждения наблюдается уменьшение интенсивности полос, которые можно отнести к характеристическим полосам ионов Tb+3. После термической обработки комплекса характеристические полосы тербия наблюдаются в режиме замедленной флуоресценции, что свидетельствует об ухудшении связывания металла с потенциальными лигандами. При расширении диапазона рН наиболее эффективное связывание происходит в растворах с рН 4,08, 8,03, которые будут более подробно исследованы в дальнейшем.

**Доцент Пожаров М.В.**

Проведено теоретическое моделирование синтеза монослоя графена из молекул нафталина, расположенных на поверхности арахиновой кислоты с упорядоченной и с неупорядоченной структурой. Установлено, что любая структурная форма слоя арахиновой кислоты на водной субфазе удерживает на своей поверхности молекулы нафталина.

Проводился расчет оптимальных условий для образования химических связей между молекулами нафталина методами квантовой химии и молекулярной динамики. В ходе теоретических исследований выявилось, что наиболее оптимальным является расположение, когда молекулы лежат в одной плоскости параллельно друг под другом и взаимодействуют длинными сторонами и расстояние между ними составляет от 1 до 1,85 Å. Изучено влияние природы катализаторов на дегидрирование молекул нафталина и процесс синтеза графена. Путем молекулярного моделирования были найдены наиболее оптимальные материалы для катализаторов – Ni и Pd, но если учитывать стоимость материала, то предпочтение может быть отдано Ni.

Проведено теоретическое моделирование синтеза монослоя графена из молекул пирена и пиренбутановой кислоты с помощью полуэмпирических расчетов. Изучено влияние катализаторов (Pt, Pd, Ni, AlCl3 и PdCl4) на конденсацию пирена и пиренбутановой кислоты. Согласно результатам расчетов наиболее эффективным катализатором для конденсации выбранных веществ является Pt, за которым следует Ni. Но учитывая стоимость материалов, предпочтение может быть отдано никелю.

**Профессор Горячева И.Ю.**

Основные проводимые работы посвящены применению люминесцентных наночастиц (полупроводниковые квантовые точки и наночастицы углерода) в качестве биометок в анализе. Рассмотрены свойства наночастиц, определяющие возможность их эффективного использования, методики синтеза, гидрофилизации и модификации, а так же варианты иммунохимических методов на основе люминесцентных наночастиц для определения различных типов аналитов.

Люминесцентные квантовые точки представляют собой наночастицы полупроводников нанометрового размера, для повыщения интенсивности люминесценции покрытые оболочкой более широкозонного полупроводника. Квантовые точки используются как новый класс люминесцентных меток для химического анализа (в первую очередь био- и иммунологического), молекулярной визуализации и биомедицинской диагностики. Небольшой размер, яркая люминесценция, фотостабильность и варьируемые спектральные характеристики испускания хорошо подходят для обнаружения одного или нескольких аналитов одновременно с высокой чувствительностью. Узкие симметричные люминесцентные пики квантовых точек делают возможным использование их в качестве меток для одновременного определения нескольких аналитов. Эта возможность особенно важно для анализа более чем одного аналита в одной тест-зоне. Малый размер позволяет объединить несколько квантовых точек в одну структуру.

Углеродные наночастицы представляют собой относительно новый класс люминесцентных меток. Интерес к ним продиктован простым зачастую одностадийным синтезом, широким спектром доступных источников углерода, отсутствием токсичных компонентов и наличием функциональных групп на поверхности. Основная сложность использования связана с тем, что их строение и свойства не до конца изучены. Кроме того, в ходе синтеза получается совокупность люминесцентных структур с существенно отличающимися свойствами.

Разработаны методики применения люминесцентных наночастиц в анализе, представлены перспективы для экспресс-тестов, а также для модификации классических методов.

**Доцент Бурмистрова Н.А.**

Спектрофотометрическим методом изучена реакция окисления трифениламин-4-сульфокислоты (ТФАСК) пероксидом водорода в присутствии пероксидазы хрена (ПХ) в слабокислых растворах. Установлено, что ТФАСК не окисляется пероксидом водорода в широком диапазоне кислотности среды. В то же время присутствие ПХ в слабокислых средах (1.0⋅10-3 - 5.0⋅10-5 М по H2SO4) приводит к появлению окрашенного продукта, свидетельствующего об окислении реагента в присутствии ПХ. Спектр поглощения окисленной формы ТФАСК характеризуется высокоинтенсивной полосой при 680 нм, интенсивность которой изменяется во времени. Увеличение концентрации пероксида водорода приводит к быстрой деградации окраски продукта окисления ТФАСК.

Изменение интенсивности оптической плотности во времени при длинах волн, соответствующих максимумам поглощения окисленных форм ТФАСК позволяет предположить совместное присутствие в растворе катион-радикала ТФАСК•+ и окисленного продукта его димеризации - дикатиона тетрафенилбензидина ТФБСК2+ в начальный момент времени. Уменьшение концентрации катион-радикалов ТФА•+, обусловленного его участием в процессах димеризации, приводит к смещению равновесия в сторону образования бесцветного катион-радикала тетрафенилбензидина ТФБСК•+.

Исследована устойчивость продукта ферментативного окисления ТФАСК при варьировании условий проведения реакции (концентрации исходных веществ, кислотности среды). Выбраны оптимальные условия и показана возможность определения ПХ в микропланшетах с сенсорными пленками с пределом обнаружения 0.3⋅10-4 ус. ед./мл.

Нестабильность сигнала процесса ферментативного окисления ТФАСК во времени снижает ценность использования системы для ее практического применения. В связи с этим нами изучена возможность стабилизации аналитического сигнала при введении в систему переходных металлов. Установлено, что интенсивность окраски продукта ферментативного окисления ТФАСК увеличивается (~41%) и стабилизируется в присутствии каталитически активных форм Ir(IV) и Rh(III), полученных термообработкой соответствующих хлорокомплексов с хлорной кислотой.

Стабильность продукта ферментативного окисления ТФАСК пероксидом водорода в присутствии каталитически активных форм иридия(IV) и родия(III) и наличие области линейной зависимости аналитического сигнала от концентрации ПХ предполагает возможность использования данных систем для аналитических целей.

**Доцент Маркин А.В.**

Разработана методика изготовления композита, состоящего из микрочастиц карбоната кальция сферической формы (диаметр ~3-5 мкм), в которые встроены наночастицы серебра (диаметр ~70 нм) и магнетита (диаметр ~50 нм). Конечный материал и входящие в него наночастицы изучены сканирующей электронной микроскопией. Определены оптимальные концентрации наночастиц серебра и магнетита, необходимые для получения наилучших результатов анализа. Для увеличения селективности сорбции к отрицательно заряженным аналитам предложено модифицирование поверхности композита полиэлектролитными молекулами. Для композита создана методика анализа растворов, которая включает в себя проведение твердофазной экстракции аналита, с последующим растворением карбоната кальция и проведением анализа методом гигантского комбинационного рассеяния (ГКР). Вся процедура анализа осуществляется в течение 10 мин. Разработанные композит и методика анализа протестированы в анализе антибиотика сульфадиметоксина и фотодинамического красителя «Фотосенс».

Получены ГКР-нанометки на основе наночастиц серебра, покрытых молекулами маркера (4-меркаптобензойная кислота) и оболочкой диоксида кремния. Образцы были исследованы методами сканирующей электронной микроскопии, УФ-видимой спектроскопии, динамического рассеяния света. Данные нанометки имеют подходящий размер для проведения анализа (110±10 нм), а покрытие из диоксида кремния надежно защищает от окружающей среды слой маркера, который обеспечивает воспроизводимый и интенсивный ГКР сигнал. ГКР-нанометки помещали внутрь фотонно-кристаллического волновода (ФКВ) с набором запрещенных зон. Исследование распределения сигналов в обкладках показало, что наиболее интенсивный сигнал сосредоточен в зазорах между капиллярами оболочек из-за высокого капиллярного эффекта в этих точках.

Осуществлен критический анализ литературы по проведению химического анализа методом спектроскопии комбинационного рассеяния (КР) света в ФКВ, поскольку применение фотонных кристаллов и ФКВ для целей химического анализа – новая, быстрорастущая область аналитической химии. Основное внимание уделено обсуждению аналитического потенциала, ограничений и аналитических характеристик (предел обнаружения, селективность и т. д.) для оценки дальнейшей применимости систем ФКВ с КР детектированием. Также описаны методы изготовления и структура этих систем, основные правила, которые позволяют получить более высокую интенсивность КР сигнала внутри ФКВ и влияние ГКР подложки (плазмонные наночастицы и наноструктурированные покрытия) на оптические свойства ФКВ и затухание сигнала.

Проведено исследование по оценке влияния различных протоколов жидкостно-жидкостной экстракции (ЖЖЭ), использующих различные экстрагирующие растворители, для пробоподготовки образцов крови и мочи перед ГКР анализом с использованием наночастиц серебра в качестве ГКР подложек. Сравнительный анализ протоколов ЖЖЭ показал, что использование ацетонитрила приводит к наихудшим результатам. При применение смеси гексан:дихлорметан:изопропиловый спирт (3: 3: 4) получены надежные результаты как для крови, так и для мочи и для обеих концентраций аналита (50 и 500 нг/мл). В целом можно сделать вывод, что комбинация ГКР и ЖЖЭ является полезной при химическом анализе таких сложных систем, как биожидкости, и обладает чувствительностью на уровне десятков нг/мл.

**Доценты Пичугина Г.А., Кузнецова И.В.**

Одной из тенденций реформирования системы образования является модернизация процесса подготовки педагога, профессиональный уровень которого соответствовал бы требованиям современной школы. Педагог сегодня должен обладать высокой научно-теоретической, методологической и психолого-педагогической подготовкой, владеть умением проектировать образовательную среду обучающихся на основе технологий деятельностного типа и изучать возможности, потребности, достижения обучающихся с целью обеспечения качества образования.

Изучая проблему высококачественной подготовки педагога к успешной самостоятельной профессиональной деятельности, считаем, что этот процесс станет более эффективным при условии, если профессиональное становление будущего учителя будет происходить как результат его внутреннего движения на основе рефлексии, самоанализа собственной педагогической деятельности и на основе развития внутренней мотивации к самосовершенствованию и приобретению педагогического опыта. Это, в свою очередь, влечёт за собой совершенствование процесса теоретической подготовки бакалавров, а именно внедрение технологий деятельностного типа, направленных на развитие личностных и профессиональных качеств будущего учителя.

Результаты педагогического исследования показали, что систематическое использование продуктивных методов обучения в организации учебного процесса по подготовке студентов способствует более высокому уровню сформированности профессиональных компетенций.

Свой уровень освоения современными педагогическими технологиями в организации учебного процесса студенты бакалавры демонстрируют в ходе педагогической практики, при выполнении дипломных и курсовых работ.

**Доцент Кожина Л.Ф.**

Проведен анализ результатов ЕГЭ по химии в 2017 году в г. Саратове

и Саратовской области, т.к. преподаватели, работающие со студентами 1 курса должны владеть информацией о базовой подготовке будущих студентов и использовать ее для модернизации учебного процесса.

Установлены и проанализированы причины трудностей адаптационного периода первокурсников, основными из которых являются:

- неготовность студента к учению, способности учиться самостоятельно, способности к самоконтролю и самооценке;

- отсутствие умения правильно осуществлять самостоятельную подготовку:

- отсутствие умения и навыков конспектирования лекций, анализа информации большого объема

- отсутствие умения четко и ясно излагать свои мысли.

Проведено обследование студентов для установления чувства времени и учебной нагрузки с использованием метода определения индивидуальной минуты (ИМ). ИМ отражает психофизиологическое состояние организма и ее величина пропорциональна степени эмоционального напряжения. У людей с пониженной адаптацией, в состоянии стресса ИМ имеет более низкие значения. Это объясняется тем, что длительность ИМ коррелирует с изменениями сомато-вегетативных показателей и поэтому может использоваться при оценке возможностей адаптации.

Изучена взаимосвязь процесса обучения и психологического состояния студентов. Состояние психического здоровья проявляется в том, насколько человек умеет управлять своим настроением, знает свои слабые и сильные стороны, свои физические и психические возможности. Разумное сочетание комплекса психолого-педагогических и химических дисциплин является основой высокого уровня подготовки бакалавров.

Зав. каф. Черкасов Д.Г. подвел итоги конференции, результаты которой приведены в таблице.

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Ф.И.О. | Статьи | | Тезисы | Патенты | Уч.-метод  пособ./  монографии | Общее  число  публ. | Участие  в конф. | Гранты | Рук-во асп./  защиты |
| ВАК | Сб.тр |
| Черкасов Д.Г | 3 | 2 | 3 | - | - | 8 | 2 | - | - |
| Ильин К.К. | 2 | 1 | 2 | - | 0/1 | 6 | 1 | - | - |
| Горячева И.Ю. | 13 | 7 |  | 3 | 1 | 23 | 2 | 3 | 7 |
| Бурмистрова Н.А. | 3 | - | 2 | 3 | 1 | 5 | 2 | 3 | 1 |
| Пожаров М.В. | 5 | 4 | 3 | - | 1 | 13 | 1 | - | - |
| Захарова Т.В. | 1 | 4 | - | - | 1 | 6 | 1 | - | - |
| Макушова Г.Н. | - | - | - | - | - | - | - | - | - |
| Маркин А.В. | 6 | 2 | - | - | - | 2 |  | - | - |
| Кожина Л.Ф. | - | 23 | - | - | 17 | 40 | 1 | - | - |
| Кузнецова И.В. | - | 1 | - | - | - | 1 | 1 | - | - |
| Пичугина Г.А. | 3 | 14 | 2 | - | - | 19 | 1 | - | - |
| Акмаева Т.А. | 1 | 4 | - | - | - | 5 | - | - | - |
| Смотров М.П. | 1 | 3 | - | - | - | 4 | 1 | - | - |
| Варламова Т.М. | 1 | 1 | - | - | - | 2 | - | - | - |