

Министерство образования и науки Российской Федерации

ФГБОУ ВПО «Ивановский государственный университет»

**МОЛОДАЯ НАУКА
В КЛАССИЧЕСКОМ УНИВЕРСИТЕТЕ**

*Тезисы докладов научных конференций фестиваля студентов,
аспирантов и молодых ученых*

Иваново, 22–26 апреля 2013 г.

Часть I

*Научная конференция
«АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ
СОВРЕМЕННОГО ЕСТЕСТВОЗНАНИЯ»*

*Научная конференция школьников
в рамках профильной школы
«ХИМИЯ ДЛЯ ЛЮБОЗНАТЕЛЬНЫХ»*

*VIII Научная конференция молодых ученых
«ЖИДКИЕ КРИСТАЛЛЫ И НАНОМАТЕРИАЛЫ»*

*Научная конференция
«ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ФИЗИКИ»*

*Научная конференция
«ПРОБЛЕМЫ СОВРЕМЕННОЙ МАТЕМАТИКИ»*

Иваново

Издательство «Ивановский государственный университет»

2013

ББК 20+22.1+24.5
М 754

Молодая наука в классическом университете : тезисы докладов научных конференций фестиваля студентов, аспирантов и молодых ученых, Иваново, 22–26 апреля 2013 г. : в 7 ч. – Иваново : Иван. гос. ун-т, 2013. – Ч. 1 : Научная конференция «Актуальные проблемы естествознания». Научная конференция школьников в рамках профильной школы «Химия для любознательных». VIII Научная конференция молодых ученых «Жидкие кристаллы и наноматериалы». Научная конференция «Фундаментальные вопросы физики». Научная конференция «Проблемы современной математики». – 136 с.

Представлены тезисы докладов участников научных конференций, проходивших в Ивановском государственном университете в рамках фестиваля студентов, аспирантов и молодых ученых «Молодая наука в классическом университете» по проблемам химии, биологии, физиологии, физики и математики.

Адресовано ученым, преподавателям, студентам и всем, кто интересуется данными проблемами.

Редакционная коллегия:

д-р ист. наук **Д. И. Польшвинный** (ответственный редактор),
д-р хим. наук **М. В. Клюев**, д-р хим. наук **Т. П. Кустова**,
д-р хим. наук **Н. И. Гиричева**, канд. биол. наук **В. Н. Мельников**,
д-р хим. наук **Н. В. Усольцева**, д-р физ.-мат. наук **Д. И. Молдаванский**,
д-р техн. наук **Е. В. Березина**, канд. физ.-мат. наук **С. В. Пухов**,
канд. физ.-мат. наук **Л. И. Минеев**, канд. физ.-мат. наук **Е. В. Соколов**

Издается в авторской редакции

ISBN 978-5-7807-1002-8

© ФГБОУ ВПО «Ивановский
государственный университет», 2013

Научная конференция
«АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ
СОВРЕМЕННОГО ЕСТЕСТВОЗНАНИЯ»
Секция
«БИОЛОГИЯ»

С. О. АХУТИНА

Ивановский государственный университет

ПРОЕКТ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ПАРАДНОЙ ЧАСТИ
УСАДЕБНОГО ПАРКА КУВАЕВЫХ

В XIX веке в России на территории загородных усадеб фабрикантов было принято разбивать парки и сады. Парки имели большую площадь, на которой органично сочетались и сменяли друг друга теневые участки сада и открытые пространства, сформированные равнинами и водоемами. Одним из таких объектов, сохранившихся до наших дней, является усадебный парк XIX века – дача ивановского фабриканта Х. И. Куваева. Цель работы – создание и частичная реализация проекта реконструкции парадной зоны усадебного парка.

Проект восстановления парадной зоны разработан в регулярном стиле, с учетом места расположения усадебного парка в лесном массиве, условий освещения и водного режима территории. При реконструкции мы сохранили, расположенные на данной территории экземпляры липы мелколистной (*Tilia cordata* Mill), лившиеницы сибирской (*Lárix sibirica* L), сосны сибирской (*Pinus sibirica* L), пихты сибирской (*Ábies sibirica* L). В течение летнего периода 2012 года была восстановлена округлая клумба, расположенная в центре главной липовой аллеи. В работе были использованы однолетние и двулетние травянистые растения, такие как бархатцы отклоненные (*Tagetes patula* L) сорт «Honey Moon», агератум мексиканский Хоустона (*Ageratum houstonianum* L), табак душистый (*Nicotiana suaveolens* L) сорт «Savatuga», а также многолетние ирисы сибирские (*Iris sibirica* L). Заложенные в проекте гравийная отсыпка и камни светлых тонов, хорошо сочетаются по цвету и структуре с нежными цветками табака и, в то же время, служат границей между цветником и аллеей. На прилегающей к клумбе территории были удалены сухие ветви и поросль, расчищены дорожки парка, сформирована живая изгородь из спиреи дубровколистной (*Spiraea chamaedifolia* L).

Реализация проекта реконструкции данной территории позволила усилить ее просветительское, исследовательское и

эстетическое значение. В будущем планируется дальнейшее восстановление территории усадебного парка.

Работа выполнена под руководством канд. пед. наук, доц. Л. Ю. Минеевой

Н. И. БЕЗСИННАЯ
Ивановский государственный университет

ОСОБЕННОСТИ ФЛОРЫ ПЕСЧАНЫХ КАРЬЕРОВ

В настоящее время возрастают площади, занятые антропогенно измененными экотопами, которые возникают в связи с добычей полезных ископаемых и прежде всего строительного песка. Поэтому актуальным остаются вопросы рекультивации карьеров и отвалов, формирующихся после их добычи.

В Ивановской области одно из крупных месторождений песка находится в Тейковском районе, в окрестностях с. Золотниковская Пустынь. Разрабатываемый участок расположен в 400-500 м от трассы Иваново-Москва. Он включает северную и южную части различные по строению. Северная часть имеет удлиненную форму с более пологим склоном. Южная часть имеет форму котлована с крутыми склонами высотой 5-6 м; ширина приблизительно 150-160 м, длина 120 м. Общая площадь составляет 25864 м².

Полевые исследования флоры карьера проводились в июне –июле 2012 г. Были составлены флористические списки, аннотированный конспект флоры, особое внимание обращалось на особенности экологии растений и зарастания склонов.

В результате исследований флоры песчаных карьеров было выявлено 114 видов, принадлежащих 3 отделам, 4 классам, 27 порядкам, 33 семействам, 80 родам. Были охарактеризованы особенности экотопологической структуры карьера. Наибольшим разнообразием видов отличаются сухое днище (45 видов) и заросший склон (41 вид). Во флоре временных водоемов, на открытом склоне старого отвала и открытый склон разрабатываемого участка карьера отмечено от 12 до 25 видов растений. Были выявлены пионерные группировки из заносных (*Oenothera rubricaulis*, *Lupinus polyphyllus*, *Vicia tetrasperma*) и местных (*Plantago major*, *Convolvulus arvensis*, *Alchemilla vulgaris* и др.) видов.

Исследования флоры данного песчаного карьера следует продолжить в следующем году. Это важно для выявления динамических тенденций.

Работа выполнена под руководством д-ра биол. наук, доц. Е. А. Борисовой.

А. Г. БЕСШАПОШНИКОВА
Ивановский государственный университет

ГЕМОЦИТАРНАЯ ФОРМУЛА ШМЕЛЕЙ

Гемоциты насекомых - это кровяные тельца, которые циркулируют в сосудистой системе или населяют гемоцель. Нередко гемоциты называют целомоцитами, так они формируются в целоме и выходят в гемоцель (Э. Купер).

Выделяются следующие типы гемоцитов: прогемоциты (лимфоциты), вакуолизированные плазмоциты, фагоциты и энотоиды с цитоплазматическими включениями и без них.

Прогемоциты - небольшие округлые клетки с ядром. Фагоциты - веретенновидные клетки с округлым или вытянутым ядром; при контакте с антигеном формируют ложноножки или уropодии. Плазмоциты - амeбoидные клетки с многочисленными уropодиями; внутри клеток находится ядро. У плазмоцитов вакуолизированная цитоплазма, которая может формировать грани. Энoцитoиды - клетки овальной, вытянутой формы, ядро которых имеет инвагинации и выступы.

Все эти клеточные элементы (кроме энoцитoидов) способны к фагоцитозу различных веществ. Особенно активно фагоцитируют плазмоциты. Некоторые авторы находят еще один тип гемоцитов - сфероциты. Сфероциты - относительно большие клетки с шарообразными включениями.

Исследовано 3 вида шмелей, изготовлено и проанализировано 34 мазка гемолимфы. В ходе исследования гемолимфы шмелей на начальных этапах развития яичников было установлено, что доминирующими гемоцитами являются фагоциты. Возможно, это связано с тем, что сформировавшиеся в куколке фагоциты перешли в гемоцель, так же не исключено проявление биогенетического закона, т.к. в процессе эволюции фагоцитирующие клетки появились раньше, чем остальные.

Данная работа осуществляется для определения гемоцитарной формулы шмелей.

*Работа выполнена под руководством канд. мед. наук, доц.
В. А. Курючкина.*

Л. В. БУЧУКУРИ

Ивановский государственный университет

ИССЛЕДОВАНИЕ МНЕМОТРОПНОЙ АКТИВНОСТИ И НЕЙРОПРОТЕКТОРНЫХ СВОЙСТВ НОВЫХ ФТОРПРОИЗВОДНЫХ ГАММА-КАРБОЛИНОВ

В настоящее время ведется интенсивный поиск новых веществ, обладающих ноотропной и нейропротекторной активностью. Одним из перспективных классов является класс гамма-карболинов.

Цель работы - исследование мнемотропной активности и нейропротекторных свойств новых фторпроизводных гамма-карболинов.

Исследование проводилось на мышах самцах линии C57B6 и крысах Wistar. Оценка влияния на долгосрочную контекстуальную память мышей проводили по тесту «Узнавание новой локализации известного объекта» (НЛИО). Нейропротекторное действие изучали на модели AF64A-индуцированной нейропатологии в тесте «Водный лабиринт Морриса» (ВЛМ).

Исследуемые соединения вводили внутривенно, за 40 минут до обучения в тесте НЛИО, в течение 18 дней после внутривенного билатерального введения AF64A в тесте ВЛМ.

Статистическая обработка полученных результатов производилась методами вариационного анализа с использованием t-критерия Стьюдента и непараметрическому U критерию Манна-Уитни.

Выявлено, что у групп мышей, которым вводили агент DF-302 в дозах 0,01 мг/кг, 0,1 мг/кг, 0,5 мг/кг и 2,5 мг/кг, увеличена продолжительность времени обследования объекта в новой локализации, что может указывать на когнитивно-стимулирующее действие DF-302 в данных дозах. У групп мышей, которым вводили соединение DF-312 в дозах 0,1 мг/кг и 0,5 мг/кг так же увеличивается предпочтение к обследованию объекта в новой локализации относительно известной. Эти данные свидетельствуют о стимуляции памяти у животных под действием исследуемых веществ.

Моделирование AF64A-индуцированной нейропатологии, в тесте ВЛМ выявлено, что наибольшую скорость обучения показали контрольные животные и группа крыс, которой вводили DF-302 в дозе 0,05 мг/кг. Меньшей протекцией пространственной памяти крыс обладает DF-302 в дозе 0,25 мг/кг. В группе крыс, которой вводили DF-312 в дозе 0,25 мг/кг равное время поиска платформы с группой

контроля, что говорит о восстановлении памяти под действием DF-312 в данной дозе.

Таким образом, из всех изученных соединений DF-302 и DF-312 обладают наиболее выраженным когнитивно-стимулирующим действием, а также проявляют нейропротекторные свойства.

Работа выполнена под руководством канд. биол. наук, научного сотрудника А. В. Болкунова, канд. биол. наук, доц. В. Н. Заринова.

А. А. ВЕЩИЦКИЙ

Ивановский государственный университет
Институт физиологии им. И. П. Павлова РАН

ИССЛЕДОВАНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ КОРРЕЛЯТОВ ЦИТОХРОМОКСИДАЗНЫХ БЛОБОВ ЗРИТЕЛЬНОЙ КОРЫ КОШКИ

Основополагающим принципом организации первичной зрительной коры высших млекопитающих является модульный характер строения и функционирования коры. Первичная зрительная кора кошки содержит несколько типов модулей: ориентационные и дирекциональные колонки, цитохромоксидазные (ЦО) блобы и др.

Цель работы – определить зависимость между уровнями онтогенетического развития ЦО блобов и ориентационных и дирекциональных колонок у кошки в норме и после ритмической световой стимуляции.

Исследование проводилось на 8 нормально пигментированных котят. Котята контрольной группы (n=2) были выращены в условиях обычного виварного окружения. Животных экспериментальной группы (n=6) с момента открытия глаз и до возраста 4-х месяцев ежедневно стимулировали мелькающим с частотой 15 Гц светом. ЦО блобы были выявлены с помощью гистохимического метода M.Wong-Riley (Wong-Riley, 1979) Ориентационные и дирекциональные колонки – с помощью методики оптического картирования по внутреннему сигналу (Иванов и др., 2006). Степень сегрегации ЦО блобов, а также ориентационных и дирекциональных колонок были определены с помощью формулы контраста по Майкельсону.

Исследование показало, что у контрольной группы котят наблюдается тенденция к положительной корреляции между степенью сегрегации ЦО блобов и ориентационных и дирекциональных колонок поля 18. У животных экспериментальной группы, наоборот,

наблюдается достоверная отрицательная корреляция между этими величинами. Вероятно, эти противоположные зависимости могут быть объяснены запуском компенсаторных процессов, вызванных модулирующим действием ритмической стимуляции в ответ на нарушение ориентационных и дирекциональных модулей.

Работа выполнена под руководством канд. биол. наук, доц. В. Н. Зарипова и канд. биол. наук, научного сотрудника лаборатории нейрофизиологии института физиологии им. И. П. Павлова РАН Н. С. Меркульевой.

Н. В. ГАВРИШЕВА

Ивановский государственный университет
Ивановский институт ГПС МЧС России

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ВЫЯВЛЕНИЯ РАННИХ МАРКЕРОВ ДЕЗАДАПТИВНЫХ ПОСЛЕСТРЕССОВЫХ СЕРДЕЧНО-СОСУДИСТЫХ ЗАБОЛЕВАНИЙ

Одним из вопросов контроля здоровья специалистов экстремального профиля является поиск и внедрение технологий ранней диагностики нарушения функции органов и систем. Поэтому исследования, направленные на изучение физиологических механизмов компенсации экстремальных нагрузок в динамике профессиональной деятельности, а также разработку технологии мониторинга состояния организма пожарного востребованы, актуальны и практически значимы.

В исследовании приняли участие 21 курсант ИВИ ГПС МЧС России противопожарного профиля в динамике специальной нагрузки, имитирующей экстремальную на пожаре. Для выявления ранних маркеров дезадаптивных послестрессовых сердечно-сосудистых заболеваний использовались методики, реализованные в аппаратно-программных комплексах ООО «Нейрософт» – реоэнцефалография (РЭГ) и математический анализ вариабельности ритма сердца (ВРС).

К анализу были приняты ранние маркеры профессиональной дезадаптации в виде повышения симпатoadреналовой составляющей обеспечения ритма сердца (увеличение показателя LF/HF). Определена средней силы обратной направленности коррелятивная связь между показателями LF/HF и ДИК (дикротический индекс). Получены предварительные данные, позволяющие определить профессионально значимые при адаптации в ответ на стресс проявления РЭГ в виде

снижения тонуса приносящего звена и незначительного венозного застоя. Установлен факт возможной взаимосвязи ранних дезадаптивных расстройств в виде увеличения адренергической составляющей вегетативного обеспечения и тенденцией к гипертензивным дисциркуляторным расстройствам. В целом, для курсантов характерна гипотензивная реакция сосудов на стресс. Это согласуется с высоким уровнем профессионально-значимых адаптационных возможностей организма и исходной парасимпатикотонией курсантов.

Работа выполнена под руководством д-ра мед. наук, проф. С. В. Королевой, канд. биол. наук, доц. Н. К. Кормилициной.

М. И. ГОЛУБЕВА

Ивановский государственный университет

ВЛИЯНИЕ РЕЗОНАНСНОЙ ВИБРАЦИИ НА ПРОЦЕССЫ РЕГЕНЕРАЦИИ ПОВРЕЖДЕННЫХ ТКАНЕЙ

Одной из актуальных проблем современной биологии и медицины является влияние вибрации на организм человека и животных. Вибрация оказывает на человека как отрицательное, так и положительное воздействие. К положительному эффекту можно отнести вибрацию, используемую в качестве лечебного фактора, например вибрационный массаж. Отрицательный эффект проявляется в виде патологических изменений в организме - вибрационной болезни.

В основе действия резонансной вибрации на организм лежит совпадение частот колебаний, воздействующих на тело, с частотой собственных колебаний животного организма, отдельных органов или их систем. Диапазон резонансных частот для клеток и тканей теплокровных животных варьирует в зависимости от состояния их структуры и находится в пределах от 25 до 200 Гц.

Эксперимент проводился на 10 самцах крыс. В опытах была использована вибрационная установка, созданная специалистами Ивановского государственного энергетического университета. Она включает в себя персональный компьютер, вибровод, создающий локальную вибрацию с заданной частотой, а также вибродатчик, позволяющий определить частоту резонансной вибрации выбранной части тела.

На данном этапе работы проведена оценка влияния резонансной вибрации на контрольную группу самцов крыс. При оценке влияния резонансной вибрации на организм используются данные, полученные при электромиографии и термометрии.

В работе был использован 4-канальный компьютерный электронейромиограф Нейро-ЭМГ фирмы ООО «Нейрософт».

Термометрия осуществлялась с использованием медноконстантановой термопары с последующей регистрацией на высокочувствительном вольтметре

Характер и выраженность рефлекторных реакций при действии механических вибраций на организм зависят от их локализации, интенсивности, продолжительности, частоты вибрации и исходного состояния организма.

Н. С. ГРУЗДЕВА

Ивановский государственный университет

ОСОБЕННОСТИ ЦЕРЕБРАЛЬНОГО КРОВОТОКА У СТУДЕНТОК С РАЗНЫМ ИНДЕКСОМ НАПРЯЖЕНИЯ

Высокая информатизация учебного процесса приводит к определенным функциональным изменениям в организме студентов, в том числе и в сосудистой системе головного мозга.

Целью работы является исследование особенностей кровотока головного мозга у студенток с разным индексом напряжения.

В исследовании приняли участие 27 студенток биолого-химического факультета Ивановского государственного университета. Обследования студенток проведено в дни обычных учебных занятий. В ходе работы применяли методику реоэнцефалографии. На основании результатов определения индекса напряжения (ИН) испытуемые были разделены на 3 группы: 1 группа – ИН=10-29 у.е., 2 группа – ИН=30-49 у.е., 3 группа – ИН=50-70 у.е. Достоверность изменений оценивали с использованием t-критерия Стьюдента.

В дни обычных учебных занятий у студенток 2 группы в левой лобной доле скорость медленного и быстрого кровенаполнения сосудов достоверно меньше, а показатель венозного оттока больше, чем у студенток 1 группы. В левой затылочной доле время быстрого кровенаполнения сосудов достоверно меньше, чем у студенток 1 группы. Результаты свидетельствует о более низких тонусе и интенсивности кровоснабжения артерий разного калибра в бассейнах внутренней сонной и позвоночной артерий левого полушария головного мозга.

У студенток 3 группы в лобных долях левого и правого полушарий

реографический индекс, скорость медленного и быстрого кровенаполнения сосудов достоверно меньше, а диастолический индекс в левой лобной доле достоверно больше, по сравнению со студентками 1 и 2 групп. Следовательно, снижен тонус артерий разного калибра в обоих полушариях, что сопровождается более интенсивным процессом оттока крови из артерий в вены и тонусом венозных сосудов, главным образом на уровне посткапилляров, в левом полушарии. В левой затылочной доле время распространения пульсовой волны и время быстрого кровенаполнения сосудов достоверно больше, чем у студенток 1 и 2 групп, что указывает на увеличение тонуса крупных артерий в бассейне позвоночной артерии.

Работа выполнена под руководством канд. биол. наук, доц. М. О. Бариновой.

Е. И. ДАНИЛОВА

Ивановский государственный университет
Институт физиологии им. Павлова РАН

ИММУНОГИСТОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭКСПРЕССИИ ПРОДУКТА РАННЕГО ГЕНА C-FOS КАК СПОСОБ ВЫЯВЛЕНИЯ КОЛОНОК ГЛАЗОДОМИНАНТНОСТИ В ЗРИТЕЛЬНОЙ КОРЕ КОШКИ

Характерной чертой зрительной коры млекопитающих отрядов хищные и приматы является наличие колонок глазодоминантности (КГ). Поскольку колонки ГД – пример структурно-функциональных единиц коры, исследование их пластичности проливает свет и на пластичность ЦНС в целом.

Одним из звеньев в цепи пластических перестроек являются ранние гены. Поэтому представляется важным комплексное исследование колонок ГД и сопряженной с этим экспрессии ранних генов, что и является целью данной работы.

Исследование проводилось на животных в возрасте 4 месяцев. Кошка – классический модельный объект для онтогенетических исследований зрительной системы.

Визуализацию колонок ГД зрительной коре кошки осуществляли посредством монокулярной активации ретинальных входов в кору и последующего иммуногистохимического выявления продукта гена c-fos. После транскардиальной перфузии на

замораживающем микротоме делали серию срезов первичной зрительной коры, толщина которых составляет 40 мкм.

С помощью компьютерной установки, оснащенной световым микроскопом и программным комплексом, получают оцифрованные изображения всех срезов. На каждом цифровом изображении среза были выделены «ядерные патчи» – т.е. группы ядер, маркирующие собой стимулированные колонки ГД. Исследованы «ядерные патчи» на горизонтальных и фронтальных срезах мозга, получены их количественные характеристики.

Как на фронтальных, так и на горизонтальных срезах мозга визуализируются группы ядер.

Таким образом, было выявлено, что расстояние между ядерными скоплениями и размерность самих скоплений на горизонтальных срезах соответствуют размерным характеристикам колонок ГД. Информация, полученная из фронтальных срезов о колончатости и послойном распределении активированных ядер, так же свидетельствует о том, что это колонки ГД.

А. Д. ДОМАНИНА

Ивановский государственный университет

Институт проблем химической физики РАН

ВЛИЯНИЕ ВОДОРАСТВОРИМЫХ АМИНОКИСЛОТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ФУЛЛЕРАНА C₆₀ НА ИНДУЦИРОВАНИЕ ПОЛ

Перекисное окисление липидов (ПОЛ) – окислительная деградация липидов, происходящая в основном под действием свободных радикалов. Развитие многих заболеваний, таких как, атеросклероз, стресс, астма, артроз, болезни печени и почек, гипертензия, нарушение памяти, сахарный диабет связано с повреждающим действием свободных радикалов. Радикалы ускоряют процессы старения, нарушают функционирование различных систем организма.

Целью работы было оценить влияние водорастворимых производных фуллерена C₆₀ на индуцирование ПОЛ в модельных системах окисления.

Влияние аминокислотных производных фуллерена C₆₀ на ПОЛ оценивали по изменению концентрации малонового диальдегида (МДА) – конечного продукта ПОЛ, в гомогенате головного мозга мышей. Изменение концентрации МДА в гомогенате регистрировали методом абсорбционной спектрофотометрии с использованием ТБК –

теста. В его основе лежит реакция 2-тиобарбитуровой кислоты с промежуточными продуктами ПОЛ, в результате чего формируется окрашенный триметиновый комплекс с максимум поглощения при 540 нм. Для оценки влияния водорастворимых аминокислотных производных фуллерена C₆₀ на интенсивность ПОЛ было взято 8 соединений. Каждая концентрация и контрольные пробы измерялись в трех параллелях.

Изучаемые гибридные соединения оказали различное воздействие на индуцирование ПОЛ. Наиболее выраженное антиоксидантное действие проявило соединение C₆₀-глицин. Соединения C₆₀-аспарагин, C₆₀-аминокапроновая кислота, C₆₀-аланин, C₆₀-аминобензойная кислота, C₆₀-пролин проявили тенденцию к снижению интенсивности ПОЛ, однако достоверных отличий от контроля выявлено не было. Соединение C₆₀-аминомасляная кислота наоборот проявило тенденцию к увеличению ПОЛ.

Таким образом, по результатам изучения восьми водорастворимых аминокислотных гибридных соединений с фуллереном C₆₀ было выявлено вещество C₆₀-глицин, которое эффективно снижает концентрацию МДА, что свидетельствует об антиоксидантной активности этого производного.

О. А. ЗУБКОВА

Ивановский государственный университет

ГНЕЗДОВАЯ ЭКОЛОГИЯ СЕРОЙ МУХОЛОВКИ И МУХОЛОВКИ-ПЕСТРУШКИ НА ТЕРРИТОРИИ СПОРТЛАГЕРЕЙ ПОБЕРЕЖЬЯ РУБСКОГО ОЗЕРА

Наши исследования проводились в летний период 2010-2012 гг. на территории спортлагерей в окрестностях Рубского озера. Целью работы являлось изучение некоторых особенностей гнездовой экологии мухоловки-пеструшки и серой мухоловки. В ходе исследований производилось хронометрирование суточной активности посещений гнезда взрослыми птицами, определялись основные кормовые методы, используемые мухоловками при ловле добычи (Резанов, 2000), а также анализировался спектр питания изучаемых видов на основе сделанных в ходе наблюдения фотографий. За время исследований было проведено наблюдение за 6 гнездами мухоловок (3 – серой мухоловки, 3 – пеструшки). В общей сложности проведено 108 часов наблюдений, зарегистрировано 1407 прилётов птиц к гнезду, 205 актов кормовой активности, сделано 1064 цифровых снимка и по ним

определено 643 объекта питания. В результате хронометрирования было установлено, что для серой мухоловки активность посещения гнезда постепенно возрастает в промежуток с 5 до 9 часов утра, достигая максимума между 9 и 12 часами. Активность посещения гнезда мухоловкой-пеструшкой имеет два пика – утром (с 7 до 11 часов) и вечером (с 15 до 19 часов), самка посещает гнездо чаще. В 2012г. мы наблюдали проявление высокой гнездовой валентности у мухоловки-пеструшки. В одной из пар самец и самка, кроме ухода за своими птенцами, занимались также выкармливанием и выносом фекальных капсул птенцов дрозда-рябинника. У гнезда другой пары пеструшек отмечено появление второго самца, изредка приносившего корм птенцам.

В качестве пищевых объектов серая мухоловка чаще использует представителей отряда двукрылых, чешуекрылых и гусениц. В рационе мухоловки-пеструшки преобладают гусеницы и личинки других насекомых. Наиболее частыми кормовыми методами для серой мухоловки являются «Взлет» (67%) и «Воздушное преследование» (30%), а для пеструшки метод «Поверхностного клевка» (60%).

По результатам проведенных исследований можно сделать вывод, что серая мухоловка и мухоловка-пеструшка имеют существенные различия в гнездовой экологии, благодаря которым они разделяют свои экологические ниши и снижают трофическую конкуренцию.

Л. Н. КАЛИКИНА

Ивановский государственный университет

Ивановский институт ГПС МЧС России

ОСОБЕННОСТИ ЦЕРЕБРАЛЬНОГО КРОВОТОКА У КУРСАНТОВ ПОД ВЛИЯНИЕМ УЧЕБНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ

В научной литературе приводятся данные о том, что длительно действующие психоэмоциональные и умственные нагрузки изменяют церебральную гемодинамику, вызывая стойкие изменения тонуса и реактивности мозговых сосудов. Причем, в исследованиях современных ученых выявлены выраженные сдвиги в регуляторных механизмах деятельности головного мозга студентов под влиянием умственной нагрузки. Однако отсутствуют работы, посвященные изучению влияния особенностей учебной деятельности на показатели реоэнцефалограммы курсантов МЧС России.

Целью настоящего исследования является изучение изменений показателей реоэнцефалограммы курсантов ИВИ ГПС МЧС России под влиянием учебной деятельности.

Исследования проводили на базе научно-исследовательской лаборатории «Медицина катастроф» ФБГОУ ВПО «Ивановский институт ГПС МЧС России». В исследование приняли участие 50 курсантов в возрасте 18-19 лет перед и после сдачи экзамена. Обследование курсантов выполнено с помощью аппаратно-программного комплекса «Рео-Спектр» (фирма «Нейрософт», Россия). В ходе работы использовали методику реоэнцефалографии. Достоверность изменений оценивали с использованием t-критерия Стьюдента.

После экзамена у курсантов в лобной области левого полушария повышается тонус артерий мелкого калибра, а в лобной области правого полушария – тонус артерий крупного калибра, что свидетельствует об улучшении церебрального кровотока и отвечает выполняемой организмом нагрузке.

После экзамена у курсантов в затылочной области левого полушария достоверных изменений кровотока головного мозга не выявлено. В затылочной области правого полушария происходит повышение тонуса средних и мелких артерий и улучшение венозного оттока.

Таким образом, приспособительные изменения церебрального кровотока в ответ на умственную нагрузку при сдаче экзамена определяются преимущественно гемодинамическими сдвигами в правом полушарии головного мозга.

Работа выполнена под руководством канд. биол. наук, доц. М. О. Бариновой.

О. В. КАСАРИНСКАЯ, Д. Е. ВИНОГРАДОВА
Ивановский государственный университет
Институт физиологически активных веществ РАН, г. Черноголовка

ДЕЙСТВИЕ ПРОИЗВОДНЫХ γ -КАРБОЛИНОВ НА ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МИТОХОНДРИЙ МОЗГА КРЫС

Известно, что митохондрии играют важную роль в процессах клеточного метаболизма, а также регулируют запуск каскада гибели клетки как по пути апоптоза, так и по пути некроза. Целый ряд

общепринятых методик определения токсичности веществ на клеточном уровне в основе имеет определение митохондриальной ферментативной активности. С другой стороны, широко обсуждается ключевая роль дисфункции митохондрий при старении и при различных дегенеративных заболеваниях, в том числе и при нейродегенерации. Таким образом, митохондрии могут быть как мишенью «полезного» для коррекции патологии действия веществ, так и тест-системой для определения их потенциальной токсичности.

В настоящей работе было исследовано действие двух аналогов известного нейропротекторного препарата димебона на такие характеристики митохондрий как митохондриальный мембранный потенциал и Ca^{2+} -вызванное «набухание» митохондрий.

Оба соединения практически не оказывали влияния на митохондриальный мембранный потенциал, как в присутствии субстратов первого комплекса дыхательной цепи митохондрий (глутамат и малат), так и в присутствии субстрата второго комплекса (сукцинат) при ингибировании первого комплекса ротеноном.

Оба соединения ингибировали Ca^{2+} -индуцированное «набухание» митохондрий. Было показано, что степень ингибирования «набухания» митохондрий изучаемыми соединениями сопоставима со степенью ингибирования димебоном.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что оба соединения обладают митопротекторной активностью.

*Работа выполнена под руководством канд. хим. наук
Е. Ф. Шевцовой, канд. биол. наук, доц. В. Н. Зарипова.*

Ю. С. КИСЕЛЁВА

Ивановский государственный университет

Институт эволюционной физиологии и биохимии им. И.М. Сеченова

РАН, г. Санкт-Петербург

ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫЙ БАЛАНС КРОВИ КРЫС ПРИ ХРОНИЧЕСКОМ ПОТРЕБЛЕНИИ АНТИОКСИДАНТА-КВЕРЦЕТИНА И РЕГУЛЯРНОЙ БЕГОВОЙ НАГРУЗКЕ

Кверцетин – биофлавоноид, являющийся химическим предшественником рутина-витамина Р. При определенных условиях он способен выступать в качестве прооксиданта. В связи с этим представляло интерес изучение влияния хронического потребления

кверцетина на окислительно-восстановительный баланс крови у крыс при беговой нагрузке.

В эксперимент были взяты самцы крыс линии Wistar массой 200-250 г. Рандомизированным способом крысы были поделены на три группы. 1 группа (I, n=6) получала кверцетин перорально в разведенном виде в молоке в дозе 20 мг/кг веса в течение 7 дней и подвергалась при этом беговой нагрузке (50% от максимальной для животных) в течение 10 минут, на 7-ой день животным предлагался истощающий бег. 2-й группе (II, n=5) предлагалось только молоко и те же нагрузки. 3-я группа (III, n=5) была интактным контролем. В цельной крови определяли концентрацию восстановленного глутатиона (ВГ), в эритроцитах – активность антиоксидантных ферментов (супероксиддисмутазы (СОД), глутатионпероксидазы (ГП), глутатионредуктазы (ГР), каталазы (Кат)).

Исследование установило, что регулярная физическая нагрузка (группа II) привела к снижению МДА за счет активации антиоксидантной системы благодаря тренировке: наблюдалось достоверное увеличение активности ГП ($p<0.05$) и тенденция к увеличению активности СОД и ГР с группой III. Регулярное потребление кверцетина (группа I) привело к достоверному увеличению концентрации МДА ($p<0.05$), снижению активности СОД ($p<0.05$), снижению активности ГП ($p<0.01$) по сравнению с II. Активность ГР возросла еще более и имела достоверное отличие с III ($p<0.05$). Концентрация ВГ в крови снизилась на 14% по сравнению с II и III ($p<0.05$). Таким образом, кверцетин проявил себя как прооксидант. За счет способности к самоокислению и дополнительному образованию АФК, он способствовал напряжению системы глутатиона и усилению окислительного стресса в крови.

А. С. ЛЮБИМОВА

Ивановский государственный университет
Институт физиологии им. И. П. Павлова РАН

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КРУПНЫХ КЛЕТОК В СЛОЕ 5 ПЕРВИЧНОЙ ЗРИТЕЛЬНОЙ КОРЫ КОШЕК В НОРМЕ И ПРИ НАРУШЕНИИ БИНОКУЛЯРНОГО ЗРЕНИЯ

Исследовали распределение клеток Мейнерта в первичной зрительной коре головного мозга кошек при нарушении бинокулярного зрения. Клетки этого типа характеризуются крупными клеточными телами, обладают мощным апикальным дендритом и

широко разветвленной системой базальных дендритов. Располагаются у кошек в слое 5. Они проецируются преимущественно в верхнее двуххолмие, обеспечивая там бинокулярные свойства нейронов, а также отдают коллатерали в супрагранулярные слои коры. Полагают, что они реагируют на движение, но не являются чувствительными к его направленности. В клинических и экспериментальных исследованиях показано, что нарушение бинокулярного зрения приводит к искажению восприятия движущихся объектов, структурная основа которого до конца не выяснена.

Работа проведена на 4 интактных кошках, 4 кошках с дивергентным косоглазием и 4 монокулярно депривированных кошках. Замороженные срезы первичной зрительной коры окрашивали на выявление субстанции Ниссля (крезил виолет, сафронин) и активности цитохромоксидазы. Измеряли расстояние между соседними клетками Мейнерта в полях 17 и 18.

Исследование показало, что нарушение бинокулярного зрения ведет к увеличению расстояния между соседними клетками Мейнерта в сравнении с нормой, т.е. уменьшению количества данных клеток в исследуемых полях. Это может объясняться уменьшением размеров или полной атрофией клеток Мейнерта, связанных с косящим или депривированным глазом.

Работа выполнена под руководством канд. биол. наук, доц. В. Н. Зарипова и канд. биол. наук, научного сотрудника лаборатории нейрофизиологии института физиологии им. И. П. Павлова РАН, П. Ю. Шкорбатовой

Е. В. МЕНЬШИКОВА

Ивановский государственный университет

ПРОЯВЛЕНИЕ УЧЕБНОГО СТРЕССА У СТУДЕНТОВ

Проблема диагностики учебного стресса является одной из актуальных научно-практических проблем. Стресс нередко рассматривают как особое функциональное состояние и в то же время как психофизиологическую реакцию организма на воздействие среды, выходящие за рамки адаптивной нормы (Селье, 1974). Каждый человек способен поддерживать оптимальный уровень стресса, но стрессовые воздействия не должны превышать приспособительные возможности человека, так как в этих случаях стресс может перейти в дистресс. Подобная неспособность справиться со стрессом может привести к

истощению, которое может принять форму нервного срыва. Предметом данного исследования является оценка проявления стресса, связанного с учебной деятельностью.

В исследовании приняли участие 36 человек (студенты биолого-химического факультета Ивановского государственного университета) в возрасте от 17 до 19 лет. Для оценки стрессогенности факторов учебного процесса была использована методика комплексной диагностики учебного стресса (Ю.В.Щербатых, 2000)

На основе полученных данных были установлены ведущие факторы, влияющие на величину учебного стресса. Так, наибольшей стрессогенностью характеризуются следующие факторы учебной деятельности: «большая учебная нагрузка» (6,4 балла; SD = 1,65), «строгость преподавателей» (5,0 балла; SD = 2,15) и «серьезное отношение к учёбе» (5,0 балла; SD = 2,60). Анализ психофизиологического и эмоционального состояния студентов показал, что наиболее выраженными симптомами учебного стресса являются: «спешка, постоянное ощущение нехватки времени» (6,5 балла; SD = 2,80), «низкая работоспособность и высокая утомляемость» (5,4 балла; SD = 2,80). В заключении следует отметить, что, оценивая динамику степени психоэмоционального напряжения за последние три месяца, 83% студентов отмечают увеличение уровня учебного стресса.

В ходе данной работы проведена оценка основных причин и симптомов проявления учебного стресса у студентов – будущих педагогов, характер профессионального функционирования которых обуславливает их особую чувствительность и подверженность стрессогенной среде.

О. А. МИХАЙЛОВА

Ивановский государственный университет

ИЗМЕНЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ВНИМАНИЯ ПЕРВОКЛАССНИКОВ ЗА ГОД ОБУЧЕНИЯ

В период адаптации к школьной жизни для повышения эффективности и качества учебного процесса важно оценить внимание каждого ученика (Заваденко, 2005). Целью работы явилось изучение изменения скорости переработки информации и концентрации внимания первоклассников в период адаптации к школьному обучению. Исследование проводили на базе лицея № 22 г. Иваново. Показатели внимания (скорость переработки информации и

концентрация внимания) в начале и конце учебного года оценивали с помощью теста Тулуз-Пьерона. Результаты были статистически обработаны.

В ходе работы выявили положительную годовую динамику показателей внимания у 88 % мальчиков и 98 % девочек. Из них благоприятную годовую динамику показателей внимания наблюдали у 60 % мальчиков и 53 % девочек. Для 21 % мальчиков характерно увеличение скорости переработки информации при сохранении концентрации внимания на среднем уровне; у 14,5 % девочек одновременно повысились и скорость переработки информации, и концентрация внимания. У 28 % мальчиков и 45 % девочек была зафиксирована удовлетворительная годовая динамика показателей внимания, из них у 17,5 % мальчиков и 22,5 % девочек за первый год обучения увеличилась скорость переработки информации, а концентрация внимания осталась на слабом уровне.

Неудовлетворительная годовая динамика обнаружена у 12 % мальчиков и 2 % девочек, проявляющаяся в снижении уровней показателей внимания к концу учебного года. У мальчиков достоверно чаще ($p < 0,05$) встречается неблагоприятная годовая динамика показателей внимания.

Выявлено статистически значимое ($p < 0,05$) увеличение скорости переработки информации первоклассников в период адаптации к школе. Таким образом, показатели внимания у большинства учащихся первых классов находятся на более высоком уровне в конце учебного года, что свидетельствует об адаптации их к школьному обучению.

Работа выполнена под руководством канд. биол. наук, доц. Н. К. Кормилицыной и педагога-психолога МОУ лицея № 22 Т. С. Львовой.

Д. А. МИШАГИНА

Ивановский государственный университет

ВИДЫ СЕМЕЙСТВА ОРХИДНЫЕ ВО ФЛОРЕ ПАМЯТНИКА ПРИРОДЫ «РУБСКОЕ ОЗЕРО»

Представители семейства характеризуются особенностями строения цветков и вегетативных органов, высокоспециализированной энтомофилией, симбиозом с грибами и наличием других черт.

В результате стационарных полевых исследований 2010 – 2012 гг. на территории памятника природы Рубское озеро и в его ближайших окрестностях было отмечено 8 видов семейства Орхидные, среди которых 1 вид включен в Красную книгу России (2008), 3 вида – в Красную книгу Ивановской области (2010). Это башмачок настоящий - *Cypripedium calceolus*, мякотница однолистная - *Malaxis monophyllos*, гнездовка настоящая - *Neottia nidus-avis*, дремлик широколистный – *Epipactis helleborine*, любка двулистная - *Platanthera bifolia*, пальчатокоренник Фукса - *Dactylorchisa fuchsii*, пальчатокоренник мясо-красный – *D. incarnata* и тайник круглолистный - *Listera ovata*.

Cypripedium calceolus обнаружен в 2012 г. на облесенных склонах отвалов старых песчаных обводненных карьеров. Найдены единичные экземпляры на открытых участках среди разреженного травостоя на песчаной почве вместе с обычными видами. Небольшие популяции *Malaxis monophyllos* найдены в 2010 г. *Neottia nidusavis* sporadически встречается в лесах с участием ели и широколиственных пород, отмечалась только 2010 году. В 2012 г. впервые обнаружен *Epipactis helleborine*. Редко встречающимся видом в окрестностях озера является *Platanthera bifolia*. Часто встречается *Dactylorchisa fuchsii*. Значительно реже встречается другой вид пальчатокоренника *Dactylorhiza incarnata*, приуроченный к болотистым лугам. *Listera ovata*, отмечен в 3 местообитаниях. Так же были обнаружены гибриды рода *Dactylorhiza*, которые требуют специальных консультаций монографов.

Современная флора орхидных памятника природы «Рубское озеро» включает 8 видов, относящихся к 6 родам, что составляет 28% от их видового разнообразия на территории Ивановской области видов растений. В дальнейшем следует организовать мониторинг состояния известных популяций орхидных.

Работа выполнена под руководством д-ра биол. наук, доц. Е. А. Борисовой.

А. А. МОИСЕЕВА
Ивановский государственный университет
Институт эволюционной физиологии и биохимии им. Сеченова,
г. Санкт-Петербург

МЕТОДЫ ОЦЕНКИ ОКСИДАТИВНОГО СТРЕССА

Окислительный стресс это процесс, который сопровождается усиленным образованием активных форм кислорода в клетке. Причиной возникновения окислительного стресса является действие внешних прооксидантов и активация эндогенных механизмов генерации активированных кислородных метаболитов, что может вызвать сбой механизмов антиоксидантной защиты организма.

Все формы жизни сохраняют восстанавливающую среду внутри своих клеток. Клеточный «редокс-статус» поддерживается специализированными ферментами в результате постоянного притока энергии. Нарушение этого статуса вызывает повышенный уровень токсичных реактивных форм кислорода, таких как пероксиды и свободные радикалы.

Целью данной работы являлось оценить влияние внешних факторов на степень развития окислительного стресса в эритроцитах крыс.

Исследование проводилось на 3 группах крыс: контрольная (10 крыс) и 2 опытные (по 10 крыс в каждой группе). Первой опытной группе давали кверцетин в дозе 20 мг на 1 кг живого веса в течение 7 дней. Второй группе также давали кверцетин в той же дозе, но также крысы подвергались физической нагрузке каждый день в течение 1 часа (бег).

Состояние окислительно-восстановительной системы крови оценивали путем измерения продуктов окислительного стресса и активности антиоксидантных ферментов в эритроцитах и плазме крови.

Исследование показало, что в первой опытной группе уровень продуктов окислительного стресса ниже, чем во второй в 1.8 раза.

Таким образом, внешнее стрессорное воздействие приводит к росту уровня свободных радикалов в крови, что в свою очередь, ведет к окислительному стрессу, являющимся одним из основных механизмов повреждения живых тканей.

Работа выполнена под научным руководством канд. биол. наук, доц. В. Н. Зарипова, д-ра биол. наук В. И. Морозова (С-Петербург).

С. С. МОКЕЕВА

Ивановский государственный университет

ФОРМИРОВАНИЕ КОЛЛЕКЦИИ МНОГОЛЕТНИХ ДЕКОРАТИВНО-ЛИСТВЕННЫХ РАСТЕНИЙ В БОТАНИЧЕСКОМ САДУ ИВГУ

При озеленении тех или иных объектов, кроме красивоцветущих, часто используют также растения, отличающиеся декоративностью куста, окраской, формой, величиной листьев и т. д., т.е. декоративно-лиственные.

В качестве примера использования декоративно-лиственных растений в озеленении можно привести экспозицию ботанического сада Ивановского государственного университета, созданную в 2012 году. В ее состав вошли такие виды и сорта, как хоста белоокаймленная, хоста желтоокаймленная, хоста Зибольда, хоста ланцетолистная, хоста малая, хоста подорожниковая, хоста гибридная сорт 'Голден тиара', гейхера кравово-красная, гейхера американская сорт 'Шоколад', гейхера мелкоцветковая сорт 'Пурпурный дворец', произрастающие на момент создания коллекции в разных частях ботанического сада. Идея проекта заключалась в перепланировке части ботанического сада ИвГУ. Для обеспечения наилучшего обзора всей коллекции декоративно-лиственных растений, а также для лучшего доступа к ним был выбран регулярный стиль, экстравертная экспозиция, открытая со всех сторон. На данной территории использовалось характерное для регулярного стиля симметричное лучевое и кольцевое расположение элементов. В каждом луче было высажено по одному экземпляру растений родов хоста и гейхера, дополненному почвопокровными декоративно-лиственными растениями, например, тиареллой сердцелистной. На участке, отведенном под создание коллекции, кроме уже имеющихся дорожек из бетонных плит была создана сеть тропинок, соединяющих между собой посадки декоративно-лиственных растений.

В дальнейшем планируется продолжение работы с коллекцией многолетних декоративно-лиственных растений, а также ее пополнение.

Работа выполнена под руководством канд. пед. наук, доц. Л. Ю. Минеевой и ст. преподавателя И. Н. Борисовой.

Т. В. НИКИТИНА

Ивановский государственный университет

Институт проблем химической физики РАН, г. Черноголовка

**ВЛИЯНИЕ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ПРОИЗВОДНЫХ
ФУЛЛЕРЕНОВ C₆₀ НА КАТАЛИТИЧЕСКУЮ
АКТИВНОСТЬ МЕМБРАНОСВЯЗАННЫХ ФЕРМЕНТОВ
МОНОАМИНООКСИДАЗЫ-А И МОНОАМИНООКСИДАЗЫ-В**

Многочисленные исследования по тематике, связанной с фуллеренами и их воздействию на биологические структуры, указывают на перспективность создания на основе фуллеренов нового класса биосовместимых соединений, благодаря их уникальной пространственной структуре и физико-химическим свойствам. Производные фуллерена могут применяться в самых различных областях науки и техники.

Моноаминоксидаза - фермент, открытый в 1928 г., до сих пор находящийся в центре неослабевающего внимания благодаря его важнейшему значению в функционировании центральной нервной системы. Различают MAO типа А, субстратами которой являются серотонин и норадреналин, а ингибитором – хлоргиллин, и MAO типа В, субстратами которой являются β-фенилэтиламин (бензиламин) и метилгистамин, а ингибитором – депринил.

Именно вышеизложенные аспекты биохимической физики явились мотивацией к изучению водорастворимых производных фуллерена C₆₀ (ВПФ) и их влиянию на каталитическую активность важнейших мембраносвязанных ферментов – MAO-А и MAO-В.

Нами были исследованы ВПФ, отличающиеся высокой растворимостью 10⁻² М и имеющие семь адендов с заряженными (карбоксылными и аминными) группами. Все ВПФ влияют на каталитическую активность MAO-А и MAO-В, при чем их концентрация играет значительную роль для ферментов.

Из исследуемых соединений можно выделить наиболее эффективный активатор как для MAO-А так и MAO-В, им стал KB-371. Все остальные исследуемые ВППФ оказывают ингибирующее влияние на MAO-А и MAO-В. Ингибирование MAO-А увеличивает уровень серотонина в мозге, а также ингибирование MAO-А или MAO-В влияет на содержание метаболитов дофамина. Дофамин-сберегающий эффект в результате действия ингибиторов MAO (особенно MAO-В) делает ингибиторы MAO-В важными лекарственными средствами в лечении болезни Паркинсона

Д. А. ПОЛЕТАЕВА, И. И. ФАЙНГОЛЬД, А. Б. КОРНЕВ,
Е. А. ХАКИНА

Институт проблем химической физики РАН

ВЛИЯНИЕ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ПОЛИЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ФУЛЛЕРЕНОВ НА КАТАЛИТИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ ЦИТОХРОМ *c*-ОКСИДАЗЫ

В настоящей работе исследовалась способность водорастворимых полизамещенных производных фуллеренов (ППФ) катионной и анионной природы влиять на каталитическую активность цитохром *c*-оксидазы. Для оценки влияния электростатических зарядов белковой глобулы цитохрома *c* на эффективность реакции с другими заряженными молекулами в растворе исследовался эффект тушения триплетных состояний эозина *Y* гемом цитохрома при различных значениях ионной силы раствора. Было показано, что несмотря на то, что полный заряд цитохрома *c* в этих условиях +8, лишь две лизиновые группы эффективно влияют на процесс столкновения эозина *Y* с участком поверхности цитохрома *c*, на котором находится выступающий край гема, принимающий участие в каталитическом акте. Такой подход позволяет показать важную роль как локальных зарядов цитохрома *c*, так и зарядов в активных центрах других белков – партнеров цитохрома *c* в реакциях переноса электрона. При нейтральных рН цитохром *c* несет на себе положительные заряды, в силу этого ППФ катионной природы могут взаимодействовать непосредственно с данным активным центром цитохром *c*-оксидазы, а ППФ анионной природы могут взаимодействовать с цитохромом *c*. Все типы взаимодействия будут приводить к ингибированию функции цитохром *c*-оксидазы, что может вызывать нарушение процесса синтеза АТФ в митохондриях. Было показано, что ППФ анионной природы ингибируют каталитическую активность цитохром *c*-оксидазы митохондрий головного мозга крыс в среднем на 40%. В присутствии катионных ППФ наблюдается 100% ингибирование. Таким образом, ППФ, имеющие заряды на аддендах, взаимодействуя с положительными зарядами цитохрома *c* и отрицательными зарядами активного центра фермента, вызывают ингибирование каталитической активности цитохром *c*-оксидазы в реакции окисления цитохрома *c*.

*Работа выполнена под руководством д-ра физ.-мат. наук
А. И. Котельникова и канд. физ.-мат. наук Р. А. Котельниковой.*

Е. А. ПОПОВА, А. В. ХИЖКО
Ивановский государственный университет,
Ивановский институт ГПС МЧС России

ВЫЯВЛЕНИЕ ДОНОЗОЛОГИЧЕСКИХ МАРКЕРОВ ДЕЗАДАПТИВНЫХ РАССТРОЙСТВ У СПЕЦИАЛИСТОВ ЭКСТРЕМАЛЬНОГО ПРОФИЛЯ

Профессии пожарного и спасателя традиционно и по праву относят к наиболее «опасным» для здоровья и жизни. Экстремальные факторы являются неустраняемыми элементами профессиональной среды.

Целью работы является выявление донозологических маркеров дезадаптивных расстройств у курсантов пожарного института.

В настоящее время представляет интерес исследование патогенетических механизмов возникновения и прогрессирования стресс-зависимых нарушений у специалистов экстремального профиля, что позволит совершенствовать систему медицинской реабилитации.

Клиническим подтверждением/опровержением данной задачи может стать изучение заболевания, при котором холинергическая иннервация является «курковым» и поддерживающим развитие механизмом. Известно, что данное сочетание присуще такой форме дерматозов, как мелкоочечный кератолиз. Выявлено, что данное заболевание является основной причиной обращения за дерматологической помощью курсантов первого года обучения. Вероятно, это связано не только с определенными гигиеническими трудностями, но и с периодом адаптации.

Исследование проведено на базе ФБГОУ ВПО «Ивановский институт ГПС МЧС России» в научно-исследовательской лаборатории «Медицина катастроф». Были обследованы 90 курсантов в возрасте 18-22 лет в дни обычных учебных занятий. Работа выполнена с использованием стандартного оборудования и аппаратно-программного обеспечения ООО «Нейрософт» («ВНС-Микро» для исследования вариабельности ритма сердца, «Рео-Спектр» для изучения состояния регионального кровотока).

Комплекс полученных показателей (TP, LF, HF, LF/HF и Fms фон ПВО, Fmd АЧП и ДИК) позволит выявить маркеры дезадаптивных расстройств и получить прогностические критерии для целенаправленной профилактики кератолиза у специалистов экстремального профиля.

*Работа выполнена под руководством д-ра мед. наук, проф.
С. В. Королевой, канд. биол. наук, доц. М. О. Бариновой, канд. биол. наук,
доц. Н. К. Кормилицыной.*

Ю. Н. РАЗОРВИНА

Ивановский государственный университет

ВВЕДЕНИЕ ЦВЕТОЧНЫХ И ДРУГИХ КУЛЬТУР В КОМПОЗИЦИЮ РОЗАРИЯ БОТАНИЧЕСКОГО САДА

Ботанический сад ИвГУ особо охраняемый природный объект, является структурным подразделением кафедры ботаники и зоологии биолого-химического факультета.

Сад расположен на северо-восточной окраине г. Иваново на правом возвышенном берегу р. Талки. Площадь сада составляет 4,32 га.

Месторасположение розария в ботаническом саду Ивановского государственного университета – парадная зона – соответствует климатическим и другим требованиям. Розарий заложен в 2011 году в ходе выполнения дипломной работы Е.Тихоновой. На 01.11.12 г. насчитывает 28 сортов парковых, чайно-гибридных, флорибунда, миниатюрных, почвопокровных и плетистых роз. Площадь экспозиции розария составляет 183,6 м². Основной задачей розария является показ лучших сортов, прошедших первичное интродукционное испытание и рекомендуемых для массового выращивания в данных природно-климатических условиях. Одновременно с этим важной задачей является подбор и изучение сочетания роз с «сопутствующими» цветочными и другими культурами.

В период 2011-12 гг. в розарии высажено 10 сортов тюльпанов, 2 сорта виолы Виттрока, 7 сортов лилий, ель колючая, ель коника, спирея берёзолистная, самшит вечнозелёный. Из однолетних цветочно-декоративных растений были выбраны и высажены низкорослые компактные сорта агератум мексиканский с. "Атлантик", вербена гибридная, тагетес отклонённый, с. "Лимонная капля", цинерария маритима. Декоративные контейнеры были оформлены петуния гибридная бело-розово-красной окрасок. В результате проведенной работы розарий был декоративным с ранней весны до поздней осени.

На 2013 год запланировано создать два новых миксбордера, рабочие чертежи, эскизы и макет составлены. А также подобрать дополнительный ассортимент растений, сочетающихся с розами.

С. С. РУСОВА ¹, А. А. БАЛАКИНА ², В. А. МУМЯТОВА ²

¹Ивановский государственный университет

²Институт проблем химической физики РАН, г. Черноголовка

ВЛИЯНИЕ КОМПЛЕКСОВ ПЛАТИНЫ НА ЭКСПРЕССИЮ ГЕНОВ В КЛЕТКАХ ЛИНИИ HELA

Изучение экспрессии генов, кодирующих про- и антиапоптозные белки, а также белки клеточного цикла, позволяет выявить механизмы функционирования генома опухолевых клеток при действии генотоксических соединений. Особое значение для создания новых противоопухолевых препаратов также имеет исследование ответа антиоксидантной системы опухолевых клеток на различные стрессовые факторы на уровне экспрессии генов, белков и активности ферментов, поскольку активные формы кислорода играют важную роль в различных сигнальных путях апоптоза клеток млекопитающих.

Целью настоящей работы было изучение экспрессии генов-мишеней белка p53, а также генов *sod1* и *cat* в опухолевых клетках в норме и при действии цисплатина, сатраплатина (JM216) и аминитроксильных комплексов платины(IV).

После 12 ч инкубации в присутствии всех изученных комплексов наблюдали существенное увеличение экспрессии гена каталазы, что, по-видимому, вызвано накоплением пероксида водорода в клетках. Цисплатин и JM216 при 6 ч экспозиции не оказывали влияния на экспрессию генов-мишеней p53, а комплексы BC-118 и BC-131 существенно снижали ее. После 12 ч инкубации было отмечено увеличение экспрессии гена *p21* при действии всех исследуемых соединений, в то время как увеличение экспрессии *14-3-3* наблюдали только в случае JM216 и BC-131. Важно, что комплексы платины(IV) BC-118 и BC-131, имеющие в своем составе нитроксильный радикал, индуцировали значительное снижение экспрессии всех изученных генов после 6 ч инкубации. При этом комплекс аналогичной структуры JM216 не оказывал влияния на уровень экспрессии генов, что позволяет предположить, что введение в состав комплексов платины(IV) нитроксильного радикала существенно изменяет механизм их влияния на опухолевые клетки.

Работа выполнена под руководством канд. биол. наук, зав. лабораторией А. А. Терентьева, канд. биол. наук, доц. В. Н. Зарипова.

А. Ю. РЫБКИН, Н. С. ГОРЯЧЕВ, А. Ю. БЕЛИК, И. И. ФАЙНГОЛЬД,
Г. В. КОСТЮК, А. А. ТЕРЕНТЬЕВ, А. Б. КОРНЕВ, П. А. ТРОШИН,
А. И. КОТЕЛЬНИКОВ

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

ДИАДЫ ФУЛЛЕРЕН-КРАСИТЕЛЬ КАК ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРЫ ДЛЯ МЕДИЦИНЫ

Фотодинамическая терапия представляет собой новый активно развивающийся неинвазивный метод лечения онкологических заболеваний. Производные фуллера представляют интерес для применения в данной терапии, так как способны при возбуждении светом генерировать активные частицы, которые способны привести к повреждению ДНК, белков, мембран опухолевых клеток.

В данной работе были исследованы ковалентные диалы на основе полизамещенных производных фуллера (ППФ) и красителей: ППФ-флуоресцеин, ППФ-рубоксил, а также комплексы ППФ+эозин, ППФ+Фотосенс. Фотодинамическая активность диал оценивалась по генерации супероксид анион-радикала в присутствии NADH и NBT.

Методами абсорбционной спектроскопии, флуориметрии и кинетической флуоресцентной спектроскопии показано, что в структуре исследуемых диал происходит эффективная дезактивация синглетных возбужденных состояний красителя за счет переноса возбуждения или электрона на фуллерен. Это является причиной значительного увеличения фотодинамической активности ППФ и красителя в структуре диал при возбуждении такой диал в полосе поглощения красителя.

Способность диал вызывать повреждение ДНК исследовали на плазмидной ДНК рЕТ, выделенной из *Escherichia coli*. Было обнаружено, что исследуемые диал ППФ-краситель вызывают разрыв цепочки ДНК при облучении светом в полосе поглощения красителя и в присутствии NADH.

Наблюдаемый эффект увеличения фотодинамической активности и способность вызывать повреждение ДНК показывает перспективность создания подобных гибридных диал на основе фуллеренов и красителей как новых эффективных фотосенсибилизаторов для применения в медицине.

Исследования поддержаны грантами РФФИ (№ 10-03-00687; № 12-04-31678 мол_а) и Программой Президиума РАН №24.

К. Д. СИВОКОНЬ
Ивановский государственный университет.

ПРОЕКТ ОЗЕЛЕНЕНИЯ МАЛОГО САДА

Окружающий ландшафт может оказывать различное воздействие на состояние здоровья человека, как физическое, так и психологическое. Тяга к природным ландшафтам особенно сильна у жителей города. Учитывая способность зеленых насаждений благоприятно влиять на состояние окружающей среды, их необходимо максимально приближать к месту жизни, работы, учебы и отдыха людей. Именно по-этому важно иметь на своем участке то место, где Вы будете отдыхать от городской суеты.

Проект озеленения малого сада выполнен в пейзажном стиле, с учетом места расположения участка, условиями освещения и водного режима территории. В ходе работ были сохранены посадки лилий, пионы и гладиолусы. В течение летнего периода 2012 года на озеленяемом участке была разбита альпийская горка, рабатка, были установлены два вазона. Так же был разбит садовый пруд. Для озеленения были использованы однолетние и двулетние травянистые растения: Алиссум пиренейский (*Alyssum pyrenaicum* Lapeyr.), Мята перечная (*Mentha piperita*), Молочай миртолистный (*Euphorbia myrsinites* L.), Бархатцы отклоненные (*Tages patula* L.), Бархатцы прямостоячие (*Tages erecta* L.), Сальвия (*Salvia divinorum*), Цинерария морская (*Cineraria maritima* L.), Петуния многоцветковая (*Petunia multiflora*), Хоста гибридная (*Hosta hybridum*), Агератум Хоустона (*Ageratum houstonianum* Mill.), Гвоздика перистая (*Dianthus plumaris*). Так же вокруг водоема и вдоль рабатки были сделаны тропинки из деревянных спилов и гравийной отсыпки. Благодаря таким тропинкам хозяевам участка будет удобно гулять по малому саду, осуществлять уход и полив растений. Также для декорирования стены гаража и забора была использована Фасоль декоративная (*Phaseolus coccineus*), Колючеплодник лопастный (*Echinocystis lobata*). Обильная зелень и красивые мелкие цветки прекрасно закрывают стены гаража.

При озеленении участка были учтены пожелания клиента, таким образом, озеленяемый участок стал уголком для отдыха после трудового дня. В дальнейшем планируется установить около водоема небольшую скамью, так же возможно зарыбить водоем.

Работа выполнена под руководством канд. пед. наук, доц. Л. Ю. Минеевой, ст. преподавателя И. Н. Борисовой.

А. Н. СИВУХИН

Ивановский государственный университет

КОМПЛЕКСНАЯ ОЦЕНКА СОСТОЯНИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ БЛИЗ РЕКИ УВОДЬ В г. ИВАНОВЕ

Комплексная оценка экологической обстановки в районе исследования не проводилась очень долгое время, несмотря на высокий уровень антропогенной нагрузки на естественные биоценозы. На территории района исследования работают несколько предприятий, и появилось несколько крупных свалок бытовых отходов, которые представляют опасность для всего района. Для определения процентного содержания химических элементов в почве был использован атомно-абсорбционный спектрометр «Спектр-5-3». Для определения загрязнённости участка р. Уводь в районе исследования была использована методика гидробиологического анализа сапробности. Для оценки общей степени загрязнённости среды использовалось определение флуктуирующей асимметрии листьев берёзы повислой. Нами собраны данные по экологической ситуации в городе за последние несколько лет. Целью исследования является определение уровня загрязнённости окружающей среды близ реки Уводь на территории г. Иваново. Комплексная оценка может помочь установить направление, в котором следует двигаться для избегания негативных последствий антропологического воздействия на среду и жителей города. В настоящее время в г. Иваново наблюдается превышение ПДК содержания свинца в почве в 2-3 раза. За последние годы уровень загрязнённости в г. Иваново медленно повышается, что, возможно, связано с увеличением числа автомобилей. Среднее значение сапробности в реке оказалось равным 2,6, что не превышает норму. Среднее значение флуктуирующей асимметрии листьев берёзы повислой по городу составило 0,04, что говорит о достаточно чистой среде, но зафиксировано несколько мест на востоке города, где состояние среды оценивается как загрязнённое. Это, прежде всего, мосты с повышенной транспортной нагрузкой (Театральный – 4104 автомобиля в час, Соковский – 6144 автомобиля в час). Таким образом, можно предположить, что основным источником загрязнения является автомобильный транспорт. Загрязнение складывается из выхлопных газов и отслоения краски с большим содержанием свинца с днищ автомобилей.

Работа выполнена под научным руководством д-ра биол. наук, проф. В. А. Исаева.

К. И. СИТНИКОВА

Ивановский государственный университет

ВЛИЯНИЕ УМСТВЕННЫХ НАГРУЗОК РАЗНОЙ ИНТЕНСИВНОСТИ НА ФУНКЦИОНАЛЬНОЕ СОСТОЯНИЕ СТУДЕНТОК С РАЗНЫМ ТИПОМ ТЕМПЕРАМЕНТА

Изучение влияния умственной нагрузки на функциональное состояние организма студентов является актуальной проблемой в психофизиологии.

Целью настоящей работы является исследование влияния умственных нагрузок разной интенсивности на функциональное состояние студенток с разным типом темперамента.

В исследовании приняли участие 32 студентки биолого-химического факультета Ивановского государственного университета. Исследования студенток проведены в дни обычных учебных занятий, при использовании слабой и сильной умственных нагрузок. В качестве умственных нагрузок использованы компьютерные версии общепринятых в психологии тестов на IQ: слабая умственная нагрузка – тест на IQ для детей; сильная умственная нагрузка – тест на IQ для взрослых. В ходе работы применяли методики электроэнцефалографии (ЭЭГ) и вариабельности ритма сердца (BPC). На основании результатов тестирования по методике Г. Айзенка испытуемые были разделены на 3 группы в зависимости от преобладающего типа темперамента: холерики (44%), меланхолики (31%), сангвиники (25%). Достоверность изменений оценивали с использованием t-критерия Стьюдента.

В результате исследования установлено, что показатели ЭЭГ (амплитуда, частота, индекс) изменяются у студенток сангвиников под влиянием сильной умственной нагрузки в лобной области левого полушария головного мозга, что свидетельствует об интенсивной мыслительной деятельности. У студенток меланхоликов и холериков не обнаружено достоверных изменений активности ритмов ЭЭГ.

Анализ показателей BPC позволил выявить, что при слабой умственной нагрузке в положении лежа у студенток сангвиников происходит смещение вегетативного статуса в сторону преобладания парасимпатической регуляции. При сильной умственной нагрузке в положении стоя у студенток сангвиников изменения вегетативного статуса связаны с возрастанием симпатических влияний, а у студенток меланхоликов – с усилением гуморальной регуляции.

Работа выполнена под руководством канд. биол. наук, доц. М. О. Бариновой.

Я. А. СЛАЩИНИНА

Ивановский государственный университет

ДНЕВНЫЕ ХИЩНЫЕ ПТИЦЫ КЛЯЗЬМИНСКОГО РЕСПУБЛИКАНСКОГО БОБРОВО-ВЫХУХОЛЕВОГО ЗАКАЗНИКА

Мониторинг дневных хищных птиц в Клязьминском республиканском боброво-выхухолевом заказнике ведется с 1995 года. Нами были проведены количественные учеты соколообразных на постоянной площадке площадью 137,8 км² в июле 2007 - 2012 гг. За период наблюдения в Клязьминском заказнике обнаружено 17 видов дневных хищных птиц. Доминантом в населении хищных птиц является черный коршун, содоминантом – канюк обыкновенный. Гнездовые территории этих видов располагаются как в плакорной части, так и в пойменной. Впервые для территории исследований подтверждено гнездование скопы и дербника. Впервые в 2007г., на исследуемой территории отмечен слеток скопы, что является подтверждением гнездования данного вида в заказнике. Значительно увеличилась численность ястреба-перепелятника и ястреба-тетеревятника. Данные виды проявляют территориальную приуроченность к зарастающим вырубкам и просекам. Численность осоеда за шестилетний период нестабильна. Луни отмечаются на периферии заказника. На территории заказника отмечены змеяд и орел-карлик, ранее не отмечавшийся на территории Ивановской области. Обнаружено по две гнездовые территории большого и малого подорликов – это подтверждает ежегодное, а не случайное гнездование данных видов. Чеглок гнездится на изучаемой территории со стабильно низкой плотностью, появление на гнездовании дербника отражает общую тенденцию его расселения по региону. Не отмечавшаяся несколько лет в заказнике пустельга появилась на гнездовании в населенных пунктах.

На исследуемой территории заказника подтверждается присутствие комплекса хищников, характерного для сильно-мозаичных ландшафтов (Мельников, 2000). Численность отдельных видов и структура населения группы определяется особенностями структуры ландшафтов участков обитания (мозаичность территории).

В целом для района исследований численность и разнообразие дневных хищных птиц являются высокими по сравнению с другими районами области. На численность и видовое разнообразие дневных хищных птиц благоприятно влияет режим заказника, позволяющий ограничить фактор беспокойства и уничтожение местообитаний.

А. В. СМОЛИНА, Д. А. ПОЛЕТАЕВА, И. И. ФАЙНГОЛЬД,
А. Ю. РЫБКИН

Институт проблем химической физики РАН, г. Черноголовка

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ МЕХАНИЗМЫ НЕЙРОПРОТЕКТОРНОГО ДЕЙСТВИЯ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ПОЛИЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ФУЛЛЕРЕНА C₆₀

Среди широкого спектра различных нейродегенеративных заболеваний болезнь Альцгеймера (БА) является наиболее распространенной формой старческого слабоумия. До сих пор не разработаны лекарственные препараты, позволяющие предотвратить или излечить это заболевание. Работа посвящена изучению молекулярных механизмов нейропротекторного действия водорастворимых полизамещенных производных фуллерена C₆₀ (ВППФ), обладающих широким спектром биологической активности, с целью создания на их основе препаратов нового поколения для лечения нейродегенеративных заболеваний. Исследование проводится комплексно, с применением биохимических методов, электрофизиологического метода patch-clamp и поведенческих тестов. В работе исследована антиоксидантная и антирадикальная активность ряда ВППФ, а также их влияние на каталитическую активность MAO-B и MAO-A. Для дальнейших исследований на нейропротекторную активность были отобраны ВППФ KB-452, TP-1107, обладающие антиоксидантными и антирадикальными свойствами. Показано, что KB-452, ингибирующее каталитическую активность как MAO-B, так и MAO-A, вызывает увеличение амплитуды каинат-вызванных токов AMPA рецепторов в нейронах Пуркинье мозжечка крыс и оказывает когнитивно-стимулирующее действие, улучшая память животных при введении ВППФ в малых дозах - 1 мг/кг. TP-1107, ингибирующее MAO-B и активирующее MAO-A, также вызывает увеличение амплитуды каинат-вызванных токов AMPA рецепторов и в дозе 1 мг/кг улучшает память животных. Полученные результаты позволяют предложить ВППФ KB-452 и TP-1107 для углубленных исследований в качестве препаратов для лечения БА и других нейродегенеративных заболеваний.

*Работа выполнена под руководством канд. физ.-мат. наук
Р. А. Котельниковой, д-ра биол. наук В. В. Григорьева.*

А. А. СПИРИДОНОВА
Ивановский государственный университет

ПРОЕКТИРОВАНИЕ ЭКСПОЗИЦИИ В ЯПОНСКОМ СТИЛЕ НА ТЕРРИТОРИИ БОТАНИЧЕСКОГО САДА ИВГУ

Ботанический сад ИвГУ является учебной и научно-исследовательской базой для студентов, экскурсионным объектом для населения города. На его базе ежегодно реализуются творческие проекты по ландшафтному дизайну. Нами в период с 2012 по 2013 год был разработан и частично реализован проект по созданию садика в японском стиле.

На начальном этапе работы были выполнены предпроектные исследования территории. Проведен ландшафтный анализ участка, подеревная съемка насаждений, инсоляционные исследования, сделано техническое заключение о почвах, грунтовых водах. На основании полученных данных наметили план работ по созданию экспозиции, включающий следующие этапы:

1. Выбор участка и определение границ. Его местоположение дает возможность просматривать экспозицию с главной экскурсионной дорожки ботанического сада.

2. Деление территории на зоны. В результате зонирования выделили парадную зону, зоны отдыха и цукубая, холмов и «долины».

3. Подготовка места для последующих работ. Первоначально очистили участок от хозяйственного мусора, удалили непригодные для экспозиции кустарники, изменили рельеф территории.

4. Обустройство зон, разбивка дорожно-тропиночной сети. Разграничили зону отдыха и зону холмов. Изготовили и установили малые архитектурные формы, создали холмистость.

5. Посадка растений: деревьев, кустарников. Разбивка клумб, цветников, газонов. Было использовано 20 видов декоративных культурных растений. Большинство растений декоративнолиственные, соответствующие стилистике сада.

6. Последующий уход за растениями.

В дальнейшем на основании данного плана будем продолжать реализовывать проект по созданию экспозиции сада в японском стиле.

*Работа выполнена под руководством канд. пед. наук, доц.
Л. Ю. Минегвой.*

Н. М. ФЕДОТОВА

Ивановский государственный университет

РЖАВЧИННЫЕ ГРИБЫ ГОРОДА КОХМА

Большую роль в снижении урожая и декоративных свойств многих возделываемых сельскохозяйственных культур, дикорастущих, полезных травянистых, кустарниковых, древесных и культурных растений играют облигатные паразиты - ржавчинные грибы. Целью данной работы является: изучить видовое разнообразие и биологические особенности ржавчинных грибов города Кохма Ивановской области. Исходя из поставленной цели, предстояло решить следующие задачи: 1. Установить видовой состав растений-хозяев. 2. Выявить видовой состав грибов порядка Uredinales города Кохма. 3. Изучить биологические особенности обнаруженных патогенов. Объектами исследования являются высшие сосудистые растения, поражённые ржавчинными грибами. Сбор материала проводился в сентябре-октябре 2011 года и с апреля по октябрь 2012 года, маршрутным методом. Пораженный флористический материал гербаризировался и этикетировался. Собрано 14 видов высших растений, относящихся к 13 родам и принадлежащих к 10 семействам, с признаками поражения ржавчинными грибами. На основании сравнения жизненных форм поражённых ржавчинной растений, установлено, что симптомы заболевания чаще проявляются на травянистых растениях, чем на древесных. В результате работы было выявлено 14 видов ржавчинных грибов, принадлежащих к 6 родам, относящихся к 2 семействам - Pucciniaceae и Melampsoraceae. Отмечается преобладание видов семейства Pucciniaceae (10 видов, 71%). Семейство Pucciniaceae представлено 3 родами – Puccinia, Gymnosporangium, Uromyces. наиболее многочисленным по числу видов является род Puccinia (57%). Семейство Melampsoraceae представлено 3 родами, наиболее многочисленным по числу видов является род Melampsora Dietel включающий 2 вида высших растений. Рода Melampsorium Kleb, Coleosporium sp представлены каждый одним видом. Проанализировав биологические особенности ржавчинных грибов, выяснили, что 71% являются разнохозяйными, и 29% однохозяйными. Изучение ржавчинных грибов окрестностей города Кохма будет продолжено.

Работа выполнена под руководством канд. пед. наук, доц. Л. Ю. Минеевой.

Е. А. ХУДЯКОВА
Ивановский государственный университет

ГЕНЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ СМЕШАННОГО ПОСЕЛЕНИЯ БОЛЬШИХ БЕЛОГОЛОВЫХ ЧАЕК НА ТОРФОКОМПЛЕКСЕ БОЛЬШОЕ БОЛОТО

Большой научный интерес представляет группа больших белоголовых чаек, также известная как комплекс серебристых чаек. Установление таксономического статуса большинства форм является крайне затруднительным, специалисты выделяют от 5 до 20 видов. В настоящее время происходит расширение ареалов некоторых форм данной группы, что приводит к образованию зон вторичной симпатрии, в которых формируются смешанные колонии. Невысокий уровень репродуктивной изоляции не препятствует образованию смешанных пар и появлению фертильных гибридов.

Примером такого смешанного поселения является колония больших белоголовых чаек на торфокомплексе Большое болото (Южский р-он Ивановской обл.). В период с 2008-2010г. здесь было отловлено 88 птиц (из них 50 птенцов) для взятия образцов крови с целью проведения молекулярно-генетического анализа.

При исследовании ядерной ДНК использовались 9 пар праймеров. Для анализа полиморфизма микросателлитных локусов применялась мультиплексная ПЦР с использованием двух смесей микросателлитных праймеров (HG27, HG18, HG14, K32, K71 и HG25, HG16, K31, K67). Для каждого локуса произведен расчет числа аллелей, значений ожидаемой и наблюдаемой гетерозиготности, информационного содержания полиморфизма (PIC). Значительная разница между ожидаемой и наблюдаемой частотой генотипов наблюдалась для локуса K32, что свидетельствует о наличии различных частот аллелей в исследуемом поселении. Дальнейший анализ производился с помощью программы STRUCTURE, предназначенной для изучения структуры популяций, в частности выявления гибридных зон, а также оценки частот аллелей в смешанных поселениях. В результате исследования образцов получены данные о наличии на изучаемой территории 4 родительских форм, а именно форм *argentatus*, *cachinnans*, *heuglini*, *barabensis*. Анализ митохондриальной ДНК (ген цитохрома b) не дал значимых результатов в связи с неполной амплификацией гена. Для уточнения данных планируется повторить исследование с использованием других праймеров и проанализировать образцы, полученные позднее.

Д. В. ЧАСОВ

Ивановский государственный университет

ОСОБЕННОСТИ ГНЕЗДОВАНИЯ ЗОЛОТИСТОЙ ЩУРКИ В УСЛОВИЯХ РАСШИРЕНИЯ АРЕАЛА

На территории Ивановской области золотистая щурка впервые отмечена в 2008 г. (Чудненко, Розин, 2012). Наши исследования проводились в конце июля (24-26) 2012 года на территории Родниковского района Ивановской области в окрестностях поселка Каминский. Успешное гнездование щурки на данной территории отмечалось на протяжении 3 лет. В 2012 году было обнаружено две жилых норы, удаленных друг от друга на 2,7 км. На одной из них было проводилось исследование. Целью работы явилось изучение особенностей гнездования, суточной активности и кормовой базы золотистой щурки (*Meops arpiaster*) на территории Ивановской области, в условиях расширения ареала.

Одиночная пара гнездилась в песчаных оползнях обрыва по правому берегу реки Тезы близ деревни Курцево. В ходе исследований проводилось хронометрирование суточной активности кормления птенцов взрослыми птицами, изучалась кормовая база щурок на основе анализа погадок из нор и оброненной птицами добычи. За дни наблюдений было проведено 9 часов наблюдений, зарегистрировано 120 прилетов к норе. В результате исследований было установлено, что наибольшее количество прилетов взрослых птиц к норе с кормом приходится на периоды с 10 до 11, 14-16 и 17-18 часов и связана с периодами активности летающих насекомых – основного рациона щурок. Активность самца при кормлении была значительно выше, чем самки. На его долю приходится 66% прилетов к норе. Самка кормила в основном в утренние часы. Около 20-00 характерное «щурканье» птенцов в гнезде прекращалось, взрослые птицы улетали, появляясь у гнезда только утром. Вылет птенцов из норы происходил в течение одного дня (26 июля). Основу рациона золотистых щурок на исследуемой территории составили стрекозы, перепончатокрылые (семейства пчелиные, складчатокрылые осы), а также жесткокрылые и чешуекрылые. Были зафиксированы попытки клептопаразитизма на золотистых щурках других видов птиц (иволга, рябинник, коноплянка, зеленушка, чечевица, овсянка), которые подбирали упавший у норы корм и пытались отобрать добычу у взрослых щурок.

Е. А. ЧЕКУНОВА

Ивановский государственный университет

ФЛОРА СТАРИННОГО УСАДЕБНОГО ПАРКА А. С. ТАТИЩЕВА

Усадебные парки являются культурно-историческими и природными объектами. Многие из них представляют природно-культурное наследие страны и объявлены памятниками природы. Так же служат примером обогащения флоры рядом декоративных растений и отличаются большим многообразием видов. Поэтому изучение видового состава усадебных парков является очень актуальным в настоящее время.

Парк имени Татищева расположен в Вичугском районе пос. Старая Вичуга. Его территория находится на берегу р. Вичужанка и ручья, который делит парк на две части. За ручьём в парке имеется пруд с искусственно насыпанным островом.

Изучение флоры усадебного парка проводилось нами в течение летней полевой практики (июнь-июль 2012г). Были обследованы аллеи посадки, пруд, сохранившиеся луговые сообщества. Сложные в систематическом отношении виды гербаризировались.

В результате наших исследований во флоре парка найдено 70 видов сосудистых растений, относящихся к 3 отделам, 4 классам и 22 семействам. Среди них наибольший интерес представляет вид - *Arrhenatherum elatius*. Это многолетний злак, растущий густыми дерновинами. *Arrhenatherum elatius* декоративный хороший кормовой злак западноевропейского происхождения.

В парке среди древесных растений обычны *Tilia cordata*, которая растёт одиночными, реже рядовыми посадками. Кроме того встречается *Acer platanoides*, реже *Syringa vulgaris*. Среди травянистых растений обычны виды: *Dactylis glomerata*, *Elytrigia repens*, *Phleum pretense*, *Aegopodium podagraria*, *Plantago major*, *Taraxacum officinale* и другие

Таким образом флора парк отличается разнообразием и специфичностью. Однако изучение его флоры следует продолжить в весенний период, так как не изучены раннецветущие виды.

Работа выполнена под руководством д-ра биол. наук, заведующей кафедрой общей биологии и физиологии Е. А. Борисовой.

Л. С. ШУВАЛОВА
Ивановский государственный университет
Ивановский институт ГПС МЧС России

ИЗУЧЕНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ОБЪЕКТИВНОЙ ОЦЕНКИ СРПВ ДЛЯ МОНИТОРИНГА СТРЕССОГЕННОГО СОСТОЯНИЯ У СПЕЦИАЛИСТОВ ЭКСТРЕМАЛЬНОГО ПРОФИЛЯ

Известен целый ряд способов оценки профессиональной пригодности кадров при подборе персонала в отраслях промышленности, требующих предельного напряжения организма. Однако эти известные способы определяют либо физиологические возможности испытуемого, либо его мотивацию выбора данной профессии, но никак не психофизиологическое состояние с оценкой реальных последствий влияния «профессионального стресса» для системы кровообращения. Характеристики состояния сосудистой стенки могут стать ранними маркерами изменений сердечно-сосудистой системы.

Наш подход к анализу колебательной структуры и поиск возможных соотношений базировался на функционально-динамическом исследовании вегетативного тонуса, вегетативной реактивности и изучении изменения скорости распространения пульсовой волны (СРПВ) в зависимости от интенсивности воздействия неблагоприятных факторов профессии пожарного. При этом в основу положен общеизвестный факт влияния стресса в «запуске» механизмов дестабилизации артериального давления (52 % респондентов отметили стресс как основной дезадаптивный механизм, у 10 % превалировал фактор значительной физической нагрузки). Оба этих фактора являются ведущими в профессиональных «вредностях» труда спасателя.

Исследование проводилось в лаборатории «Медицина катастроф» МЧС России с помощью оценки сфигмограммы и вариабельности ритма сердца на приборе «Поли-спектр 8». Было обследовано 40 человек, работающих пожарными в возрасте от 20 до 40 лет. Прделанная работа позволила предположить, что основным стресс-зависимым показателем является увеличение СРПВ по сосудам мышечного типа, при этом «количественное» накопление усталости коррелирует с СРПВ по сосудам эластического типа. Дальнейшие исследования планируется провести во взаимосвязи с длительностью профмаршрута, а также особенностями деятельности специалистов экстремального профиля.

*Работа выполнена под руководством д-ра мед. наук, проф.
С. В. Королевой, канд. биол. наук, доц. Н. К. Кормилицыной.*

А. В. АККУРАТОВ, Д. К. СУСАРОВА, Д. В. НОВИКОВ,
А. Е. ХАКИНА, О. А. МУХАЧЕВА, П. А. ТРОШИН

НАПРАВЛЕННЫЙ ДИЗАЙН СОПРЯЖЕННЫХ ПОЛИМЕРОВ ДЛЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЛНЕЧНЫХ БАТАРЕЙ

В настоящее время одним из широко изучаемых сопряженных полимеров является карбазол-содержащий полимер PCDTBT (рис.1)



Рис.1 Структура полимера PCDTBT

Хорошие электронные свойства полимера ($E_{\text{НОМО}} = -5,5 \text{ eV}$) обеспечивают высокое напряжение холостого хода порядка 800-900 мВ. Однако ширина запрещенной зоны PCDTBT составляет 1,9 эВ, что не позволяет достигать высоких плотностей тока короткого замыкания. В данной работе мы предложили новый подход к понижению ширины запрещенной зоны полимера путем изменения лишь энергии уровня НСМО. В результате, можно увеличить плотности тока короткого замыкания без потерь в напряжении холостого хода. Для решения поставленной задачи была проведена модификация структуры исходного PCDTBT и получен полимер P1 (рис.2)

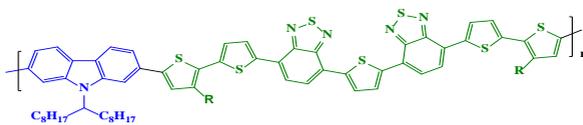


Рис.2 Структура полимера P1

Благодаря дополнительным электроноакцепторным бензотиадиазольным фрагментам, уровень НСМО этого полимера был понижен по сравнению с исходным и ширина запрещенной зоны, рассчитанная из оптических спектров поглощения, составила 1,61 эВ. Исследование полимеров PCDTBT и P1 с использованием циклической вольтамперометрии показало, они имеют примерно одинаковые потенциалы окисления, что свидетельствует о близости их уровней ВЗМО. Максимальная эффективность органической солнечной батареи, изготовленной на основе композита полимера P1 с

[70]PCBM, составила 6.4%. Теоретически, к.п.д. солнечных батарей на основе полимера P1 может достигать 10-11%.

А. А. АРБУЗОВ, В. Е. МУРАДЯН
Институт проблем химической физики РАН

КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА

Графен является одной из аллотропных модификаций углерода и представляет собой плоский монослой атомов углерода, плотно упакованных в двумерную (2D) сотовую решетку. Впервые графен был экспериментально получен микромеханическим методом ("скотч-метод") и описан в 2004 году А. К. Геймом и К. С. Новоселовым, нобелевскими лауреатами 2010 г.

Для получения графена и графеновых материалов (многослойный графен) используют различные методы: термическое разложение SiC; CVD синтез на поверхности металла; электрохимическое расщепление графита; «вскрытие» углеродных нанотрубок; восстановление оксида графита и другие. Благодаря большой удельной поверхности, уникальным электрическим, термическим и механическим свойствам материалы на основе графена могут быть использованы в электронике, газовых сенсорах, как модифицирующие добавки в нанокompозитах, в качестве носителей катализаторов.

Получению и исследованию композиционных материалов на основе графена в научной литературе посвящено множество работ. В качестве второго компонента в таких композитах используют полимеры (эпоксидные смолы, полиэтилен, полистирол и др.); металлы и их оксиды; углеродные материалы (фуллерен, нанотрубки, нановолокна). Основными условиями для получения таких материалов является равномерное распределение графена в матрице и степень его «идеальности». Введение графена в композиционные материалы может повысить их эксплуатационные характеристики: механические, термические, электрофизические, радиопоглощающие и др.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 11-03-01190).

М. А. БАЗАНОВА
Ивановский государственный университет

СМЕШАННОЛИГАНДНОЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ КОМПЛЕКСОНАТОВ МЕДИ(II) И НИКЕЛЯ С АМИНОКИСЛОТАМИ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ

Реакции образования смешаннолигандных комплексов с участием этилендиаминтетраацетатов металлов представляют интерес по причине уникальной способности ЭДТА к поливариантной координации. Ранее была изучена устойчивость смешаннолигандных комплексов этилендиаминтетраацетата Cu(II) с такими аминокислотами как гистидин, лизин, орнитин. Были установлены особенности координации указанных аминокислот в составе смешанных комплексонатов Cu(II). Это имеет большое значение при рассмотрении вопроса о выведении избытка меди, оказывающего токсическое действие на организм, посредством хелатотерапии. Представляло интерес расширить изучение смешаннолигандного комплексообразования с участием комплексонатов металлов с целью определения дентатности и типов координации лигандов в смешанном комплексе. В качестве объектов исследования были взяты системы Cu, Ni - Edta, Nta - аминокислота в водном растворе.

В ходе работы была проведена серия pH-потенциометрических титрований растворов ($\text{Na}_n\text{MY} + \text{HL} \cdot \text{HCl}$) ($\text{M} = \text{Cu, Ni}$; $\text{Y} = \text{Edta, Nta}$; $\text{L} = \text{His, Lys, Orn, Arg, Cys}$) раствором NaOH при 25°C и ионной силе 0,5 (KNO_3) при соотношениях $\text{MY} : \text{L} = 2:1, 1:1$. ЭДС цепи с переносом, включающей стеклянный и хлорсеребряный электроды, измеряли компенсационным методом. Обработку экспериментальных данных pH-метрических измерений проводили по программе РНМЕТР, основанной на минимизации функции правдоподобия $F = \sum (\text{p}_c\text{H}_{\text{экс.}} - \text{p}_c\text{H}_{\text{расч.}})^2$, где $\text{p}_c\text{H} = -\lg[\text{H}^+]$ - экспериментальные и рассчитанные по модели величины соответственно. Согласие между рассчитанной кривой и экспериментом достигается только при учете образования наряду с MYL (заряды опущены) смешанного комплекса состава MYHL. В случае меди в растворе присутствуют также биядерные частицы состава $(\text{CuY})_2\text{L}$. Измерения тепловых эффектов проводили на ампульном калориметре смешения с изотермической оболочкой и термистерным датчиком температуры. Обработку калориметрических данных проводили по программе HEAT [1].

Для систем M-Y-L ($\text{M} = \text{Cu, Ni}$; $\text{Y} = \text{Edta, Nta}$; $\text{L} = \text{His, Lys, Im}$) были сняты электронные спектры поглощения. Раствором сравнения

служил 0,5 М раствор KNO_3 . Обработку спектрофотометрических данных проводили по программе FTMT [1].

Полученные данные позволяют предложить наиболее вероятный тип координации аминокислотного остатка в смешанных комплексах MYL и MYNL . При избытке CuY в растворе доминирующей комплексной частицей являлся биядерный комплекс состава $(\text{CuY})_2\text{L}$, в котором аминокислота, по всей видимости, выступает в качестве мостика, связывая координационные сферы двух комплексонов Cu(II) .

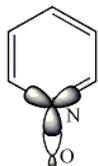
Работа выполнена под руководством канд. хим. наук, доц. Д. Ф. Пырзу, д-ра хим. наук, проф. Е. В. Козловского.

Ю. А. БЕРЕЖНЕВА, М. С. ФЕДОРОВ
Ивановский государственный университет

ПРИРОДА СЕМИПОЛЯРНОЙ СВЯЗИ В N-ОКСИДАХ ПИРИДИНА ПО РЕЗУЛЬТАТАМ NBO-АНАЛИЗА

Был выполнен ряд квантово-химических расчетов (DFT/B3LYP/cc-pVTZ, MP2/cc-pVTZ, пакет Gaussian 03) для молекул замещенных N-оксида пиридина. По результатам NBO-анализа распределения электронной плотности были определены особенности семиполярной связи $\text{N}\rightarrow\text{O}$.

В образовании двух σ связей N-C и связи $\sigma(\text{N-O})$ принимают участие три гибридные орбитали атома азота с типом гибридизации близким к sp^2 . Оставшаяся валентная орбиталь атома N является р-орбиталью, которая расположена перпендикулярно плоскости молекулы и участвует в образовании π -электронной системы пиридинового остова. На данной орбитали находится 2 электрона, в то время как шестичленный остов по правилу Хюккеля должен иметь 6π электронов, 5 из которых принадлежат 5-ти атомам C. Таким образом один электрон в π -системе оказывается лишним ($5+2$). Поэтому атом N отдает часть электронной плотности атому O, что обеспечивает возникновение большого по величине отрицательного заряда на атоме O.



Натуральная σ -связывающая орбиталь $\sigma_{\text{N-O}}$ имеет вид: $\sigma(\text{N-O}) = 0.72 h_{\text{N}} + 0.70 h_{\text{O}}$. Поляризационные коэффициенты при гибридных орбиталях атома N и атома O близки, что свидетельствует о ковалентном характере σ -связи $\text{N}\rightarrow\text{O}$. Атом O имеет 3 неподеленные пары (LP), по данным NBO-анализа: две – с заселенностью 1.98 \bar{e} и 1.92

\bar{e} , а третья LP_3 – с заселенностью 1.6 \bar{e} . В результате на атоме O возникает суммарный заряд в -0.5 \bar{e} . Не максимальная заселенность LP_3 кислорода объясняется ее донорно-акцепторным взаимодействием с разрыхляющей $\pi^*(N-C)$ и частичным переносом электронной плотности в π -систему пиридинового кольца.

Различные заместители в пиридиновом кольце будут либо способствовать такой передаче, уменьшая отрицательный заряд на атоме O, либо затруднять ее, увеличивая отрицательный заряд на атоме O.

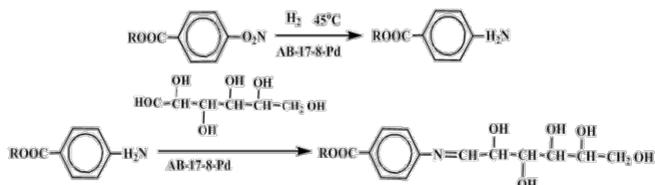
Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф. Н. И. Гиричевой

Е. В. ГАПОН, Е. В. ЯШКОВА
Ивановский государственный университет

СЛОЖНЫЕ ЭФИРЫ *n*-(N-ГАЛАКТОЗИЛИДЕН)АМИНОБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ, СИНТЕЗ И СВОЙСТВА

Сложные эфиры *n*-(N-галактозилиден)аминобензойной кислоты относятся к классу оснований Шиффа. Синтез таких соединений является перспективным, так как эти соединения могут применяться в медицине, в качестве обезболивающих и фотозащитных средств в косметических препаратах.

Разработанная методика синтеза сложных эфиров *n*-(N-галактозилиден)аминобензойной кислоты сочетает каталитическое гидрирование эфиров *n*-нитробензойной кислоты при температуре 45°C и реакцию конденсации получаемого амина с глюкозой.



Выделение и очистку продукта проводили из водно-спиртового раствора.

Выход сложных эфиров *n*-(N-галактозилиден)аминобензойной кислоты составил 30-40 % от теоретически возможного. Чистота получаемого продукта контролировалась методами ТСХ и ВЭЖХ и составила 95.8%. Для подтверждения строения полученных

соединений были использованы спектроскопические методы (ЯМР-, ИК-спектроскопии) и элементный анализ CHNS.

Работа выполнена под руководством канд. хим. наук, доц. А. А. Насибулина

О. Ю. ДИЦИНА

Ивановский государственный университет

КИНЕТИКА РЕАКЦИЙ ОБРАЗОВАНИЯ АМИДНОЙ СВЯЗИ С УЧАСТИЕМ ЭФИРОВ БЕНЗОЙНОЙ И УКСУСНОЙ КИСЛОТ

Водно-органические растворители широко используются в промышленности при образовании амидной связи с участием ароматических и алифатических аминов и различных ацилирующих агентов. Кинетика ацилирования аминов в водно-органических растворителях изучена недостаточно, что связано, в первую очередь, с высокими скоростями реакций, а также с гидролизом ацилирующих агентов в растворителях, содержащих воду.

Реакционной способности аминов в *N*-ацилировании производными ароматических карбоновых кислот посвящено много работ, вместе с тем, кинетические закономерности целого ряда реакций в таком широко применяемом и доступном растворителе, как водный диоксан, к настоящему времени не изучены, хотя они представляют интерес как с практической точки зрения, так и для исследования общих закономерностей ацильного переноса.

Целью настоящей работы являлось изучение кинетики взаимодействия алифатических и ароматических аминосоединений с нитрозамещенными эфирами бензойной и уксусной кислот

Кинетику реакций изучали спектрофотометрическим методом в условиях первого порядка при концентрации аминов, превышающей концентрацию ацилирующих агентов не менее чем в 100 раз. За скоростью реакции следили по изменению концентрации выделяющихся в ходе реакций 2,4,6-тринитрофенолят- и 4-нитрофенолят-ионов, окрашенных в желтый цвет, при длине волны 400 нм. Наблюдаемые константы скорости реакций рассчитывали по методу Гуггенгейма. Условия опытов подбирали таким образом, чтобы скорость гидролиза эфира была пренебрежимо мала по сравнению со скоростью ацилирования.

Установлено, что реакционная способность пикрилбензоата выше, чем *n*-нитрофенилацетата между значениями констант

ацилирования ($k_{\text{ац}}$) реакций изученных аминокислот с пикрилбензоатом и *n*-нитрофенилацетатом наблюдается линейная зависимость. Показано, что главным фактором, определяющим реакционную способность аминов и аминокислот в N-ацилировании, является их основность.

Работа выполнена под руководством канд. хим. наук, доц. Н. В. Калининой

П. А. КАЛМЫКОВ
Ивановский государственный университет

СРАВНЕНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ПЛЛАДИЙСОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРОВ ГИДРИРОВАНИЯ

Одной из важных задач современной химии является поиск новых эффективных и доступных катализаторов.

Работа посвящена изучению каталитических свойств 1 мас. % Pd-содержащих наноалмазов (НА) и 1 мас. % Pd-содержащего активированного угля (АУ) марки М200 (*таблица*), приготовленных по одинаковой методике (Вершинин Н. Н., Ефимов О. Н. Пат. № 2348090 РФ, 2009.), в реакциях гидрогенизации ненасыщенных органических соединений (циклогексен, гексен-1, аллиловый спирт, акриловая кислота, метакриловая кислота и коричная кислота) в мягких условиях ($P_{H_2} = 0.1$ МПа, $T = 318$ К, растворитель – этанол).

Характеристики Pd/НА и Pd/АУ в реакции гидрирования

Параметр Субстрат	1 мас. % Pd/НА		1 мас. % Pd/АУ	
	TON, мин ⁻¹	<i>k</i> , л/(моль·с)	TON, мин ⁻¹	<i>k</i> , л/(моль·с)
циклогексен	49.9	294.2	39.1	236.9
гексен-1	93.7	551.8	60.2	357.5
аллиловый спирт	91.4	538.4	50.3	300.3
акриловая к-та	104.3	625.9	61.3	355.3
метакриловая к-та	49.9	282.3	33.6	201.0
коричная к-та	33.7	196.6	23.9	140.9

Ошибка в определении значений константы скорости и числа оборотов реакции не превышает 5%.

Оба исследуемых образца оказались каталитически активными в указанных модельных реакциях. Сопоставляя значения активности катализаторов (TON, мин⁻¹), оказалось, что в реакции гидрирования всех указанных субстратов 1 мас. % Pd/НА более активен, чем 1 мас. % Pd/АУ в 1.3–1.8 раз, в зависимости от природы субстрата

(положения кратной связи). Согласно данным анализа продуктов реакций, полученным с помощью газожидкостной хроматографии, конверсия субстратов составила 100%. Побочных продуктов не обнаружено.

Работа включена в Программу "Научно-исследовательские работы ФГБОУ ВПО "Ивановский государственный университет", проводимые в рамках государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации", а также поддержана грантом РФФИ № 12-03-97546-р_центр_а.

Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф. М. В. Клюева.

И. С. КИСЕЛЕВА, Н. А. МАГДАЛИНОВА
Ивановский государственный университет

КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА 1% Pd-PEG-4000/ZnO В ГИДРИРОВАНИИ

Одной из актуальных задач современной химии является создание новых эффективных катализаторов, обладающих высокой активностью, селективностью и стабильностью.

Целью данной работы является изучение каталитических свойств 1% Pd-PEG-4000/ZnO в модельных реакциях гидрирования нитробензола (таблица) и его *para*-замещенных аналогов (*n*-нитроанилин, *n*-нитрофенол, *n*-нитробензойная кислота) и непредельных органических соединений (аллиловый спирт, акриловая кислота, коричная кислота и циклогексен) в мягких условиях ($P_{H_2} = 0.1$ МПа, $T = 318$ К, растворитель – этанол).

Характеристики 1% Pd-PEG-4000/ZnO, 1% Pd/C и 1% Pd/HA на примере реакции гидрирования нитробензола*

Катализатор Параметр	1% Pd-PEG-4000/ZnO	1% Pd/C	1% Pd/HA
k , л/(моль·с)	441.0	255.9	788.4
TON, мин ⁻¹	75.5	43.4	133.0

* 1% Pd/C – традиционный катализатор на основе активированного угля,
1% Pd/HA – наноразмерный катализатор на основе наноалмазов.

Исследуемый образец 1% Pd-PEG-4000/ZnO оказался каталитически активным в указанных модельных реакциях. По сравнению с промышленным Pd/C, например, в реакции гидрирования нитробензола в аналогичных условиях 1% Pd-PEG-4000/ZnO активнее

в 1.7 раза, но во столько же раз уступает наноразмерному катализатору 1% Pd/НА. Катализатор 1% Pd-PEG-4000/ZnO оказался достаточно стабильным: при многократном использовании скорость реакции гидрирования нитробензола изменяется в пределах погрешности измерений.

Авторы выражают благодарность проф. А. К. Жармагамбетовой за предоставленный для изучения образец 1% Pd-PEG-4000/ZnO.

Работа включена в Программу "Научно-исследовательские работы ФГБОУ ВПО "Ивановский государственный университет", проводимые в рамках государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации".

Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф. М. В. Клюева.

Ю. В. КОЗЯВИНА, М. С. ФЕДОРОВ
Ивановский государственный университет

КОНФОРМАЦИОННЫЕ ОСОБЕННОСТИ ГРУППЫ -NH-NH₂ НА ПРИМЕРЕ ГИДРАЗИДА БЕНЗОЛСУЛЬФОКИСЛОТЫ

В последнее время для изучения конформационных свойств молекул широко используются методы квантовой химии. Результаты таких расчетов позволяют продемонстрировать справедливость многих существующих феноменологических концепций, используемых для описания молекулярной структуры.

Одним из фактов, определяющих стабилизацию определенной структуры в органической химии, является *гош-эффект*. Это стабилизация конформеров с максимальным числом гош-взаимодействий между несвязывающими парами электронов или полярными связями.

Нами выполнен поиск конформеров молекулы гидразида бензолсульфокислоты (ГБСК) методами квантовой химии (DFT/B3LYP/cc-pVTZ, MP2/cc-pVTZ). Исследуемая молекула имеет 6 конформеров. Несмотря на разные относительные положения фрагментов -SO₂-, -NH- и -NH₂, в каждом из конформеров наблюдается общая особенность: во фрагменте -NH-NH₂ неподеленные пары (LP) двух атомов азота имеют гош-ориентацию друг относительно друга, при этом торсионный угол между связями N₁-H и N₂-H близок к 90°. Такое относительное расположение LP при атомах N можно объяснить проявлением аномерных эффектов:

взаимодействием LP одного из атомов N с σ^* орбиталью связи N_2-X (где X = H (как в гидразине) или $-SO_2C_6H_5$).

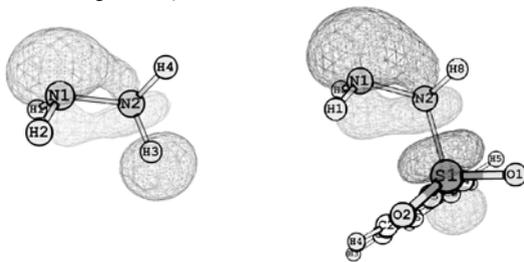


Рис. 1. Взаимодействие LP_{N1} с $\sigma^*(N_2-X)$ в гидразине и ГБСК.

В результате такого взаимодействия происходит делокализация электронной плотности с LP_{N1} на связь N_1-N_2 и N_2-X , что приводит к стабилизации указанных структур.

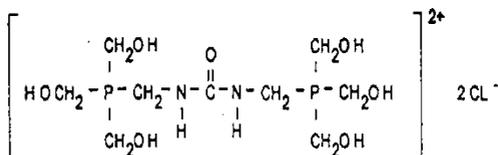
Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф. Н. И. Гуричевой.

Ю. В. КУЗЬМИЧЕВА

Ивановский государственный университет

РАЗРАБОТКА ОГНЕЗАЩИТНЫХ СОСТАВОВ ДЛЯ ТКАНЕЙ СПЕЦИАЛЬНОГО НАЗНАЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ КОММЕРЧЕСКОГО ПРЕПАРАТА «АФФЛАМИТ»

Широкое практическое применение для огнезащитной отделки целлюлозосодержащих тканей нашли антипирены на основе органических азотно-фосфорных соединений. К таким соединениям относится хлорид тетрааксис(оксиметил)фосфония, известный под коммерческими названиями «Аффламит» или «ПРОБАН», имеющий формулу:



В работе предложены антипиррурующие композиции на основе коммерческого препарата Аффламит для хлопчатобумажных тканей:

молескина С27-ЮД с поверхностной плотностью 250 г/м² и саржи металлизированной С4А цвет К-25-5 с поверхностной плотностью 260 г/м². В разработанных составах использованы необходимые для иммобилизации Аффламита на ткани сшивающие агенты, альтернативные применяемому в производственных условиях пожаровзрыво- и экологически опасному аммиаку. К ним относятся уротропин, гликазин, карбамол-2, 4,4'-дифенилметандиизоцианат (МДИ). Предложены методики модификации хлопчатобумажных тканей, используемых для производства одежды специального назначения.

В соответствии с ГОСТ 11209-85 исследованы огнезащитные свойства модифицированных тканей. Установлено, что все предложенные составы обладают огнезащитными свойствами.

В соответствии ГОСТ 12.4.049-78 изучалась устойчивость обработанных образцов тканей к мокрой обработке. Показано, что ткани, модифицированные составами на основе Аффламита с предложенными сшивающими агентами, после мокрой обработки не удовлетворяют требованиям указанного ГОСТа.

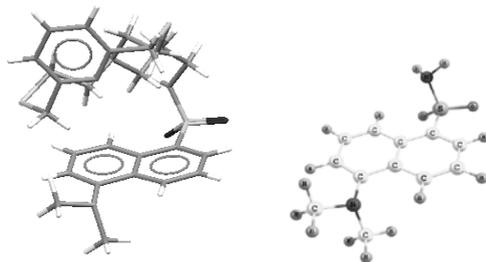
На «Измерителе плотности теплового потока ИПП-2» был определен коэффициент задержки теплового потока образцами молескина и саржи, модифицированными разработанными антипиррирующими составами. Выявлено, что коэффициент задержки теплового потока после обработки образцов возрастает не более чем на 5 %.

Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф. С. А. Сырбу (ИвГУ) и проф. В. А. Бурмистрова (ИГХТУ).

Е. А. ЛАПЫКИНА, Д. А. ПЕТРОВА, Л. Р. ОЩЕПКОВА
Ивановский государственный университет

ФЛУОРЕСЦЕНТНЫЕ МЕТКИ. СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛЫ ДАНСИЛ АМИДА

Соединения дансил амида и хлорида обладают флуоресцентными свойствами. Их радикалы $(\text{CH}_3)_2\text{N}-\text{C}_{10}\text{H}_6-\text{SO}_2\text{NH}$ -вводят в состав многих биологически активных молекул для



использования в качестве флуоресцентных меток. В настоящей работе выполнено определение геометрического строения свободной молекулы дансил амида (5-(ди-метиламино)нафталин-1-сульфонамид) и сравнение структуры свободной молекулы с молекулярной структурой в кристаллах.

Таблица. Геометрические параметры молекулы дансил амида по данным рентгеноструктурного анализа и квантово-химического расчета B3LYP/cc-pvtz (расстояние в Å, углы в градусах)

Параметры	Кристалл 1	Кристалл 2	Кристалл 3	Расчет
(C-C)ср.	1.403	1.397	1.398	1.402
C-S	1.789	1.773	1.801	1.800
S-N	1.620	1.623	1.574	1.685
S=O	1.425	1.432	1.445	1.454
C-N	1.456	1.417	1.412	1.417
N-C(Me)	1.492	1.472	1.465	1.453
C9-C1-S-N	75.6	67.2	-176.8	67.6
C10-C9-C1-S	173.7	170.3	178.5	178.5
C11-N-C5-C10	82.7	74.9	72.8	72.9

Свободная молекула дансил амида может иметь несколько конформеров, отличающихся взаимным пространственным

расположением заместителей $-\text{N}(\text{CH}_3)_2$ и $-\text{SO}_2\text{NH}_2$. Следует отметить, что нафталиновый остов под действием заместителей утрачивает плоское строение. Атомы С1 и С5, связанные с $-\text{N}(\text{CH}_3)_2$ и $-\text{SO}_2\text{NH}_2$ группой, заметно выходят из плоскости остова.

Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф. Н. И. Гиричевой.

Я. М. МАЛКОВА

Ивановский государственный университет

ЭЛЕКТРОНОГРАФИЧЕСКОЕ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЫ 1,5-НАФТАЛИНДИСУЛЬФОНИЛХЛОРИДА (1,5-НАФДСХ)

Выполнено электронографическое исследование геометрического строения молекулы 1,5-НафДСХ. Молекула 1,5-НафДСХ (рис. 1) имеет две нежесткие координаты, связанные с внутренним вращением групп SO_2Cl вокруг связей С-С. Для определения конформационных свойств были рассчитаны ПФВВ группы SO_2Cl вокруг связи С-С. При этом торсионный угол $\phi(\text{C}-\text{C}-\text{S}-\text{Cl})$ менялся с шагом 10° . Все остальные геометрические параметры, в том числе и торсионный угол, характеризующий вращение второй сульфогруппы, оптимизировались. На рис. 2 показаны функции $U(\text{C}-\text{S}-\text{Cl})$ для молекул 1,5-НафДСХ.

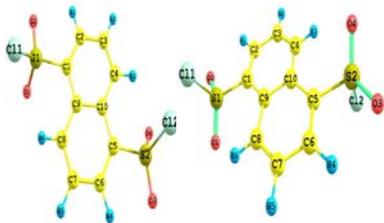


Рис. 1 Конформеры молекулы 1,5-НафДСХ (син- и анти-конформеры).

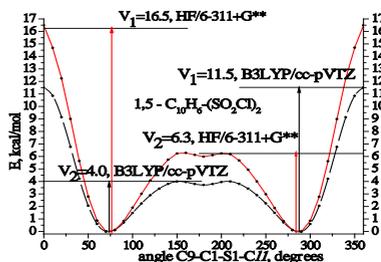


Рис. 2. Потенциальные функции внутреннего вращения (ПФВВ, методы HF/6-311+G** и B3LYP/cc-pVTZ) SO_2Cl группы молекулы 1,5-НафДСХ.

В молекуле 1,5-НафДСХ имеются син- и анти-конформеры, в первом из которых связи S-Cl расположены по одну сторону

нафталинового остова, во втором – над и под нафталиновым остовом. Эти конформеры имеют близкие энергии (чуть более низкую энергию имеет *син*-конформер) и различие в свободной энергии Гиббса (метод V3LYP/сс-рVTZ) составляет $\Delta G_{I-II}=0.009$ ккал/моль. Рассчитанное по величине ΔG_{I-II} содержание в парах *син*- и *анти*-конформеров составляет 0.503 и 0.497 моль. %, соответственно. Основные расчетные и экспериментальные геометрические параметры молекулы 1,5-НафДСХ хорошо согласуются между собой.

Работа поддержана грантами DFG OB 28/22-1 и РФФИ 12-03-91333-ННИО а.

*Работа выполнена под руководством канд. хим. наук, доц.
В. М. Петрова*

И. А. МЕНЬШИКОВА, М. С. ФЕДОРОВ
Ивановский государственный университет

ЭЛЕКТРОННЫЕ ЭФФЕКТЫ И ГРУППОВАЯ ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНОСТЬ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ В МОЛЕКУЛАХ БЕНЗОЛСУЛЬФОКИСЛОТ

Настоящая работа посвящена изучению структуры молекул замещенных бензолсульфоновой кислоты (БСК) и анализу изменений электронных характеристик молекулы под действием электронодонорного (CH_3) и электроноакцепторного (NO_2) заместителей. В данной работе с помощью НВО-анализа нами сделана попытка выделить вклады от отдельных электронных эффектов заместителей в молекулах замещенной БСК. Причем, в качестве количественных характеристик, отражающих значимость эффекта, были использованы энергии донорно-акцепторного взаимодействия орбиталей заместителя с бензольным кольцом. При взаимодействии заместителя с бензольным кольцом возможно проявление двух основных электронных эффектов: индукционного (I) и эффекта сопряжения (C). В соответствии с общепринятыми обозначениями –I и –C эффекты характеризуют электроноакцепторные свойства заместителей, а +I и +C - электронодонорные свойства.

Нами выявлено, что существует явная корреляция между значениями электроотрицательности (ЭО) заместителей, найденной по изменению геометрических параметров бензола под влиянием заместителя, и такими электронными характеристиками как ΣE (общий эффект заместителя) в молекулах монозамещенных бензола $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$, $\text{C}_6\text{H}_5\text{SO}_3\text{H}$ и $\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2$. При наличии двух заместителей

разной природы как в 4-МБСК происходит увеличение донорных свойств донорного заместителя (CH_3) и увеличение акцепторных свойств акцепторного заместителя (SO_3H). При наличии двух электроноакцепторных заместителей в *мета*-положении, как в 3-НБСК, акцепторные свойства обоих заместителей незначительно понижаются по сравнению с соответствующими монозамещенными бензола. Если же заместители находятся в *орто*-положении друг к другу, как в молекулах 2-НБСК и 2,4,6-триНБСК, то ситуация резко меняется. В последних двух молекулах сульфогруппа под влиянием сильных электроноакцепторных орто-заместителей NO_2 утрачивает электроноакцепторные свойства и в 2,4,6-триНБСК становится электронодонором по отношению к бензольному кольцу, вследствие чего ее ЭО должна сильно понизиться.

Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф. Н. И. Гиричевой, д-ра хим. наук, проф. С. Н. Иванова.

О. Н. НЕМАНОВА, И. В. ТЕРЕХОВА
Ивановский государственный университет
Институт химии растворов им. Г.А. Крестова

ИЗУЧЕНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ПОЛУЧЕНИЯ КАПСУЛИРОВАННЫХ ФОРМ ВИТАМИНОВ ГРУППЫ В

В настоящее время капсулированные формы лекарственных препаратов и биологически активных соединений становятся более популярными и востребованными в фармацевтике. Преимуществами капсуляции являются: возрастание растворимости и скорости растворения; увеличение биодоступности; повышение стабильности; улучшение переносимости и снижение риска побочного действия препарата. Циклодекстрины, циклические олигосахариды природного происхождения, являются подходящими инкапсулирующими материалами, т.к. не проявляют токсичности и способны образовывать комплексы включения с различными органическими соединениями. В связи с этим, цель исследования состояла в выявлении возможности получения микрокапсул никотиновой и пара-аминобензойной кислот (витамины B_3 и B_{10} , соответственно) на основе циклодекстринов.

В настоящей работе представлены результаты термодинамического исследования комплексообразования гидроксипропилированного γ -циклодекстрина (ГП- γ -ЦД) с никотиновой и пара-аминобензойными кислотами в воде при 298.15 К. На основе полученных данных обнаружено, что ГП- γ -ЦД

избирательно взаимодействует с рассматриваемыми кислотами, отдавая предпочтение связыванию с пара-аминобензойной кислотой. В этом случае происходит образование достаточно устойчивых комплексов ($\lg K=4$) состава 1:2, и процесс характеризуется отрицательными изменениями энтальпии и энтропии. Вероятно, включение двух молекул кислоты в полость ГП- γ -ЦД осуществляется посредством вандерваальсовых взаимодействий и возможного образования водородных связей. Отсутствие комплексообразования с никотиновой кислотой определяется ее цвиттерионным строением в водном растворе и сильной гидратацией, которая осложняет связывание с ГП- γ -ЦД.

Таким образом, проведенное исследование продемонстрировало, что ГП- γ -ЦД является подходящим инкапсулирующим агентом только для витамина В₁₀.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (соглашение № 8839).

Е. В. НИКИТИНА

Ивановский государственный университет

РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ АЛИФАТИЧЕСКИХ АМИНОВ В АРЕНСУЛЬФОНИЛИРОВАНИИ

Реакции ацильного переноса - это большая группа процессов, широко применяемых в органическом синтезе. Реакции N-ацилирования аминов могут рассматриваться в качестве модельных при оптимизации технологии синтеза биологически активных веществ, а также при исследовании процессов, протекающих в живой природе. Морфолин и пиперидин, обладающие свойствами вторичных аминов, входят в виде структурных фрагментов в большое число биологически активных веществ. Препараты на их основе, в том числе сульфамиды, используются в качестве анестезирующих, бактерицидных средств, ветеринарных препаратов, пестицидов и т.д. Кинетика ацилирования алифатических аминосоединений в водно-органических растворителях изучена недостаточно, что связано с высокими скоростями реакций, а также с гидролизом ацилирующих агентов в растворителях, содержащих воду.

В данной работе изучена реакционная способность морфолина и пиперидина с 4-толуолсульфонилхлоридом (4-ТСХ) и бензолсульфонилхлоридом (БСХ) в растворителе вода – 1,4-диоксан с

содержанием воды 40 мас. % в политермических условиях. В качестве исходных реагентов использовали соли: ацетаты морфолина и пиперидиния. Концентрация реакционноспособных форм изученных соединений определялась существующим в растворе равновесием между протонированным и непротонированным амином. Постоянное значение pH среды поддерживали, используя ацетатный буфер. Для установления механизма реакции морфолина с БСХ было выполнено квантово-химическое моделирование 3-х мерной поверхности потенциальной энергии (ППЭ) указанной реакции в газовой фазе. Расчеты проводились с помощью программного пакета Firefly 7.1.G методом RHF/6-31G*.

В результате проведенного исследования установлено, что константы скорости k_{ac} реакций пиперидина и морфолина с БСХ выше, чем с 4-ТСХ, а константы скорости аренсульфонирования морфолина существенно ниже, чем k_{ac} пиперидина. Установленные факты согласуются с имеющимися в литературе данными о реакционной способности указанных соединений в ацилировании. Квантово-химическое моделирование реакции морфолина с БСХ в газовой фазе показало, что реакция протекает в одну стадию, по бимолекулярному согласованному механизму S_N2 .

Работа выполнена под руководством канд. хим. наук, доц. Н. В. Калининой

М. Г. ПАЙКОВА

Ивановский государственный университет

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМА АЦИЛИРОВАНИЯ п-АМИНОБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ

Исследование механизмов реакций алифатических и ароматических аминокислот с различными ацилирующими агентами: ангидридами карбоновых и сульфоновых кислот, сложными эфирами необходимо для понимания механизмов образования пептидной связи в живом и оптимизации условий синтеза продуктов N-ацилирования и N-аренсульфонирования.

С целью изучения влияния строения ацилирующего агента на механизм процесса методом RHF/6-31G* проведено квантово-химическое моделирование механизма реакций п-аминобензойной кислоты (п-АБК) с бензоилхлоридом (БХ), бензолсульфонилхлоридом (БСХ) и фениловым эфиром бензойной кислоты (ФЭБК) в газовой фазе. Построены фрагменты трехмерных поверхностей потенциальной

энергии (ППЭ) реакций в координатах расстояния между атомами, образующими связь в продукте: азота п-АБК и углерода хлорангидридной группы БХ или карбоксильной группы ФЭБК, или серы сульфонилхлоридной группы, а также угла атаки нуклеофила – п-АБК хлорангидридную, карбоксильную или сульфонилхлоридную, группу.

Анализ результатов моделирования показал, что все изученные процессы протекают в одну стадию; на всех ППЭ имеется единственная седловая точка, соответствующая переходному состоянию реакции, на маршруте отсутствуют минимумы, соответствующие образованию интермедиатов, что указывает на протекание реакции по бимолекулярному согласованному механизму. Маршрут реакции изменяется в зависимости от использованного ацилирующего агента.

Рассчитаны структурные параметры активированных комплексов реакций. Произведена оценка энергий активации реакций.

Результаты расчетов сопоставлены с данными, полученными ранее, для газофазных реакций аминосоединений с сульфонилхлоридами и сложными эфирами, а также с кинетическими данными ацилирования п-АБК.

Работа выполнена под руководством канд. хим. наук, доц. Л. Б. Кочетовой

Ю. П. РОССИНИ, Н. М. СИДОРОВА
Ивановский государственный университет

ГИДРОДЕГАЛОИДИРОВАНИЕ ГАЛОГЕНАРИЛОВ В ПРИСУТСТВИИ ПАЛЛАДИЕВЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ

Изучен процесс гидрогенизационного дегалоидирования (ГДГ) хлорбензола, бромбензола, йодбензола и изомерных дихлорбензолов (*о*-ДХБ, *м*-ДХБ и *п*-ДХБ) в присутствии палладиевых катализаторов на основе активированного угля и наноалмазов (Pd/C и Pd/НА соответственно) с массовым содержанием металла 1% и 6% (условия реакции: $P_{H_2}=1$ атм., $T=45^\circ\text{C}$, 1 ммоль субстрата, 15 мл этанола).

В присутствии катализатора 6% Pd/НА наблюдается снижение скорости реакции ГДГ в ряду хлорбензол > бромбензол > йодбензол, причем на порядок для последнего галогенарила.

Для дихлорбензолов скорость реакции ГДГ снижается в ряду: *п*-ДХБ > *о*-ДХБ > *м*-ДХБ. Каталитическая активность Pd/НА на порядок

выше, по сравнению с традиционным Pd/C. Согласно данным анализа продуктов реакций, полученных методом газожидкостной хроматографии, в случае *o*-, *m*-, *n*-ДХБ продуктом ГДГ является хлорбензол, который далее не дегалоидируется, по-видимому, из-за контакта с образующимися в ходе реакции хлорид-ионами, которые могут взаимодействовать с палладием, переводя его из рабочего состояния Pd⁰ в окисленное Pd²⁺, неспособное активировать водород, и реакция прекращается. В связи с этим проведено изучение влияния добавки разного количества NaOH для связывания хлорид-ионов, которое показало, что при добавлении NaOH к реакционной смеси активность катализаторов возросла. Наибольшая скорость реакции ГДГ *n*-ДХБ в присутствии 1% Pd/C достигается при добавлении 2 ммоль NaOH. В случае реакции ГДГ хлорбензола оптимальным количеством щелочи является 1.5 ммоль. При этом наиболее активным катализатором в ГДГ изомеров ДХБ так же оказался 1% Pd/HA, а наименьшую активность имеет 1% Pd/C. Однако добавление NaOH является недостаточным условием для протекания реакции до конца.

Работа включена в Программу "Научно-исследовательские работы ФГБОУ ВПО "Ивановский государственный университет", проводимые в рамках государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации", поддержана внутренним грантом ИвГУ "Развитие научно-исследовательской и инновационной деятельности молодых преподавателей, сотрудников, аспирантов и студентов на 2012–2013 гг." и грантом РФФИ № 12-03-97546-р_центр_а.

Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф. М. В. Клюева, канд. хим. наук Н. А. Магдалиновой.

Ю. В. СОБОЛЕВА

Ивановский государственный университет

ИЗУЧЕНИЕ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ ПРИ ТЕРМИНАЛЬНОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ДВУХ МОЛЕКУЛ ПЕНТИЛОВОГО ЭФИРА *n*-(N-ГЛЮКОЗИЛИДЕН)АМИНОБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ

Нековалентные межмолекулярные взаимодействия, в том числе и водородные связи, оказывают существенное влияние на самоорганизацию молекул, на упорядочение молекул в мезофазе.

Целью настоящей работы стало моделирование димера пентилового эфира *n*-(N-глюкозилиден)аминобензойной кислоты

(терминальная конфигурация), оценка энергии взаимодействия и ее составляющих.

Оптимизация геометрии димера выполнялась методом DFT/6-31G, а расчет энергии взаимодействия и ее декомпозиция были проведены по методу Морокумы HF/6-31G (PC GAMESS).

Энергия взаимодействия молекул в димере, число и длина межмолекулярных водородных связей

Энергия взаимодействия (ΔE) и её компоненты, ккал/моль					Число межмолекулярных Н-связей и их длина
E_{es}	E_{ex}	E_{pl}	E_{ct}	E_{mix}	
$\Delta E = -24.23 (-21.04)^*$					Молекулы связаны 2 водородными связями 1.62 Å 1.62 Å
-43.65	37.98	-6.28	-11.03	-1.24	

*в скобках приведено значение энергии взаимодействия с учетом BSSE

Наибольшие вклады в ΔE двух молекул дают энергия притяжения (E_{es}) и обменная энергия (E_{ex}). Эти составляющие имеют близкие значения, но разную направленность. Поэтому и вклад других компонентов (поляризационной энергии, энергии переноса заряда и энергии смешивания) является существенным.

Молекулы пентилового эфира п-(N-глюкозилиден)-аминобензойной кислоты при терминальном взаимодействии связаны двумя сильными водородными связями (~ 10.52 ккал/моль).

Работа выполнена в рамках Проекта Министерства образования и науки «Синтез и исследование свойств практически значимых аминов и их функциональных производных с использованием катализаторов на основе углеродных наноматериалов» в УНК «Химическая физика».

Работа выполнена под руководством канд. хим. наук, доц. Т. Г. Волковой.

В. Н. СОЛОВЬЕВ, Е. В. ЯШКОВА
Ивановский государственный университет

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ВЛАГИ
В МЕТАЛЛОПОЛИМЕРНОМ НОСИТЕЛЕ
КАТАЛИЗАТОРА АВ-17-8-PD
ГРАВИМЕТРИЧЕСКИМ МЕТОДОМ**

В работе обсуждается содержание влаги в металлополимерном катализаторе АВ-17-8-Pd. Наличие металла незначительно снижает содержание воды. В работе представлены результаты, по удалению воды из катализатора, методом прокаливания его в сушильном шкафу при температуре 105 ± 10 °С. Были проведены исследования влагосодержания в катализаторе и полимерной матрице на дериватографе системы F.Paulik, J.Paulik, L.Erdey (Венгрия). Согласно ГОСТу 5-1342-12 влагосодержание в ионообменной смоле АВ-17-8 в хлор форме колеблется от 40-60%. Ее количество можно понизить промывая ацетоном, либо прокаливая в сушильном шкафу при $T=100$ °С. Данных по влагосодержанию на катализаторе АВ-17-8-Pd в литературе отсутствуют. В работе обсуждаются результаты ионообменников с различными ПИ, полученные при гравиметрическом анализе. Данные показывают, что при смене ПИ влагосодержание в «воздушно-сухой» смоле меняется от 7% (Г) до 25% (F). Во время хранения влагосодержание ионообменных смол возрастает (так для CH_3COO^- влагосодержание 15%, а при хранении 3-4 недели 20%). Таким образом, было изучено и обсуждается содержание влаги ионообменной смолы с 10 различными ПИ. Максимальная скорость удаления влаги в ходе термогравиметрического анализа для ионообменников с различными ПИ укладывается в интервале от 91,5 до 146. Таким образом, выдерживание ионита в сушильном шкафу 105 ± 10 °С в течение одного часа позволяет удалить влагу из металлополимерного катализатора АВ-17-8-Pd. Активность катализатора проверялась на реакции гидрирования нитробензола.

*Работа выполнена под руководством канд. хим. наук, доц.
А. А. Насибулина.*

М. С. ФЕДОРОВ

Ивановский государственный университет

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ ПАРА-МЕТИЛ- И МЕТА- НИТРОБЕНЗОЛСУЛЬФОКИСЛОТЫ

Проведено исследование строения молекул параметил-бензолсульфокислоты (4-МБСК) и мета-нитробензолсульфокислоты (3-НБСК) методом газовой электронографии и квантовой химии (B3LYP/сс-pVTZ, MP2/сс-pVTZ), а также исследование процессов фрагментации молекул под действием электронного удара методом масс-спектрометрии.

На основании анализа масс-спектрометрических данных было установлено, что исследуемые замещенные бензолсульфокислоты являются термостабильными, по крайней мере, до температуры эксперимента 431 (3) К. Были проанализированы особенности фрагментации молекул 3-НБСК и 4-МБСК под действием электронного удара.

Квантово-химические расчеты показали, что молекула 4-МБСК существует в виде пары энантиомеров, которые образуются в результате вращения группу -ОН вокруг связи S-O. Молекула 3-НБСК имеет два конформера с различной ориентацией связи O-H относительно нитро-группы, причем каждому конформеру соответствует энантиомер, образующийся при вращении группы -SO₃H вокруг связи C-S. Равновесные конфигурации обеих молекул обладают сходными структурами: связь O-H заслоняет одну из S=O связей. Экспериментальные значения некоторых межъядерных расстояний для 4-МБСК/3-НБСК (Å): $r_{\text{H1}}(\text{C-C})_{\text{cp}} = 1.403(3)/1.395(4)$, $r_{\text{H1}}(\text{C-S}) = 1.765(5)/1.784(5)$, $r_{\text{H1}}(\text{S=O})_{\text{cp}} = 1.433(4)/1.438(4)$, $r_{\text{H1}}(\text{S-O}) = 1.618(4)/1.620(4)$.

Рассчитаны потенциальные функции внутреннего вращения групп -SO₃H, -ОН, -CH₃ и -NO₂, а также были определены переходные состояния между энантиомерами (конформерами). Определено влияние природы заместителя на геометрические параметры молекул, а также на энергии граничных орбиталей и окислительно-восстановительные свойства соединений. На основании результатов НВО-анализа были оценены индуктивные и мезомерные эффекты заместителей. Показана корреляция между групповой электроотрицательностью и суммарными энергетическими характеристиками индуктивных и мезомерных эффектов заместителей.

Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф. Н. И. Гиричевой.

А. В. ЧИПУРИНА

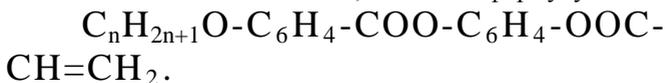
Ивановский государственный университет

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АКРИЛОИЛОКСИФЕНИЛОВЫХ ЭФИРОВ П-Н- АЛКИЛОКСИБЕНЗОЙНЫХ КИСЛОТ

На основе жидкокристаллических полимеров создаются новые тонкопленочные оптические материалы и электрически управляемые среды для записи и отображения информации, а также сверхпрочные синтетические волокна и самоармированные пластики.

Одними из перспективных мономеров для создания материалов подобного типа являются мезоморфные соединения, молекулы которых содержат акриловые фрагменты.

Исходя из вышесказанного, в качестве объектов исследования были выбраны потенциально мезоморфные соединения с активными терминальными заместителями – 4-акрилоилоксифениловые эфиры-4'-н-алкилоксибензойных кислот, имеющих формулу:



В работе были получены температурные зависимости диэлектрической проницаемости и удельной электропроводности гомологов с $n=3, 5, 8$.

Температурные зависимости диэлектрической проницаемости получали методом диэлькометрии. Погрешность определения диэлектрической проницаемости составила ± 0.01 .

Установлено, что все исследуемые мезогены обладают отрицательной диэлектрической анизотропией. Наибольшее значение диэлектрической анизотропии имеет 4-акрилоилоксифениловый эфир-4'-н-пропилоксибензойной кислоты.

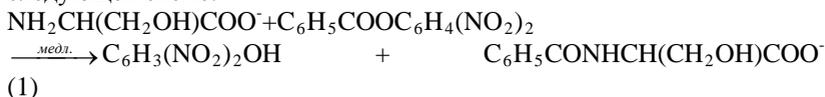
Показано, что исследуемые нематогены имеют значения анизотропии удельной электропроводности меньше единицы. Для 4-акрилоилоксифенилового эфира-4'-н-пропилоксибензойной кислоты при приближении к фазовому переходу из нематической фазы в кристаллическую анизотропия удельной электропроводности принимала значения больше 1, что свидетельствует о наличии областей со смектическим упорядочением.

Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф. С. А. Сырбу (ИвГУ) и д-ра хим. наук С. А. Кувшиновой (ИГХТУ).

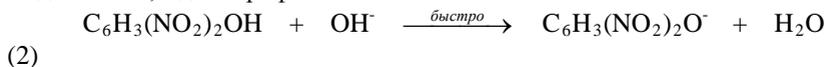
Ю. П. ШИШКИНА
Ивановский государственный университет

ИЗУЧЕНИЕ КИНЕТИКИ N-АЦИЛИРОВАНИЯ L-СЕРИНА СЛОЖНЫМ ЭФИРОМ В ВОДНО-ОРГАНИЧЕСКОМ РАСТВОРИТЕЛЕ

Данная работа является продолжением многочисленных исследований по установлению кинетических закономерностей влияния строения реагентов и состава водно-органического растворителя на кинетические параметры реакции N-ацилирования α -аминокислот сложным эфиром. Кинетику реакции изучали спектрофотометрическим методом с помощью фотоэлектроколориметра КФХ-УХЛ-4,2, снабженный термостатируемым кюветодержателем и цифровым вольтметром Ц-300 при рабочей длине волны 400 нм. Реакцию проводили при значительном избытке α -аминокислоты (в 10^2 - 10^3 раз) по сравнению с концентрацией сложного эфира. Мольная доля воды в органическом растворителе составляла от 0,6 до 0,95. В качестве примера представлена реакция L-серина с 2,4-динитрофениловым эфиром бензойной кислоты, которая протекает по следующей схеме:



В ходе реакции (1) раствор окрашивается в желтый цвет по мере выделения 2,4-динитрофенолят иона:



Расчет констант скорости первого порядка k_1 выполняли методом Гуггенгейма, расчет константы скорости второго порядка (k) проводили по уравнению:

$$k = k_1 / C. \quad (3)$$

где C - концентрация анионной формы α -аминокислоты.

Был получен большой блок экспериментальных данных. Из которых видно, что по мере увеличения процентного содержания воды в растворителе константы N-ацилирования растут. Подобные зависимости были получены ранее.

*Работа выполнена под руководством канд. хим. наук, доц.
Ю. С. Дорофеевой.*

Н. Ю. ШУМИЛОВА

Ивановский государственный университет

**ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ
АМПИЦИЛЛИНА С ИОНОМ СО(II) В ВОДНОМ РАСТВОРЕ
ПОТЕНЦИОМЕТРИЧЕСКИМ МЕТОДОМ**

Было обнаружено, что ампициллин образует как моно-, так и билигандные комплексы с катионом Со(II). Обработку данных потенциометрических измерений проводили по программе РНМЕТР, предназначенной для расчета констант равновесия по измеренным равновесным концентрациям какой-либо одной частицы в растворе. В качестве базисных частиц были выбраны Co^{2+} , Amp^- , H^+ . В результате исследования было изучено комплексообразование ампициллина с кобальтом (II) потенциометрическим методом.

Равновесие	$\text{Lg}\beta$ потенциометрическим методом	$\text{Lg}\beta$ (справочник)
$\text{Co}^{2+} + \text{Amp}^- = \text{CoAmp}^+$	$4,52 \pm 0,16$	$4,6 \pm 0,3$
$\text{Co}^{2+} + 2\text{Amp}^- = \text{CoAmp}_2^+$	$3,93 \pm 0,18$	
$\text{CoAmp} + \text{OH}^- = \text{CoAmpOH}$	$9,76 \pm 0,8$	

*Работа выполнена под руководством канд. хим. наук, доц.
Т. Б. Хоченковой.*

**ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ РАБОТА ШКОЛЬНИКОВ В РАМКАХ
ПРОФИЛЬНОЙ ШКОЛЫ «ХИМИЯ ДЛЯ ЛЮБОЗНАТЕЛЬНЫХ»**

Так называется проект Ивановского государственного университета, представленный на 4-й Конкурс образовательных проектов для школьников, проведенный в 2013 г. Фондом Д. Зимина «Династия» при поддержке фонда «Современное Естествознание». На конкурс было подано 156 заявок от образовательных учреждений всей России, в число победителей вошло 44 проекта из 12 регионов, в том числе и наш. Это уже вторая победа Ивановского государственного университета в подобных конкурсах Фонда «Династия», впервые мы участвовали (и победили) в конкурсе в 2011 г.

Исследовательская работа школьников по химии под руководством ведущих ученых-химиков ИвГУ стала новым направлением работы профильной школы (ПШ) «Химия для любознательных». Организация исследовательской работы школьников представляется важной с трех точек зрения. Во-первых, такой вид деятельности позволяет расширить и углубить систему непрерывной дополнительной профильной подготовки школьников г. Иванова и Ивановской области по химии, созданную и реализуемую в нашем университете с 2009 года. Во-вторых, работа со школьниками является хорошей педагогической практикой для наших студентов старших курсов – членов научно-образовательного общественного объединения студентов (НООС) биолого-химического факультета. Работа в творческих научных коллективах, в состав которых входят ведущие преподаватели вуза – руководители научных направлений, аспиранты, студенты и школьники, является, безусловно, полезной и плодотворной для каждого из участников такого коллектива. В-третьих, сетевое взаимодействие нашего вуза со школами региона позволит создать все необходимые условия для реализации непрерывной образовательной траектории для молодежи Ивановской области: школьник – студент (бакалавр, специалист, магистр) – аспирант – молодой ученый – докторант – исследователь-профессионал.

В ближайших планах ПШ организация исследовательской работы школьников по следующим направлениям (в скобках указан руководитель направления): катализ на металлополимерных и наноструктурированных катализаторах (проф. Ключев М. В.);

теоретическое исследование структуры органических и неорганических молекул методами компьютерной химии (проф. Гиричева Н. И.); исследование природных объектов (проф. Кустова Т. П.); жидкие кристаллы (проф. Сырбу С. А.).

В настоящий сборник включены тезисы исследовательских работ, выполненных школьниками совместно со студентами в текущем учебном году. Это во многом «проба пера», я уверена, что данные исследования получат продолжение и будут более полно представлены на конференции «Юная наука в классическом университете», которую мы планируем провести во время осенней сессии ПШ в ноябре 2013 г.

Мы выражаем глубокую признательность Фонду Д. Зимина «Династия» и Фонду «Современное Естествознание» за финансовую поддержку нашей работы.

Д-р хим. наук, проф. Т. П. Кустова

А. В. АНДРЕЕВА, И. Е. КОРШУНОВА
МСОШ № 2 г. Тейкова,
П. А. КАЛМЫКОВ
Ивановский государственный университет

ПРИГОТОВЛЕНИЕ КАТАЛИЗАТОРА ГИДРИРОВАНИЯ НА ОСНОВЕ ПАЛЛАДИЙСОДЕРЖАЩЕГО ВОССТАНОВЛЕННОГО ОКСИДА ГРАФЕНА

В последнее время особое внимание уделяется различным углеродным наноматериалам, поскольку они могут обладать уникальными свойствами как химическими, так и физическими. Одним из таких материалов является графен. Однако на сегодняшний день нет доступных методов синтеза граммовых количеств этого вещества из-за высокой стоимости и дефектности получаемых структур. Альтернативным материалом со схожими характеристиками может послужить, так называемый, восстановленный оксид графена (ВОГ), благодаря более простому методу синтеза из графита, который включает в себя 3 стадии: окисление → обработка ультразвуком (УЗ) → восстановление. Этот материал обладает высокой удельной поверхностью порядка 600 м²/г. Палладийсодержащий ВОГ получен методом восстановления из раствора PdCl₂ в 1N соляной кислоте гидразином и высушен при температуре 50-60 °С. В итоге материал представлял собой агломераты черного цвета размером 0.1 – 5 мм.

Чтобы опробовать полученный катализатор в модельных реакциях гидрирования в мягких условиях (45 °С, этанол), необходимо его диспергировать до монослоев с помощью УЗ. УЗ-обработка дает возможность получать устойчивые дисперсии в различных растворителях: вода, этанол и др. Образующиеся в процессе обработки кавитационные пузырьки могут проникать вовнутрь стопок ВОГ, в пространство между отдельными слоями. При «схлопывании» пузырьков образуются вторичные ударные волны, под действием которых происходит разрыв связей между слоями. Полученная суспензия устойчива к седиментации в течение суток.

Дальнейшая работа заключается в исследовании полученной каталитической суспензии в модельных реакциях гидрирования нитробензола, аллилового спирта и циклогексена в мягких условиях.

Авторы работы выражают благодарность С. А. Баскакову (ИПХФ РАН, г. Черноголовка), И. Е. Кузнецову (ИвГУ) за предоставленный образец наладийсодержащего ВОГ.

М. М. БАЙДА, А. В. ВЕРЕТЕННИКОВА
МБОУО лицей № 22, г. Иваново

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЙОДНОГО И КИСЛОТНОГО ЧИСЕЛ РАСТИТЕЛЬНЫХ МАСЕЛ

По химической структуре растительные масла представляют собой сложные эфиры трехатомного спирта глицерина и высших непредельных карбоновых кислот, чаще всего олеиновой, линолевой и линоленовой. Об особенностях их структуры (например, о степени ненасыщенности) и о наличии посторонних примесей (продуктов гидролиза, в первую очередь свободных жирных кислот) можно судить, экспериментально определив так называемые «жировые числа»: йодное число (ИЧ), кислотное число (КЧ) и число омыления (ЧО).

В настоящей работе представлены результаты определения ИЧ и КЧ коллекции растительных масел, в которую вошли следующие образцы: подсолнечные рафинированные масла «Идеал», «Кубанское любимое», «Золотая семечка», «Злато»; подсолнечное нерафинированное масло (разливное); оливковое масло “Maestro de Oliva”; масло из виноградной косточки.

Йодное число измеряется количеством граммов йода, которое присоединяется к 100 г жира, и определяет степень ненасыщенности жира, т.к. непредельные кислоты в составе жиров легко присоединяют

два атома йода по месту разрыва каждой двойной связи. Норма ИЧ для растительных масел составляет от 100 до 200. ИЧ, определенные нами для подсолнечных масел «Идеал» (ИЧ = 20,6) и «Кубанское любимое» (ИЧ = 4,3), оказались существенно ниже этой нормы, что говорит о низкой степени ненасыщенности и ненадлежащем качестве этих масел.

Кислотное число характеризует наличие в жире свободных жирных кислот (кислотность жира) и измеряется количеством миллиграммов КОН, необходимого для нейтрализации этих кислот. Норма КЧ для растительных масел составляет до 20 единиц. Образцы исследованных нами масел показали довольно низкие величины КЧ: от 1,7 (масло «Злато») до 6,6 («Кубанское любимое»). Низкое значение КЧ соответствует хорошему качеству масла. Очевидно, такое масло приготовлено из зрелых семян. Высокое значение КЧ наблюдается у растительных масел из незрелых или долго хранившихся семян.

В дальнейшем мы планируем увеличить количество образцов растительных масел для анализа и определить, как влияют условия хранения масла (температура, освещенность и время хранения) на показатели их качества.

Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф. Т. П. Кустовой

Л. А. ГЛАЗУНОВА, П. С. ШЛЫКОВА, Д. С. МОТОРИНА
МБОУО гимназия № 32 г. Иваново,
О. Ю. ДИЦИНА
Ивановский государственный университет

КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВИТАМИНА С В РАЗЛИЧНЫХ ПРОДУКТАХ И ВЛИЯНИЕ НА ЕГО СОДЕРЖАНИЕ СОКА ОГУРЦА

Данная работа заключалась в количественном определении витамина С в таких продуктах питания, как яблоко, лук, капуста, квашенная капуста и влияние на витамин, содержащийся в этих продуктах, сока огурца.

Витаминами называют низкомолекулярные органические соединения, необходимые для нормальной жизнедеятельности организмов. Витамин С (аскорбиновая кислота) относится к группе водорастворимых витаминов. Суточная потребность человека в витамине С составляет для взрослых 10–100 мг, для детей – до 50 мг.

Если в пище отсутствует один из витаминов, развивается авитаминоз, если происходит недостаточное поступление витаминов в организм – гиповитаминоз, избыток витаминов – гипервитаминоз.

Так как исследуемые продукты были куплены в магазине, для нас представлял большой интерес ответ на вопрос: достаточно ли в них витамина С?

Капусту заквашивали непосредственно перед экспериментом, для этого ее натерли на терке, перемешивали с большим количеством соли и оставляли на некоторое время под небольшим нагревом. Остальные продукты натерли на терке, затем каждый растирали в отдельно взятой фарфоровой ступке с кварцевым песком до однородной массы. Потом добавляли 2%-ный раствор HCl и перемешивали. Эту смесь отфильтровывали через бумажный фильтр.

С фильтратом выполняли качественную реакцию на витамин С. Для этого в несколько пробирок наливали по 10 капель 0,01 %-го раствора 2,6-дихлорфенолиндофенола (темно-синего цвета) и по каплям добавляли фильтрат. Жидкости в присутствии витамина С обесцвечивались, что указывает на присутствие в исследуемых образцах витамина С.

Далее выполняли количественный анализ витамина С в продуктах. Для этого пипеткой брали 3 мл фильтрата и титровали его 0,001N раствором 2,6-дихлорфенолиндофенола до слабого розового окрашивания. То же самое проделывали снова, но с добавлением в каждую ступку с натертым продуктом сока огурца.

Выполненный нами расчет показал, что во всех взятых нами продуктах содержание витамина С соответствует норме, следовательно, продукты, купленные в магазине, ничем не хуже домашних по содержанию в них данного витамина. При добавлении же сока огурца содержание в продуктах аскорбиновой кислоты заметно снижалось.

Работа выполнена под руководством канд. хим. наук, доц. А. А. Насибулина

П. С. ШЛЫКОВА, Д. С. МОТОРИНА, Л. А. ГЛАЗУНОВА
МБОУО гимназия № 32 г. Иваново,
О. Ю. ДИЦИНА
Ивановский государственный университет

ИССЛЕДОВАНИЕ СИНТЕТИЧЕСКИХ МОЮЩИХ СРЕДСТВ

Моющие средства (детергенты) – вещества, усиливающие моющее действие воды. Первыми детергентами были мыла, полученные из веществ, встречающихся в природе. Но сейчас под детергентами обычно понимают синтетические вещества, по моющему

действию сходные с мылом. Синтетические моющие средства (СМС) широко используются в быту.

Имеющиеся в продаже моющие средства редко представляют собой чистые вещества. Обычно они содержат и другие компоненты, например, смягчители воды и отбеливатели, которые увеличивают их эффективность. Наиболее распространены три вида смесей-детергентов: мыло, стиральный порошок и жидкие моющие средства – гели и шампуни.

Исследование заключалось в определении растворимости, плотности, вязкости и рН растворов взятых нами моющих средств. Всего было изучено 11 образцов: стиральные порошки («Лотос», «Денни», «Дося»), жидкое мыло «Марка», средства для чистки окон и предметов мебели («Окноль», «Чистил», «Мистер Пропер»), средства для мытья посуды («Фейри», «Капля – суперсвежесть», «Капля – лесные ягоды», «Пемолукс»).

Растворимость определяли визуально, при этом было установлено, что порошкообразные моющие средства растворяются в воде гораздо хуже, чем, например, гелеобразные или жидкие.

рН определяли сначала с использованием лакмусовой бумажки, а затем на приборе – лабораторном иономере И-160М. Лакмусовая бумажка позволяет установить диапазон рН (не очень точно), иономер показал, что величина рН исследованных СМС изменяется в интервале 8,89–11,10, что соответствует щелочной среде.

Вязкость определяли по времени истечения насыщенных растворов СМС через капилляр одинакового диаметра. Более вязкими оказались растворы порошкообразных моющих средств по сравнению с жидкими. Наиболее высокая плотность также была обнаружена у насыщенных растворов порошкообразных детергентов.

Работа выполнена под руководством канд. хим. наук, доц. А. А. Насибулина

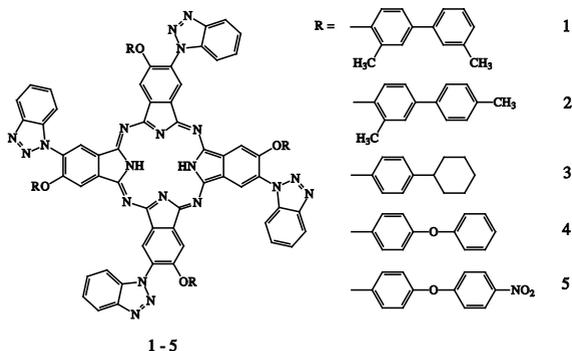
*Н. В. БУМБИНА, **С. А. ЗНОЙКО

*Ивановский государственный университет

**Ивановский государственный химико-технологический университет

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
И ПРОГНОЗ МЕЗОМОРФИЗМА
СМЕШАННОЗАМЕЩЕННЫХ ФТАЛОЦИАНИНОВ
НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПАРАМЕТРОВ**

Целью данной работы является установление применимости метода прогнозирования мезоморфизма с помощью молекулярных параметров к новой серии производных фталоцианина, сочетающих на периферии арилокси- и бензотриазолильные заместители (**1 – 5**).



В настоящей работе проведено предварительное построение молекулярных моделей смешаннозамещенных безметалльных фталоцианинов, сочетающих на периферии фрагменты бензотриазола и арилокси группы. Использован пакет программ HyperChem с применением метода молекулярной механики (ММ⁺). С целью прогнозирования термотропного мезоморфизма осуществлен расчет и анализ молекулярных параметров. Прогноз показал, что соединение **5** может проявлять мезоморфизм, характерный для дискотических мезогенов, а соединения **1 - 4** не способны формировать в мезофазе колончатые или нематические структуры. Данные прогноза полностью согласуются с результатами эксперимента.

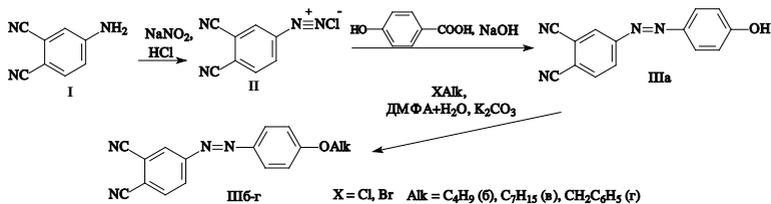
*Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, ст. научного сотрудника *О. Б. Акоповой, д-ра хим. наук, проф. *Н. В. Усольцевой, д-ра хим. наук, проф. **Г. П. Шапошникова.*

К. А. ГРАЧЕВА, Т. В. ТИХОМИРОВА
 НИИ МГЦ Ивановского государственного химико-технологического
 университета

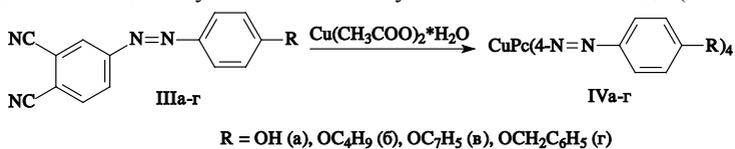
СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ТЕТРА-(4-R-ФЕНИЛАЗО)- ФТАЛОЦИАНИНОВ МЕДИ

Данная работа является продолжением исследований в области синтеза фталоцианинов из фталонитрилов, связанных азомостиком с различными ароматическими заместителями.

Диазотированием 4-аминифталонитрила (I) получена соответствующая соли диазония (II), которая без выделения использована для азосочетания с *n*-гидроксibenзойной кислотой. Затем на основании синтезированного 4-гидроксифенилазофтalonитрила (IIIa) с привлечением реакций О-алкилирования получены новые фталонитрилы (III б-г).



Темплатной конденсацией синтезированных прекурсоров (IIIa-г) с ацетатом меди получены соответствующие комплексы меди (IVa-г).



Идентификация полученных соединений проведена с привлечением комплекса физико-химических методов.

Показано, что все синтезированные комплексы обладают растворимостью в ДМФА, а при введении алкильных остатков в молекулу Pc появляется способность растворяться в хлороформе.

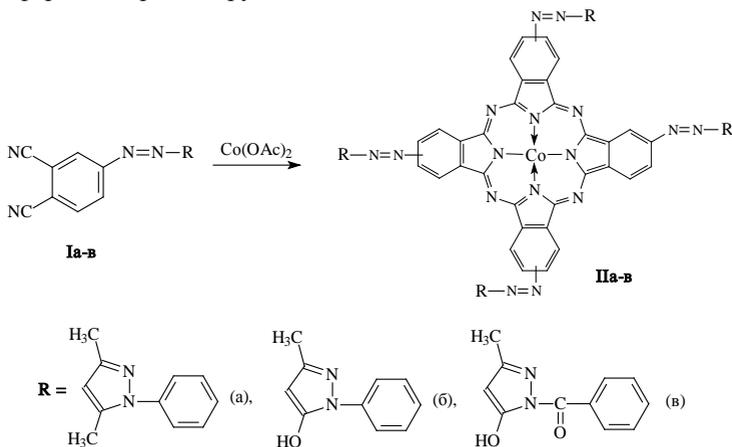
Установлено влияние природы заместителя и растворителя на электронные спектры поглощения. Определено, что в органических растворителях комплексы находятся преимущественно в ассоциированной форме.

Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф. Г. П. Шапошникова.

О. М. ГРУЗДЕВА, Т. В. ТИХОМИРОВА
НИИ МГЦ Ивановского государственного химико-технологического
университета

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ТЕТРА-4-ГЕТЕРИЛАЗО- ФТАЛОЦИАНИНОВ КОБАЛЬТА

Настоящее сообщение посвящено синтезу и исследованию физико-химических свойств фталоцианинов, содержащих на периферии гетерилазогруппы.



Синтез фталоцианинов (IIa-b) осуществляли «нитрильным» методом из соответствующих фталонитрилов (Ia-b) с безводным ацетатом кобальта.

Идентификация полученных соединений проведена с привлечением комплекса физико-химических методов.

Установлено, что синтезированные комплексы обладают растворимостью в органических растворителях (хлороформ, ДМФА).

Показано влияние природы заместителя и растворителя на электронные спектры поглощения. Отмечено, что у всех комплексов появляется дополнительное поглощение в коротковолновой области достаточно высокой интенсивности за счет входящего в состав молекулы азохромофора. Характер длинноволновых полос поглощения в ЭСП фталоцианинов в хлороформе и ДМФА позволяет предположить, что они находятся преимущественно в ассоциированной форме.

*Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф.
Г. П. Шапошникова.*

А. В. КАЗАК

Ивановский государственный университет

ОПТИЧЕСКИЕ И ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПРОИЗВОДНЫХ ПОРФИНА В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ

Одним из наиболее развитых методов получения тонкопленочных упорядоченных наноструктур для научных целей и технических приложений является техника Ленгмюра-Блоджетт, которая позволяет создавать двумерные и многослойные системы на базе органических и биологических молекул и их сочетания. Практически с использованием этой техники можно целенаправленно, под контролем создавать наноразмерные органические и биоорганические системы на твердых подложках, тем самым, открывая принципиально новые возможности для создания нанобиоорганических материалов, нанобиотехнологий и систем на их основе. Таким образом, целью данного исследования стало получение пленок Ленгмюра-Шеффера *мезо*-замещенных производных тетрафенилпорфирина с замещением алкоксигруппами ($-\text{OC}_4\text{H}_9$ или $-\text{OC}_{16}\text{H}_{33}$) в *para*- или *ortho*-позициях фенильных колец и их металлокомплексов и изучение их оптических и электрооптических свойств.

Ленгмюровские слои формировали из растворов исследуемых соединений в хлороформе на установке фирмы ФГУП «ГНЦ «НИОПИК» (Москва). Тонкие пленки получали последовательным переносом слоев с поверхности воды на ориентированные стеклянные подложки при комнатной температуре (293 – 295 К) и поверхностном давлении $\pi = 0.3 - 0.5$ мН/м. Перенос слоев с поверхности воды осуществлялся методом Ленгмюра-Шеффера (горизонтальный лифт), $n = 15$ слоев. Ориентацию стеклянных подложек проводили натиранием абразивным материалом. Изучение спектров поглощения тонких пленок в видимой области проводилось на спектрометре Ava Spec-2048 Avantest. Эффект Штарка изучался с использованием спектрофотометра на базе однолучевого дифракционного монохроматора МДР-23

Впервые обнаружен нелинейный эффект Штарка на первой и второй гармониках в ленгмюровских пленках производных тетрафенилпорфина.

*Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф.
Н. В. Усольцевой*

М. И. КОВАЛЁВА

Ивановский государственный университет, НИИ Наноматериалов

КОНСТРУИРОВАНИЕ И ПРОГНОЗ АХИРАЛЬНОГО И ХИРАЛЬНОГО МЕЗОМОРФИЗМА ЗВЕЗДОБРАЗНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ТРИФЕНИЛЕНА

История исследований жидкокристаллического состояния вещества насчитывает уже более ста лет и в последние десятилетия является одной из важнейших задач научно - технического прогресса и привлекает всё большее внимание специалистов из различных областей науки. Особенно интересным является создание новых дискотических мезогенов (*DM*) с проявлением ими хирального типа мезоморфизма, поскольку они перспективны для использования в оптоэлектронике и нанотехнологии, а также есть возможность решения с их помощью ряда теоретических аспектов мезоморфного состояния вещества.

Задачей нашего исследования является конструирование и поиск новых *DM* звездообразной формы. Для этого нами была использована методика, разработанная О. Б. Акоповой и сотрудниками НИИ Наноматериалов ИвГУ, по которой, после предварительного построения пространственных моделей молекул, и оптимизирования их в среде программы *HyperChem Pro 6.0* методом ММ⁺, осуществлялся прогноз ахирального и хирального типов мезоморфизма новой серии производных трифенилена звездообразного типа.

Было проведено конструирование 45 звездообразных производных трифенилена, которые включали в качестве мостиковых групп остатки двухосновных кислот, а периферийными фрагментами служили: холестерол, остаток аскорбиновой, адамантанкарбоновой, абиетиновой, дигидрохолоевой и липоевой кислот. Затем с помощью программы *СМР ChemCard* выполнен расчет и анализ их *MP*, сделан прогноз общего и хирального мезоморфизма, характерного для дискотических мезогенов. Это позволило выявить наиболее перспективные соединения для синтеза, у которых прогнозируется определенный тип мезоморфизма. Был отобран ряд молекулярных структур, которые в дальнейшем планируется синтезировать и исследовать на способность проявления ими жидкокристаллических свойств заданного типа.

Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, ст. научного сотрудника О. Б. Акоповой, канд. хим. наук, доц. Г. Г. Майдаченко.

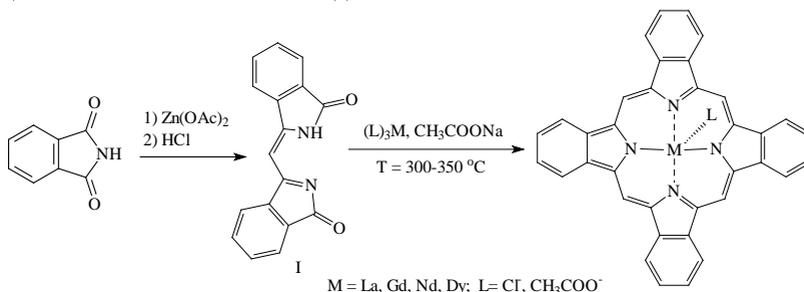
А. И. КОПТЯЕВ, Л. А. ЯКУБОВ
НИИ МГЦ Ивановского государственного химико-технологического
университета

ТЕМПЛАТНЫЙ СИНТЕЗ КОМПЛЕКСОВ ТЕТРАБЕНЗОПОРФИРИНА С РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫМИ ЭЛЕМЕНТАМИ

Среди многочисленных комплексов лантанидов особый интерес представляют соединения с тетрапиррольными лигандами. Эти уникальные соединения обладают важными прикладными свойствами и предложены, например, в качестве материалов для оптических дисплеев, полупроводников и датчиков токсичных газов. К одним из таких соединений относятся экстракомплексы лантанидов с тетрабензопорфирином.

Известный, трехстадийный метод их получения заключается в темплатном синтезе на основе фталимида комплексов тетрабензопорфирина с *p*-металлами (Zn, Cd), их демеаллировании и взаимодействии с солью редкоземельного элемента. Общий выход комплекса в расчете на исходный фталимид составляет около 8 %.

В настоящей работе нами предложен альтернативный двухстадийный метод получения комплексов лантанидов с тетрабензопорфирином. Он заключается в получении 1-[(оксо-1Н-изоиндол-3-ил)метил]-изоиндолин-3-она (I) и его нагревании с солями лантанидов в присутствии ацетата натрия. При этом выход целевых металлокомплексов достигает 30 %.



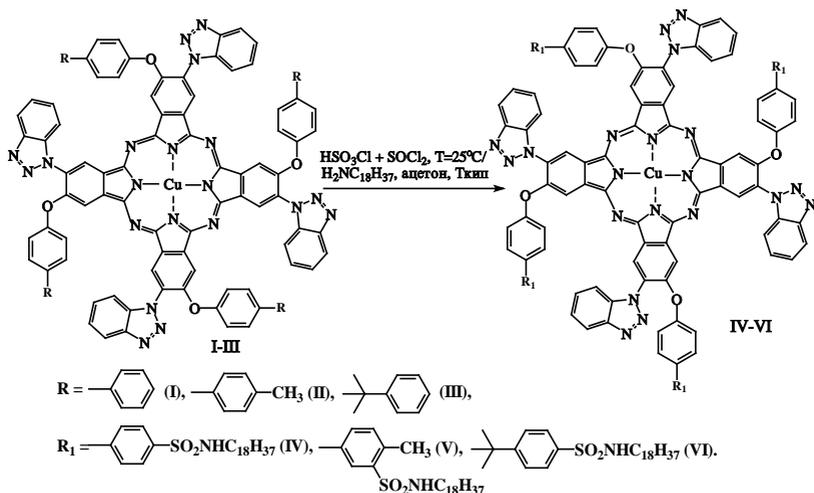
Состав и строение синтезированных соединений доказаны на основании данных элементного анализа, электронной, ЯМР ^1H и ИК спектроскопии, масс-спектрометрии.

*Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф.
Г. П. Шапошникова, д-ра хим. наук, доц. Н. Е. Галанина.*

А. В. КРИВОВА, О. Н. ЗУБКОВА, С. А. ЗНОЙКО
 НИИ МГЦ Ивановского государственного химико-технологического
 университета

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ОКТАДЕЦИЛСУЛЬФАМОИЛПРОИЗВОДНЫХ ФТАЛОЦИАНИНОВ МЕДИ, СОЧЕТАЮЩИХ БЕНЗОТРИАЗОЛИЛ- И АРИЛОКСИГРУППЫ

Приведены данные о синтезе и исследовании физико-химических свойств октадецилсульфамойлпроизводных тетра-4-(1-бензотриазолил)тетра-5-(R)фталоцианинов меди (IV - VI) которые получены взаимодействием исходных фталоцианинов меди (I - III) со смесью тионилхлорида и хлорсульфоновой кислоты при комнатной температуре в течение двух часов, с последующим амидированием полученных сульфохлоридов октадециламином.



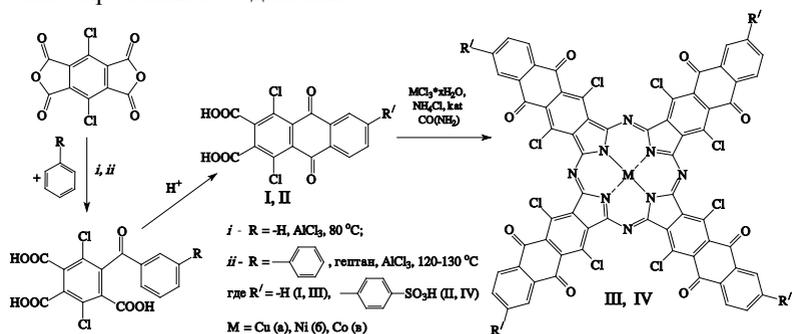
Идентификация целевых продуктов осуществлялась с привлечением данных элементного анализа, ¹H ЯМР, электронной и ИК спектроскопии. Обсуждается влияние введенных в оксиарильные заместители октадецилсульфамойльных групп на физико-химические свойства синтезированных соединений.

Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф. Г. П. Шапошникова.

М. Е. КРЫЛОВА, С. А. ЗНОЙКО, А. В. БОРИСОВ
 НИИ МГЦ Ивановского государственного химико-технологического
 университета

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ 2,3-ДИКАРБОКСИ-1,4-ДИХЛОРАНТРАХИНОНОВ И МЕТАЛЛОПОРФИРАЗИНОВ НА ИХ ОСНОВЕ

Представлены данные о синтезе 1,4-дихлор-2,3- дикарбокси- и 1,4-дихлор-2,3-дикарбокси-6-сульфоантрахинонов (**I**, **II**) и новых комплексов тетраантрахинонпорфиразинов с медью, кобальтом и никелем на их основе (**III**, **IV**), а также исследовано влияние периферийного окружения порфиразинового макрокольца и природы металла-комплексообразователя на электронно-оптические свойства синтезированных соединений.



Синтез соединения **I** и **II** осуществляли по ранее разработанной двухстадийной методике, включающей ацилирование дихлорпиромеллитового диангида с выделением бензоилтримеллитовой кислоты и стадию её внутримолекулярной циклизации. Затем соединения **I**, **II** подвергали взаимодействию с хлоридами Cu, Co или ацетатом Ni при температуре 180-200 °C, в присутствии мочевины и каталитических количеств хлорида и молибдата аммония. Обнаружено, что соединения **IIIа-д**, обладают растворимостью в ДМФА и ДМСО, а **IVа-д**, благодаря наличию сульфогрупп – в водно-щелочных средах. Проведено исследование влияния периферийного замещения и природы центрального металла-комплексообразователя на спектральные свойства синтезированных соединений.

*Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф.
 Г. П. Шапошникова.*

^{1,2}Т. А. МАРТЫНЮК, ²Ю. А. ГУБАРЕВ

¹НИИ МГЦ Ивановского государственного химико-технологического университета

²ФГБУН Институт химии растворов им. Г. А. Крестова РАН

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ КАРБОКСИЗАМЕЩЕННЫХ ФТАЛОЦИАНИНОВ ЦИНКА С БЫЧЬИМ СЫВОРОТОЧНЫМ АЛЬБУМИНОМ

В настоящее время ведется активный поиск препаратов для лечения онкологических и вирусных заболеваний. Определенную нишу в ряду потенциальных лекарственных средств занимают макрогетероциклические соединения, причем наиболее интересны с этой точки зрения липофильные металлофталоцианины. Распределение любых физиологически активных веществ в организме в значительной степени зависит от их связывания с транспортными белками крови. Основным транспортным белком в организме является сывороточный альбумин крови, доля которого составляет около 60 % от суммарного количества белков. Альбумин обладает уникальной способностью связывать значительное число лигандов различной химической структуры. Поэтому целью работы было установление характера взаимодействия натриевой соли цинкового комплекса тетра-4-[(4'-карбоксо)фенокси]фталоцианина (ФЦ) с бычьим сывороточным альбумином (БСА) в водной среде.

Исследование флуоресценции белка и его комплексов с фталоцианинами позволяет определить локализацию фталоцианинов в белковой глобуле и оценить устойчивость образующихся комплексов. Чтобы произошло тушение флуоресценции белка, флуорофор и тушитель должны быть расположены на расстоянии не более 10 нм. Параметры комплексообразования БСА с фталоцианинами оценивали по методике Скетчарда. Устойчивость комплекса БСА с тетра-4-[(4'-карбоксо)фенокси]фталоцианином цинка составила $5 \cdot 10^3$.

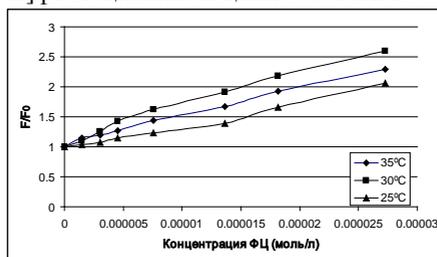


Рис. График Штерна-Фольмера

На основании анализа графика Штерна-Фольмера (рис.) было установлено, что осуществляется динамический механизм тушения флуоресценции белка.

Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф В. Е. Майзлиша.

Д. О. МОСКВИН, В. В. СОЦКИЙ
Ивановский государственный университет

СРАВНЕНИЕ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ АЛГОРИТМОВ РАСЧЕТА ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ДЛЯ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ НА МНОГОПРОЦЕССОРНЫХ СИСТЕМАХ С ОБЩЕЙ И СМЕШАННОЙ ПАМЯТЬЮ

В настоящее время жидкие кристаллы (ЖК) находят широкое применение во многих областях деятельности человека (медицина, электроника, машиностроение и т. д.).

По причине высокой стоимости и большой трудоёмкости, химический синтез мезогенов в последнее время стали предварять компьютерным моделированием. Одним из самых распространённых методов компьютерного моделирования надмолекулярной организации мезогенов является метод молекулярной динамики с параметрами молекулярной механики.

Так как расчёты, связанные с моделированием даже в наносекундных интервалах, требуют больших временных затрат, и в то же время некоторые из них (например, расчёт сил межатомных взаимодействий) могут быть выполнены независимо друг от друга, становится целесообразным внедрение в процесс моделирования технологий параллельных вычислений.

В данной работе сравнивается производительность четырёх различных параллельных алгоритмов расчёта ван-дер-ваальсовых взаимодействий между частицами: алгоритм с присоединёнными списками, распределённый на графических устройствах (GPU) **(1)**; алгоритм с присоединёнными списками, распределённый на несколько CPU при помощи OpenMP (было задействовано 4 процессора) **(2)**; алгоритмы со списками Верле, распределённые на GPU **(3)** и на несколько CPU (в эксперименте на четыре) при помощи OpenMP **(4)**.

По результатам численных экспериментов можно сделать вывод, что производительности алгоритмов **(1)** и **(3)** близки на системах с

большим количеством частиц; производительность алгоритма (2) в 10 раз меньше, чем у алгоритмов (1) и (3); производительность алгоритма (4) в четыре раза меньше производительности алгоритма (2).

Вычислительный эксперимент выполнен при помощи CPU Intel Core i7 и графического устройства nVidia GeForce 580 GTX.

Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф. Н. В. Усольцевой.

М. Н. ПОПОВА, *В. В. ТЕРЕНТЬЕВ

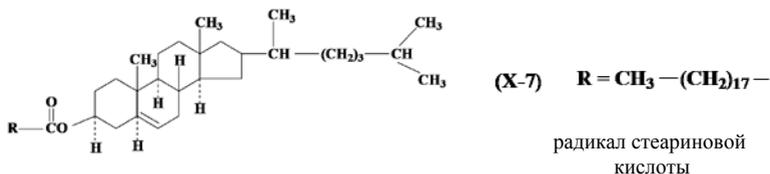
Ивановский государственный университет, НИИ Наноматериалов

* Ивановская государственная сельскохозяйственная академия им. академика Д.К. Беляева

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПРИСАЛОК НА ТРИБОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ИНДУСТРИАЛЬНОГО МАСЛА

Известно, что анизометрия молекул холестерических жидких кристаллов (ХЖК) и обусловленная ею специфика межмолекулярных взаимодействий оказывают влияние на процессы взаимодействия на границе раздела твёрдое тело – жидкая смазочная среда, в результате чего ХЖК проявляют себя как эффективные присадки к смазочным маслам, поскольку оказывают структурирующее воздействие на граничный слой трибосопряженных деталей.

С целью улучшения трибологических характеристик промышленного масла И-20А нами была предпринята попытка использования в качестве присадки холестерилэфира стеариновой кислоты – X-7, с различными концентрациями: 1%, 2%, 5%, 10% и 20%.



Исследование трибологических свойств смазочных композиций проводилось на машине трения 2070 СМТ – 1, по схеме «вращающийся диск – неподвижный шар». В ходе исследований нами

были получены величины коэффициентов трения и износные показатели (площадь пятна износа). Было установлено, что введение выше упомянутой присадки в индустриальное масло И-20А, способствует увеличению показателей износостойкости пар трения. Однако при этом наблюдалось некоторое повышение показателей коэффициента трения. Присадка X-7 с концентрацией 20% проявила себя как хорошая загущающая присадка.

Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф. Н. В. Усолицевой, д-ра техн. наук, проф. Е. В. Березиной.

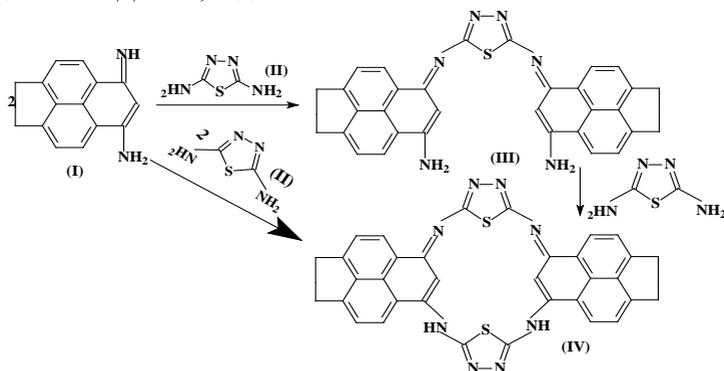
А. О. РОМАНОВСКАЯ

Ивановский государственный химико-технологический университет

ОПРЕДЕЛЕНИЕ РАСТВОРИМОСТИ МАКРОГЕТЕРОЦИКЛОВ С ФРАГМЕНТАМИ 1,3,4-ТИАДИАЗОЛА В ИНДИВИДУАЛЬНЫХ РАСТВОРИТЕЛЯХ

Растворимость, одна из основных физико-химических характеристик соединения, дает информацию о его сольватации, необходимую для рационального ведения процессов в растворе.

В научной работе обсуждается равновесная растворимость ($\Delta G=0$) соединений с фрагментами периаценафтциклогександиона и 1,3,4-тиадиазола при 298,15 К в индивидуальных растворителях различной природы. В таблице приведены данные по растворимости соединений в ДМФА, воде и этаноле.



Соединение	Растворимость (S, моль/л).
III	S = $1.41 \cdot 10^{-2}$ (вода) S = $9.39 \cdot 10^{-3}$ (этанол) S = $7.71 \cdot 10^{-2}$ (ДМФА)
IV	S = $1.79 \cdot 10^{-3}$ (вода) S = $4.28 \cdot 10^{-2}$ (этанол) S = $3.29 \cdot 10^{-4}$ (ДМФА)

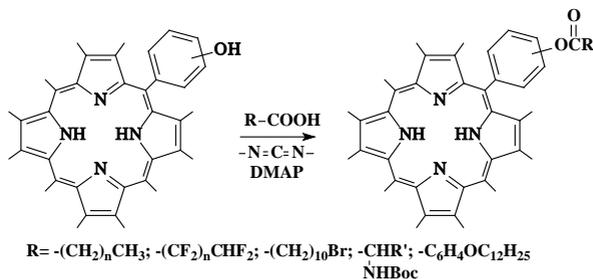
Растворимость макрогетероциклического соединения (IV) по сравнению с арилендиамином (III) на порядок выше в этаноле. В воде и ДМФА наблюдается обратная картина.

Работа выполнена под руководством канд. хим. наук, доц. Г. Р. Березиной.

М. А. САЛЬНИКОВА

Ивановский государственный химико-технологический университет

АЦИЛИРОВАНИЕ ГИДРОКСИФЕНИЛПОРФИРИНОВ



Ацилоксифенилпорфирины являются перспективными соединениями при изучении влияния разнообразных заместителей в ацильной группе на свойства порфиринового цикла, например, при изучении их жидкокристаллических свойств. Такие соединения лучше всего получать ацилированием гидроксифенилпорфиринов, что позволяет синтезировать разнообразные соединения, используя ограниченное число предшественников. Исходя из выше сказанного, нами изучено влияние различных факторов на выход в реакции ацилирования гидроксифенилпорфиринов карбоновыми кислотами в присутствии производных карбодиимида. В ходе экспериментов изучено влияние на проведение реакции ацилирования структуры

порфиринового цикла, используемой кислоты, карбодиимида, катализатора, растворителя, температуры и времени реакции. Положение гидроксигруппы в фенильном кольце мезо-фенилпорфиринов, также как количество гидроксифенильных заместителей в порфириновом цикле, а также используемой кислоты определенным образом влияют на выход ацилоксифенилпорфиринов. Установлено, что наилучшие результаты получаются при использовании в качестве ацилирующего агента карбоновой кислоты и 1-(3-диметиламинопропил)-3-этилкарбодиимида гидрохлорида (ДЭКГ) при катализе диметиламинопиридином (ДМАП) в осушенном хлористом метиле при комнатной температуре. Время реакции составляет 3-24 часа, а выход от 50 до 98%, в зависимости от используемой кислоты и структуры порфирина. Для полученных соединений приведены спектральные характеристики полностью доказывающие их структуру.

Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф. А. С. Семейкина.

С. А. СЕРГЕЕВ

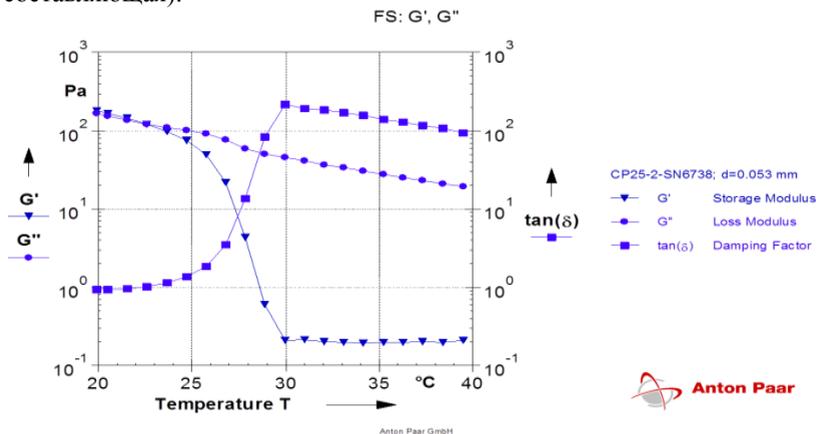
Ивановский государственный университет

РЕОЛОГИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ТЕЧЕНИЯ РАЗЛИЧНЫХ ЖИДКОСТЕЙ

Экспериментальная реология (реометрия) определяет различные реологические свойства веществ с помощью специальных приборов и испытательных машин. Первый современный реометр появился в 1940 году и с тех пор реометры совершенствовались. В настоящее время существует несколько больших компаний производящих реометры. Стоит отметить, что общепризнанным мировым лидером по производству исследовательских реометров является компания Anton Paar, которые дают возможность изучать абсолютно различные вещества.

Реологические аппараты этой фирмы обладают рядом преимуществ по сравнению со своими конкурентами. Реометры нового поколения Physica MCR301 и Physica MCR501 позволяют проводить осцилляционные тесты с реальным контролем деформации, проводить измерения в температурном диапазоне от -150 до 1000 градусов по Цельсию, проводить измерения практически всех основных характеристик, видеть диаграммы зависимости различных

характеристик в реальный момент времени. Также, они позволяют измерять такие характеристики, как модуль сохранения вещества (упругая составляющая, G') и модуль потери (вязкостная составляющая).



Работа выполнена под руководством д-ра техн. наук, проф. Е. В. Березиной.

Е. В. СМЕРНОВ, С. Ю. ПЕТРУНИН

Владимирский государственный университет имени А. Г. и Н. Г. Столетовых

РАЗРАБОТКА НОВОГО НЕРАЗРУШАЮЩЕГО МЕТОДА КОНТРОЛЯ ДЕФОРМАЦИЙ И ВНУТРЕННИХ НАПРЯЖЕНИЙ ИЗДЕЛИЙ И КОНСТРУКЦИЙ НА ОСНОВЕ НАНОМОДИФИЦИРОВАННЫХ ЦЕМЕНТНЫХ КОМПОЗИТОВ

Значительное количество современных научных исследований в области строительных материалов направлены на изучение механических свойств бетонов дисперсно-армированных углеродными наноструктурами (нанотрубками и нановолокнами). Важно отметить, что введение в матрицу материала незначительного количества УНТ приводит не только к повышению механических свойств, но и также к увеличению электропроводности. Указанный эффект был положен в основу разработки нового метода диагностики внутренних напряжений и деформаций изделий и конструкций на основе цементных композитов. Показано, что образование в деформируемых

образцах первых микротрещин проявляется в скачкообразном изменении электропроводности.

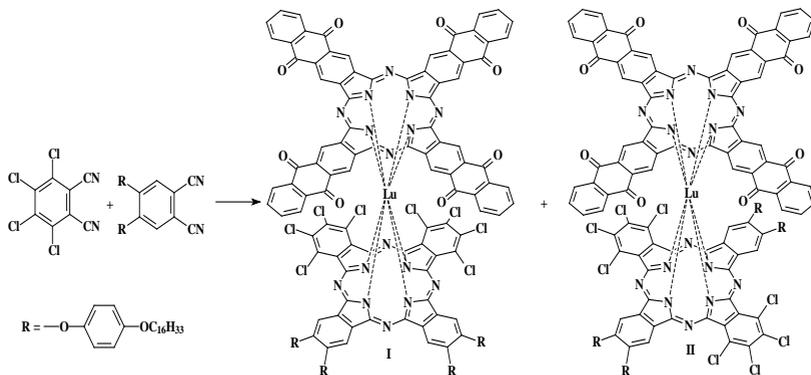
В данной работе проведены исследования бетонных смесей модифицированных многослойными углеродными нанотрубками с концентрацией 0,12% по массе вяжущего. Результаты механических испытаний образцов на различных временных этапах твердения демонстрируют повышение механических характеристик, что может являться косвенным подтверждением достижения равномерности распределения УНТ в объеме материала.

Полученные образцы использовались для измерений параметров электропроводности. На основании полученных результатов были построены графики $R(U)$ по постоянному току и частотные характеристики импеданса активной и емкостной части сопротивления, емкости и тангенса угла потерь в диапазоне до 10 МГц. Показано, что введение в состав бетона указанного количества УНТ не меняет ход анализируемых зависимостей. В то же время установлено, что бетон с УНТ имеет примерно в 2 раза меньшее удельное сопротивление и примерно в 1,5 раза меньшую диэлектрическую проницаемость.

А. С. СМЕРНОВА, М. В. КОРЕЛЬЧУК, А. В. БОРИСОВ
НИИ МГЦ Ивановского государственного химико-технологического университета

**СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ
СВОЙСТВ КОМПЛЕКСОВ ЛЮТЕЦИЯ «СЭНДВИЧЕВОГО»
ТИПА, СОДЕРЖАЩИХ ФРАГМЕНТЫ
ТЕТРАНТРАХИНОНОПОРФИРАЗИНА
И НЕСИММЕТРИЧНЫХ ФТАЛОЦИАНИНОВ**

Синтез комплексов «сэндвичевого» типа осуществляли в три стадии: На первой стадии совместной конденсацией тетрахлорфталонитрила с 4,5-бис(4'-гептодексоксифенокси) фтало нитрила с последующей обработкой уксусной кислотой получены несимметричные фталоцианины состава ААВВ и АВ АВ. На второй стадии взаимодействием с хлоридом лютеция в среде ДМФА получены их металлокомплексы. На заключительной стадии сплавлением последних с антрахинон-2,3-динитрилом в присутствии мочевины получены металлокомплексы «сэндвичевого» типа (I и II).



Полученную смесь разделяли методом колоночной хроматографии. Соединения (**I**, **II**) идентифицированы с привлечением данных элементного анализа, ЯМР ^1H , электронной и колебательной спектроскопии, а также по данным масс-спектрометрии. Исследованы спектральные, люминесцентные и жидкокристаллические свойства синтезированных металлокомплексов.

Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф. Г. П. Шапошникова, д-ра хим. наук, доц. Н. Е. Галанина.

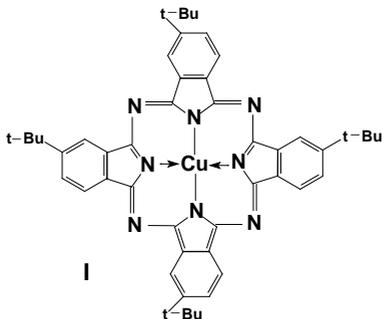
Е. В. СОЛОВЬЕВА

Ивановский государственный химико-технологический университет

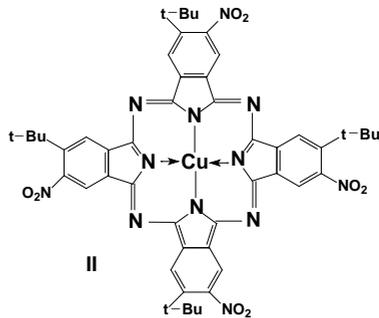
РАСТВОРИМОСТЬ ТРЕТ-БУТИЛНИТРОЗАМЕЩЕННЫХ ФТАЛОЦИАНИНОВ В ИНДИВИДУАЛЬНЫХ РАСТВОРИТЕЛЯХ

Растворимость соединения в растворителе обусловлена двумя конкурирующими составляющими – энергией кристаллической решетки (зачастую зависит от способа выделения твердого образца, степени высушивания) и энергией сольватации.

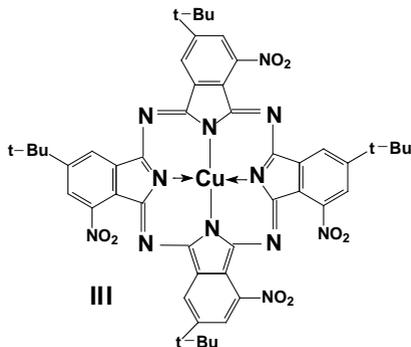
В данной работе обсуждается равновесная растворимость ($\Delta G=0$) соединений с фрагментами трет-бутил- и трет-бутилнитрозамещенных фталоцианинов при 298,15 К в органических растворителях различной природы. В таблице приведены данные по растворимости соединений в ацетоне, этаноле и ДМФА.



Для соединения (I):
 $S \cdot = 1.06 \cdot 10^{-4}$, моль/л (ацетон)
 $S \cdot = 4.43 \cdot 10^{-3}$, моль/л (ДМФА)



Для соединения (II):
 $S \cdot = 3.50 \cdot 10^{-5}$, моль/л (ацетон)
 $S \cdot = 3.45 \cdot 10^{-5}$, моль/л (этанол)



Для соединения (III):
 $S \cdot = 4.14 \cdot 10^{-4}$, моль/л (ацетон)
 $S \cdot = 1.00 \cdot 10^{-3}$, моль/л (этанол)

Как видно из экспериментальных данных, растворимость соединений (II и III) в исследуемых растворителях зависит от положения нитрогруппы по отношению к трет-бутильной группе и мезо-атомами азота в молекулах исследуемых соединений.

*Работа выполнена под руководством канд. хим. наук, доц.
 Г. Р. Березиной.*

Научная конференция
«ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ФИЗИКИ»
Секция
«ОБЩАЯ И ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА
И МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ»

Н. М. БАЛАКИРЕВА

Ивановский государственный университет

ПОДГОТОВКА К РЕАЛИЗАЦИИ ФГОС БУДУЩИМИ
УЧИТЕЛЯМИ ПОСРЕДСТВОМ ПОДГОТОВКИ
К ИСПОЛЬЗОВАНИЮ СОВРЕМЕННЫХ ПЕДАГОГИЧЕСКИХ
ТЕХНОЛОГИЙ В ОБУЧЕНИИ ФИЗИКЕ

Федеральные государственные образовательные стандарты (ФГОС), введенные в общеобразовательной школе в ходе процесса реформирования российской системы образования, ставят перед современным учителем сложную задачу изменения его позиции в учебно-воспитательном процессе: от учителя – источника знаний к учителю – наставнику, сопровождающему процесс получения знаний учащимися.

Как показывают наши исследования, проводимые в форме наблюдений и анкетирования практикующих учителей, 93 % из педагогов, работающих по ФГОС (учителя начальной школы), испытывали трудности при освоении технологии урока, соответствующего требованиям ФГОС, на этапах организации целеполагания, рефлексии и выстраивания конструктивного учебного диалога с учащимися. Среди учителей среднего и старшего звена 8 % респондентов отметили, что владеют технологией урока, соответствующего ФГОС (не смотря на то, что поэтапный переход к стандартам нового поколения (ФГОС) не требует её обязательного применения в этот промежуточный этап в классах, продолжающий обучение по предшествующим стандартам). Но в этом числе не оказалось ни одного молодого педагога со стажем работы менее 3-х лет. Таким образом, внедрение ФГОС в педагогическую практику вызывает значительные трудности у педагогов, особенно у молодых специалистов.

Проведенный нами сравнительный анализ требований ФГОС к современному уроку и основных положений одной из современных технологий – технологии педагогической мастерской (ПМ) – показывает, что использование данной технологии в обучении, в частности обучении физике, позволяет достичь определенных стандартами (ФГОС) задач образования школьников: формирование

умения учащихся самостоятельно строить своё знание, развитие ученика как развитие самостоятельной, творческой, ответственной, конструктивно вооружённой личности.

Резюмируя вышесказанное, отметим, что в процессе подготовки будущих учителей физики значимо обучение современным педагогическим технологиям, в частности – технологии ПМ.

Работа выполнена под руководством д-ра пед. наук, доц. Е. В. Ситновой.

В. А. БАРАНОВСКИЙ

Ивановский государственный университет

ТРАДИЦИОННЫЕ И ИННОВАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ В ПРОФИЛЬНОМ ОБУЧЕНИИ УЧАЩИХСЯ ФИЗИКЕ

В условиях современной школы перед учителем стоит задача – не просто передать школьникам учебную информацию, но и научить пользоваться её, то есть перенос акцента в обучении со знания на деятельность. Значит, необходимо отступить от традиционных форм обучения, сочетая их с новыми формами и методами.

Опираясь на обобщение опыта работы учителей физики г.Иваново и области, мы выделили новые типы уроков: урок – диспут, урок – соревнование, урок – КВН, урок – ролевая игра, урок- лекция, урок – семинар, урок- конференция, урок – экскурсия и другие.

В обучении необходимо объединять педагогические возможности натуральных экспериментов с аудиовизуальными информационными и компьютерными технологиями:

- Компьютерное тестирование
- Использование интернет ресурсов в домашних условиях
- Интерактивные доски
- Электронные библиотеки
- Использование интернет активных моделей в физическом эксперименте.

• Учить школьников представлять свои работы с применением компьютерных технологий (Power Point и другие)

На базе одной из ивановских школ было проведено исследование, насколько школьники усвоили пройденный материал с помощью традиционных и инновационных методов. Принципиальных отличий выявлено не было. Переход от традиционных методов к инновационным, можно сказать, проходит постепенно и без особых

затруднений, поскольку все программы просты в эксплуатации и наглядны для учащихся.

Е. И. БОЙЦОВА

Ивановский государственный университет

КОУЧИНГ КАК РЕШЕНИЕ ОДНОЙ ИЗ ПРОБЛЕМ АДАПТАЦИИ МОЛОДОГО СПЕЦИАЛИСТА В ШКОЛЕ

В наше время остро ощущается нехватка молодых специалистов в школе, и единой системы для решения этой проблемы государство ещё не разработало. Многие педагоги начиная работать в школе бросают эту профессию, сталкиваясь с первыми неудачами. Для большинства молодых педагогов это сложный и напряженный период, и как бы хорошо ни был подготовлен начинающий педагог к работе, становление его мастерства проходит на практике, в течение всех последующих лет работы в образовательном учреждении. Материал педагоги знают хорошо, но преподнести его правильно не всегда получается (неуверенная, монотонная речь, неправильное расставление акцентов в теме). Нередки и конфликты с учащимися. Одной из проблем большинства современных школ является отсутствие наставника (коуча), который помог бы справиться с трудностями, возникающими в начале преподавательской деятельности. Коучинг с английского переводится как наставлять, подготавливать, тренировать. Этот термин впервые был введен в начале 90х годов Джоном Уитмором. Система коучинга в преподавательской деятельности — это помощь молодому педагогу, которая предусматривает обратную связь. Это не простое поучение и наставление (наставничество), а совместный с молодым учителем анализ ситуаций и проблем, с целью получения максимально эффективного результата. Присутствие коуча во время проведения первых уроков, работа по устранению и решению проблем вместе с коучем оказывают существенную помощь и поддержку молодому педагогу, особенно на первых порах. Задача коуча – помочь молодому учителю реализовать себя, развить личностные качества, коммуникативные и управленческие умения. Коучинг раскрывает профессиональный потенциал молодого специалиста, его творческие способности. Коуч должен воспитывать в педагоге потребность в самообразовании и повышении квалификации, стремление к овладению инновационными технологиями обучения и воспитания. Коучинг должен практиковаться в каждой современной школе. Он

должен стать одним из путей решения проблемы адаптации молодых специалистов в школе и устранения психологических и педагогических проблем молодого учителя.

Е. С. ВИНОГРАДОВА

Ивановский государственный университет

НЕКОТОРЫЕ СОВРЕМЕННЫЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ УНИВЕРСАЛЬНЫХ УЧЕБНЫХ ДЕЙСТВИЙ В КУРСЕ ФИЗИКИ ОСНОВНОЙ ШКОЛЫ

Актуальная задача учителя на сегодняшний день – сформировать у учащихся совокупность «универсальных учебных действий». Термин «универсальные учебные действия» означает способность субъекта к саморазвитию и самосовершенствованию путем сознательного и активного присвоения нового социального опыта; совокупность действий учащегося, обеспечивающих его культурную идентичность, социальную компетентность, толерантность, способность к самостоятельному усвоению новых знаний и умений, включая организацию этого процесса. Ученые выделяют четыре основных типа УУД: личностные, регулятивные, познавательные и коммуникативные.

Для реализации в учебном процессе универсальных учебных действий используются современные образовательные педагогические технологии. «Педагогическая технология» - это такое построение деятельности учителя, в котором входящие в него действия представлены в определенной последовательности и предполагают достижения прогнозируемого результата. Образовательные технологии дают возможность более эффективно использовать учебное время и повышать качество образования, активизируют процесс овладения знаниями, умениями, навыками, создают условия для творческой деятельности. С помощью современных образовательных технологий может быть реализована новая образовательная парадигма.

Выделим некоторые педагогические технологии, позволяющие формировать УУД в курсе физики основной школы: проблемное и разноуровневое обучение; проектные и исследовательские методы обучения; технология использования в обучении игровых методов; обучение в сотрудничестве (командная, групповая работа);

информационно-коммуникационные, здоровьесберегающие технологии; система инновационной оценки «портфолио».

Использование широкого спектра педагогических технологий дает возможность учителю формировать качественные УУД на уроках.

Работа выполнена под руководством д-ра пед. наук, доц. Е. В. Ситновой.

Т. С. ВОЛОДИНА

Ивановский государственный университет

ЗАДАЧИ С ПРОБЛЕМНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ НА УРОКАХ ФИЗИКИ В ОСНОВНОЙ ШКОЛЕ

Систематическое использование проблемного обучения в решении физических задач углубляет знания школьников по физике, повышает их действенность, развивает познавательный интерес.

Анализ психолого-педагогической литературы по теме исследования дает такие виды проблемных ситуаций: неожиданности, конфликта, предположения, опровержения, несоответствия, новизны, избыточности, перспективности, ближнего и дальнего переноса.

Создание проблемной ситуации при решении физических задач преследует следующие дидактические цели:

- 1) привлечь внимание ученика к задаче, возбудить у него мотивы деятельности;
- 2) показать школьнику противоречия между возникшей у него познавательной потребностью и невозможностью ее удовлетворить посредством имеющихся знаний и умений;
- 3) помочь выделить в задаче основную проблему и наметить план поиска решения;
- 4) предложить ученику определить границы ранее усвоенных знаний и указать направление поиска наиболее рационального пути выхода из затруднительной ситуации.

Нами рассмотрены конкретные методы создания проблемных ситуаций: метод монологических рассуждений, метод диалога, частично-поисковый метод, проблемная беседа и др.

В работе предложены задачи с использованием отрывков из научно-популярной и художественной литературы, задачи с историческим содержанием, парадоксальные ситуации и софизмы, фрагменты из кинофильмов и видеofilmов, задачи с использованием жизненного опыта школьников, задачи с использованием

межпредметных связей, задачи на базе физического эксперимента. Большой интерес вызывают задачи-исследования (предложение академика П.Л. Капицы), задачи с неполными данными, с лишними данными.

Предложенные задачи частично апробированы в школах и получили положительную оценку учителей.

Работа выполнена под руководством канд. пед. наук, доц. В. Е. Кулакова.

¹О. А. ДМИТРИЕВА, ^{1,2}М. В. ФЕДОТОВА

¹ Ивановский государственный университет

²Федеральное государственное учреждение науки
Институт химии растворов им. Г. А. Крестова РАН, Иваново

3D-RISM ИССЛЕДОВАНИЕ ИОН-МОЛЕКУЛЯРНОГО КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ ЦВИТТЕР-ИОНА АЛАНИНА С НЕОРГАНИЧЕСКИМИ ИОНАМИ В БИОЛОГИЧЕСКИ ВАЖНЫХ ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ

Аминокислоты входят в состав большинства пептидов, белков, а также пептидных гормонов и антибиотиков, участвуя в регуляции всех жизненных процессов организма. Аланин, как простейшая хиральная аминокислота, является удобной модельной системой для изучения особенностей гидратации белков в водной среде, включающей не только молекулы воды, но и неорганические ионы. Известно, что присутствие электролитов в водной среде влияет на структуру и свойства белков, в том числе на их растворимость и денатурацию. В то же время структурные исследования систем аланин-электролит-вода, необходимые для понимания молекулярной картины гидратации биомолекул и установления структурных механизмов различных биохимических процессов в живых организмах, на сегодняшний день практически отсутствуют.

В докладе представлены результаты исследования методом интегральных уравнений особенностей ион-молекулярного комплексообразования цвиттер-иона аланина (Ala-ZW) в биологически важных водных растворах электролитов, а именно, в водных растворах NaCl, KCl, CaCl₂ и MgCl₂ при стандартных условиях (298 К, 0.1 МПа). Расчеты структурных параметров были выполнены методом интегральных уравнений статистической теории жидкостей в 3D-RISM (Reference Interaction Site Model) приближении. Особенности ион-

молекулярного комплексообразования были проанализированы при помощи пространственных (3D-) функций распределения и пространственных (3D-) функций потенциала средней силы.

Согласно полученным данным, все катионы (Cat^+) образуют комплексы с группой $-\text{COO}^-$, а хлорид-ион – комплекс с $-\text{NH}_3^+$ группой Ala-ZW. Обнаружено, что вероятность образования комплекса $(-\text{COO}:\text{Cat}^+)_{\text{aq}}$ и его стабильность возрастает в ряду $\text{K}^+ < \text{Na}^+ < \text{Ca}^{2+} < \text{Mg}^{2+}$. Для всех исследованных солей вероятности образования комплексов $(-\text{NH}_3^+:\text{Cl}^-)_{\text{aq}}$ и их стабильность одинакова и превышает вероятность образования комплекса $(-\text{COO}:\text{K}^+)_{\text{aq}}$ и его стабильность. Обсуждается структурный механизм ион-молекулярного комплексообразования. Полученные данные показывают различие в механизме образования комплекса $(-\text{COO}:\text{Cat}^+)_{\text{aq}}$ в растворе KCl и механизме образования этого же комплекса в растворах NaCl, CaCl₂ и MgCl₂. Механизм образования комплекса $(-\text{NH}_3^+:\text{Cl}^-)_{\text{aq}}$ идентичен во всех исследованных системах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 12-03-97508-р_центр_а) и программы Евросоюза FP7-PEOPLE-2009-IRSES «Мария Кюри» грант № 247500.

А. А. МАСЛОВ

Ивановский государственный университет

ИНФОРМАТИЗАЦИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ УЧРЕЖДЕНИЙ

Стратегия развития современных информационных технологий определяется направлением от информации к знаниям. Наиболее существенным достоинством новых информационных технологий является то, что их применение позволяет сделать процесс обучения лично ориентированным, ставить и решать новые, не традиционные образовательные задачи. Современные информационные технологии, позволяют создавать, хранить, перерабатывать информацию и обеспечивать эффективные способы её представления ученику, являются мощным инструментом ускорения образовательного процесса.

Чтобы обеспечить качественный диалог общества и образовательной системы необходимо распространять информацию о деятельности каждого образовательного учреждения. За последние

годы эту необходимость представления информации в полной мере осознали руководители большинства школ, вузов и других учебных заведений. Все чаще для этого используют современные электронные технологии, в частности, размещение информации на сайте. Следует заметить, что уровень востребованности информационных сайтов вузов существенно вырос за последнее время.

Успех официального ресурса образовательного учреждения зависит от полноты понимания ее создателями потребностей аудитории. Ресурс учебного заведения должен учитывать интересы не только самого учреждения, но и различных групп пользователей – учащихся, студентов, их родителей, педагогов, представителей общественности и т.д.

Некоторые особенности создания сайта образовательного учреждения:

1. необходимо дать возможность потенциальным и действительным клиентам ближе познакомиться с образовательным учреждением, его устройством и деятельностью;

2. стоит предоставить достоверную информацию из первоисточника средствами массовой информации, что демонстрирует открытость учреждения.

3. качественный сайт способствует быстрому и простому проведению полноценной презентации учреждения для широчайшего круга интернет-пользователей;

4. публикация и обновление различной справочной, аналитической и ознакомительной информации укрепит доверие к учреждению, об этом не стоит забывать при создании сайта;

5. размещение на ресурсе удобной формы обратной связи даст возможность получить отзывы о деятельности организации от различных групп пользователей, это поможет руководству сделать выводы о развитии учреждения и эффективности решения основных задач.

О. А. ХОХЛОВА

Ивановский государственный университет

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ХУДОЖЕСТВЕННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ НА УРОКАХ ФИЗИКИ В КЛАССАХ ГУМАНИТАРНОГО ПРОФИЛЯ

Для современной российской школы характерным является углубление дифференциации обучения. Она находит свое выражение в создании общеобразовательных учреждений различных типов и

профилей. Вместе с тем, дифференциация обучения предполагает овладение каждым выпускником средней школы вне зависимости от ее профиля определенным общеобразовательным минимумом по всем областям науки и культуры - стандартом общеобразовательной подготовки. В этих условиях проблема овладения учащимися школ гуманитарного профиля основным содержанием естественнонаучных предметов (например, физики) становится весьма актуальной. Одним из методов преподавания физики в классах гуманитарного профиля является использование литературного материала на уроках. Данный метод позволяет учащимся изучать сложные закономерности на примере знакомых им художественных произведений, позволяет решить вопрос, «как будущего «лирика» освободить от изучения тонких вопросов физики?»

Можно выделить два основных приема использования на уроках физики текстов из произведений художественной литературы.

1. В качестве иллюстраций. Если отрывок содержит яркое развернутое описание физического явления, то словесной иллюстрации изучаемого материала. Это весьма полезно при знакомстве с редко встречающимися явлениями, невозпроизводимыми в кабинете физики.

2. В качестве условий для физических задач. Некоторые литературные тексты, содержащие описания тех или иных физических явлений, могут служить в качестве условий для различных физических задач: качественных, количественных, оценочных, графических, экспериментальных. В этом случае надо иметь в виду, что часто литературный фрагмент содержит описания не одного, а нескольких физических явлений; к таким фрагментам целесообразно формулировать не один, а соответствующее число вопросов или заданий.

Отрывки из произведений художественной литературы можно использовать как на уроке физики, так и в виде домашнего задания.

Использование текстов из художественной литературы на уроках физики оказывается эффективным, если придерживаться определенных методических требований к ним. Цитируемые литературные тексты должны: быть связанными с конкретными вопросами курса физики; отражать основной, а не второстепенный или дополнительный материал, изучаемый на уроке; иметь высокие художественные достоинства: яркость и убедительность, выразительность образов; быть краткими, лаконичными; способствовать созданию положительной мотивации к изучению физики.

Научная конференция
«ПРОБЛЕМЫ СОВРЕМЕННОЙ МАТЕМАТИКИ»
Секция
«КОМПЬЮТЕРНЫЕ НАУКИ
И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ»

А. Е. БАЙБОРОДИНА

Ивановский государственный университет

**ЭЛЕКТРОННОЕ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ПОСОБИЕ
ПО ЯЗЫКУ ПРОГРАММИРОВАНИЯ АССЕМБЛЕР**

Цель данной работы – это создание электронного учебно-методического пособия по языку программирования Ассемблер. В качестве среды программирования используется RadASM на ассемблере Masm32. В пособии рассматривается четыре лабораторные работы по следующим темам: арифметические операции, циклы и условные переходы, массивы, процедуры. Каждая лабораторная работа содержит необходимые теоретические сведения по заданной теме, пример решенной задачи с исходным кодом программы и упражнения для самостоятельного решения.

В первой лабораторной работе показан теоретический материал, который дает общее представление о языке Ассемблер, регистрах, типах данных, структуре программы данного языка программирования. Упражнения подобраны так, чтобы способствовать навыкам работы с переменными и расстановки приоритетов выполнения арифметических операций в программе.

Вторая лабораторная работа посвящена циклам и условным переходам. Для изучения реализации циклов и условных переходов в программе представлены примеры работы с числовыми данными. Необходимые команды и логические операции описаны в теоретической части.

Как осуществляется задание массива и работа с его элементами в языке Ассемблер, показано в третьей лабораторной работе.

В последней лабораторной работе рассмотрены процедуры. В теоретическом материале описываются понятия стека, процедуры и команды для работы с ними. В упражнениях для самостоятельного решения предлагается использовать процедуры при реализации задач с использованием одномерных массивов.

О. Е. КОННОВА

Ивановский государственный университет

СОЗДАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СИСТЕМЫ КОНТРОЛЯ РАБОТЫ СОТРУДНИКОВ В ПРОГРАММЕ «1С:ПРЕДПРИЯТИЕ»

Система программ «1С:Предприятие» предназначена для решения широкого спектра задач автоматизации учета и управления в современных организациях, которые могут существенно отличаться в зависимости от рода деятельности предприятия. Возможности «1С:Предприятия» позволяют создавать индивидуальные решения, учитывающие потребности конкретной организации. Такие решения, как правило, являются развитием или модернизацией типового решения фирмы «1С» или тиражного специализированного решения, но могут быть разработаны и полностью «с нуля», если того требует ситуация.

Цель данной работы состоит в том, чтобы разработать и внедрить в производственный процесс фирмы ООО «Фаворит» информационную базу, содержащую документы, справочники, регистры сведений, в которых хранятся данные о деятельности предприятия и работе сотрудников, автоматизировать учет и управление в организации. Информационная база, являющаяся совокупностью объектов (данных и метаданных), а также связей между ними, задаваемых программистом, представляет собой конфигурацию.

В результате проделанной работы была создана конфигурация, содержащая информацию о деятельности предприятия и работе сотрудников, которая автоматизирует подсчет сумм в документах и учет выручки. Были созданы автоматические отчеты, которые отражают рейтинги сотрудников и клиентов в виде диаграмм. Также осуществлена возможность использования актуальной информации о ценах по заданной дате документа, и оформлена печатная форма документа.

По результатам внедрения данной конфигурации в производственный процесс можно сделать выводы о том, что ее использование способствует повышению производительности труда на предприятии и эффективности принятия решений по организации дальнейшей деятельности фирмы.

Ю. Д. МОТОВА
Ивановский государственный университет

ОБЕСПЕЧЕНИЕ ИНФОРМАЦИОННОЙ БЕЗОПАСНОСТИ В КРЕДИТНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ НА ПРИМЕРЕ АКБ «АКЦИЯ» ОАО

Обеспечение информационной безопасности в настоящее время является комплексной задачей. Это обусловлено тем, что информационная среда является многоплановым механизмом, в котором действуют такие компоненты, как электронное оборудование, программное обеспечение, персонал. Существенно возрастает роль угроз информационной безопасности, которые в значительной степени влияют на финансовые риски и состояние экономической безопасности кредитных организаций. Задачами информационной безопасности кредитных организаций являются: сохранение интеллектуальной и материальной собственности; разработка и реализация механизма оперативного реагирования на выявление и устранение угроз в отношении деятельности кредитных организаций. В частности, необходимым в настоящее время становится проведение оценки уровня информационной безопасности.

Цель данной работы состояла в изучении основных понятий информационной безопасности, рисков связанных с интернет-банкингом, электронной платежной системой, и выявление методов минимизации данных рисков. Также в процессе работы было рассмотрено понятие оценки уровня информационной безопасности и проведена оценка уровня информационной безопасности в программе Audit Manager (демо-версия), одном из модулей компании ISM Revision

В результате проделанной работы были выявлены основные причины утечки конфиденциальной информации клиента, простого пользователя и организации в целом. В ходе достижения поставленной цели также были выявлены основные угрозы интернет-банкинга; проведена оценка уровня информационной безопасности; проведена оценка выполнения требований по обеспечению безопасности персональных данных при их обработке в информационных системах банка.

По результатам проделанной работы можно сделать вывод о том, что для решения проблемы обеспечения информационной безопасности необходимо применение законодательных, организационных и программно-технических мер. Пренебрежение хотя бы одним из аспектов этой проблемы может привести к утрате

или утечке информации, стоимость и роль которой в жизни современного общества приобретает со временем все более важное значение.

А. М. СТРОЙКОВА

Ивановский государственный университет

СОЗДАНИЕ СИСТЕМЫ ЭЛЕКТРОННОГО ВЕДЕНИЯ ТОРГОВОГО УЧЕТА НА ПРЕДПРИЯТИИ

Внедрение системы электронного ведения торгового учёта направлено на упрощение действий сотрудников данной организации, на повышение оперативности в работе, и автоматизацию деятельности предприятий, организаций и частных лиц.

Целью данной работы является разработка и внедрение в производственный процесс ООО «Фаворит» прикладного решения, способного решать некоторые экономические задачи планирования объемов производства продукции фирмы.

Работа сделана в системе «1С:Предприятие 8.2». Это актуально, так как в современной экономике, в условиях рыночных отношений, большинство предприятий использует различные продукты 1С. Для упрощения действий пользователя с данной системой часто требуется адаптация программы под конкретные условия производственного процесса. Система «1С:Предприятие» включает в себя платформу и прикладные решения, разработанные на её основе. Термин прикладные решения употребляется для обозначения действий пользователя системы 1С:Предприятие. Термин Конфигурация употребляется для обозначения действий разработчика системы 1С:Предприятие. В качестве примера существующих прикладных решений можно перечислить: 1С:Управление небольшой фирмой 8, 1С:Бухгалтерия 8, 1С:Предприятие 8, Управление торговлей и др.

В результате проделанной работы была создана система, позволяющая осуществлять возможность оформлять операции прихода и расхода товаров, при расходе осуществлять контроль остатков, осуществлять возможность не только вводить, но и проводить документы, осуществлять возможность различного анализа данных (в форме отчётов и диаграмм).

По результатам внедрения разработанной системы в производственный процесс можно сделать вывод о том, что ее использование способствует повышению эффективности работы, увеличению производительности труда, а так же обеспечивает

оперативность регистрации операций поступления товаров на склад и отгрузки со склада и формирование отчётов об остатках товаров и оборотах фирмы.

Е. В. ТИМОФЕЕВА

Ивановский государственный университет

РАЗРАБОТКА WEB-ПРИЛОЖЕНИЯ «МОЯ ПРОФЕССИЯ-РАДИОМЕХАНИК»

Актуальность данной темы исследования обусловлена тем, что в настоящее время широко распространено внедрение информационных технологий в учебные заведения, появилась возможность создания информационных систем, главная задача которых – автоматизация работы с информацией, сопровождающей учебный процесс.

Цель работы – разработать Web-приложение «Моя профессия – радиомеханик», которое позволит учащимся профессионального лицея ознакомиться с особенностями профессии радиомеханика и пройти тестирование по данной специальности. Поставленная задача носит ярко выраженную практическую направленность, поскольку разработанное приложение будет непосредственно использоваться учащимися лицея № 24 г. Тейково.

Для реализации поставленной цели нами был выбран язык программирования PHP, JavaScript, язык гипертекстовой разметки HTML, система управления базами данных MySQL и Web-сервер Denver.

В ходе выполнения работы нами была создана база данных «Information_o_studentah», которая содержит две таблицы. База заполнена данными. Чтобы не загромождать таблицы лишней информацией, их связь осуществляется по идентификационным номерам. Для того чтобы учащиеся могли увидеть свою задачу по номеру зачетной книжки, нами были созданы запросы для выбора соответствующих данных из базы данных «Information_o_studentah».

Таким образом, нами было создано приложение «Моя профессия – радиомеханик», которое позволяет:

- ознакомиться с особенностями профессии радиомеханика;
- узнать, каким образом осуществляет прием и обучение;
- проверить свои знания, пройдя тестирование.

Е. М. ТИТОВА

Ивановский государственный университет

РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ «СВОД ОТЧЕТОВ» В 1С: ПРЕДПРИЯТИЕ 8.2

В любом предприятии существуют формы отчётности, финансовые и прочие документы, информацию по которым необходимо обрабатывать и предоставлять на вышестоящие уровни системы и в сторонние организации. Поэтому разработка программного комплекса, решающего проблемы хранения, сбора и обработки информации, является актуальной в настоящее время задачей.

Цель данной работы состояла в разработке и внедрении в производственный процесс ОАО «Сбербанк России» системы отчетов, содержащих информацию о доходах сотрудников.

Для создания отчетов использовалась платформа 1С: Предприятие 8.2 – прикладной язык программирования с закрытым исходным кодом, предназначенный для автоматизации деятельности на предприятиях всевозможной направленности.

В результате проделанной работы была создана база данных, содержащая информацию о сотрудниках предприятия и их доходах. В целях упрощения работы пользователя была разработана удобная печатная форма справок, позволившая формировать автоматические отчёты по сотрудникам, такие как справка о доходах и справка о средней заработной плате. В программе также предусмотрены формы для поиска информации и вывода её на экран, формы ввода, корректирования и удаления данных в имеющейся базе.

По результатам тестирования полученных отчетов в производственном процессе можно сделать вывод о том, что их использование способствует оптимизации формирования данных о доходах сотрудников на предприятии.

Д. В. ВЛАСОВА
Ивановский государственный университет

ГРУППЫ С КОНЕЧНЫМ ЧИСЛОМ ПОДГРУПП КОНЕЧНОГО ИНДЕКСА

Группа называется полной если в ней из каждого ее элемента можно извлечь корень любой натуральной степени.

В книге А.Г. Куроша «Теория групп» отмечается следующий классический результат.

Абелева группа не содержит собственных подгрупп конечного индекса тогда и только тогда, когда она является полной.

Отсутствие собственных подгрупп конечного индекса в группе G означает, что в ней существует только одна подгруппа конечного индекса – сама группа G .

Мы рассматриваем здесь более слабое требование, которое состоит в том, что в группе G существует только конечное число подгрупп конечного индекса. Ранее Н. И. Яцкин поставил следующий вопрос: что известно о группах с конечным числом подгрупп конечного индекса.

Мы исследовали этот вопрос для абелевых групп и доказали, что для произвольной абелевой группы G следующие три условия равносильны между собой.

1. Группа G содержит только конечное число подгрупп данного конечного индекса.

2. Группа G содержит полную подгруппу конечного индекса.

3. Группа G раскладывается в прямое произведение полной группы и конечной группы.

Заметим, что для произвольной группы G эти три условия не равносильны, но каждое из условий 2 и 3 является достаточным для условия 1.

Д. В. ГОЛЬЦОВ

Ивановский государственный университет

**О ПОЧТИ АППРОКСИМИРУЕМОСТИ
СВОБОДНЫХ ПРОИЗВЕДЕНИЙ ГРУПП
КОРНЕВЫМИ КЛАССАМИ КОНЕЧНЫХ ГРУПП**

Пусть K — некоторый корневой класс групп, состоящий только из конечных групп. Пусть $(G_\lambda)_{\lambda \in \Lambda}$ — некоторое (возможно бесконечное) семейство групп. И пусть $G = (*_{\lambda \in \Lambda} G_\lambda, H)$ — свободное произведение групп G_λ с одной объединенной конечной подгруппой H . В работе Д. Н. Азарова получен критерий финитной аппроксимируемости и аппроксимируемости конечными p -группами такого свободного произведения. Здесь рассматривается свойство почти аппроксимируемости группы G классом K . Нами получен следующий результат.

Теорема 1. *Пусть K — некоторый класс конечных групп, являющийся корневым. И пусть для каждого $\lambda \in \Lambda$ группа G_λ почти K -аппроксимируема и подгруппа H конечна. Группа G почти K -аппроксимируема тогда и только тогда, когда для каждого $\lambda \in \Lambda$ в группе G_λ существует нормальная подгруппа U_λ конечного индекса такая, что выполняются три условия:*

- (1) $U_\lambda \cap H = 1$;
- (2) группа U_λ аппроксимируема классом K ;
- (3) индексы $[G_\lambda : U_\lambda]$ ограничены в совокупности.

Из этого критерия можно получить два следствия. Для любого корневого класса K конечных групп свободное произведение конечного числа почти K -аппроксимируемых групп с конечной объединенной подгруппой само является почти K -аппроксимируемой группой.

Для любого корневого класса K конечных групп свободное произведение произвольного семейства почти K -аппроксимируемых групп G_λ является почти K -аппроксимируемой группой тогда и только тогда, когда для каждого $\lambda \in \Lambda$ в группе G_λ существует нормальная K -аппроксимируемая подгруппа U_λ конечного индекса такая, что индексы $[G_\lambda : U_\lambda]$ ограничены в совокупности.

В. А. ЕРЕМИН

Ивановский государственный университет

О ФИНИТНОЙ ОТДЕЛИМОСТИ ЦИКЛИЧЕСКИХ ПОДГРУПП

Группа G называется π_c -группой, если все ее циклические подгруппы финитно отделимы. Ранее Д. Н. Азаров заметил, что если группа аппроксимируема полициклическими группами без кручения, то она является π_c -группой. Подробное доказательство этого результата было приведено автором настоящего доклада в его бакалаврской работе. В его будущей магистерской диссертации будет изложено доказательство следующего более общего утверждения.

Теорема. *Если группа G аппроксимируема π_c -группами без кручения, то она сама является π_c -группой.*

Так как любая полициклическая группа является π_c -группой, то непосредственным следствием приведенной теоремы является следующий, упомянутый выше, результат.

Следствие 1. *Если группа G аппроксимируема полициклическими группами без кручения, то она является π_c -группой.*

Так как свободные группы являются π_c -группами и не имеют кручения, то мы можем сформулировать еще одно следствие из нашей теоремы.

Следствие 2. *Если группа G аппроксимируема свободными группами, то она является π_c -группой.*

Заметим еще, что в нашей теореме отсутствие кручения существенно. Действительно, если бы любая группа G , аппроксимируемая π_c -группами, сама являлась бы π_c -группой, то поскольку все конечные группы являются π_c -группами, то у нас получилось бы, что любая финитно аппроксимируемая группа является π_c -группой. А это не верно. Так, например, аддитивная группа Q_p p -ичных дробей финитно аппроксимируема, но ее циклическая подгруппа Z целых чисел не является финитно отделимой.

А. В. РОЗОВ

Ивановский государственный университет

**ОБ АППРОКСИМИРУЕМОСТИ КОНЕЧНЫМИ π -ГРУППАМИ
СВОБОДНЫХ ПРОИЗВЕДЕНИЙ
НИЛЬПОТЕНТНЫХ ГРУПП КОНЕЧНОГО РАНГА
С ЦЕНТРАЛЬНЫМ ОБЪЕДИНЕНИЕМ**

Г. Баумслаг доказал, что свободное произведение двух полициклических групп с нормальными объединенными подгруппами финитно аппроксимируемо.

Одним из обобщений понятия полициклической группы является понятие разрешимой группы конечного ранга. Напомним, что группа G называется группой конечного ранга, если существует целое положительное число r такое, что любая конечно порожденная подгруппа группы G порождается не более чем r элементами.

Ранее нами было получено следующее обобщение результата Баумслага.

Теорема 1. *Пусть G – свободное произведение финитно аппроксимируемых групп A и B с нормальными объединенными подгруппами H и K , не совпадающими с группами A и B соответственно. Если группы A и B являются разрешимыми группами конечного ранга, то группа G тогда и только тогда финитно аппроксимируема, когда фактор-группы A/H и B/K финитно аппроксимируемы.*

Пусть π – некоторое множество простых чисел, F_π – класс всех конечных π -групп. Заметим, что теорема 1 не может быть распространена с финитной аппроксимируемости на F_π -аппроксимируемость, поскольку даже в случае, когда множество π состоит из одного простого числа p , свободное произведение двух конечных π -групп с нормальными объединенными подгруппами не обязано быть F_π -аппроксимируемой группой. Тем не менее, требуя дополнительно от объединяемых подгрупп H и K , чтобы они содержались в центрах групп A и B , нами было доказано следующее утверждение для обобщенного свободного произведения нильпотентных групп конечного ранга.

Теорема 2. *Пусть G – свободное произведение F_π -аппроксимируемых групп A и B с центральными объединенными подгруппами H и K , не совпадающими с группами A и B соответственно. Если группы A и B являются нильпотентными группами конечного ранга, то группа G тогда и только тогда F_π -аппроксимируема, когда фактор-группы A/H и B/K F_π -аппроксимируемы.*

Е. М. ТИТОВА

Ивановский государственный университет

МУЛЬТИГРАФЫ, КОННЕКТОРНЫЕ СХЕМЫ, МАТРИЦЫ НАД БУЛЕВЫМИ АЛГЕБРАМИ

В работе изучается понятие *коннекторной схемы*, обобщающее понятие *ориентированного мультиграфа* (и отличающееся от известного понятия *гиперграфа*).

Коннекторная схема задается множеством *вершин* $X = \{x_1, \dots, x_n\}$ и множеством *коннекторов* $U = \{u_1, \dots, u_m\}$. Каждый коннектор u_k (в отличие от *дуги* ориентированного мультиграфа) может *соединять более одной пары вершин*, являясь подмножеством декартова квадрата X^2 .

Для задания коннекторной схемы может быть использована обобщенная *матрица смежности* C , элементами которой являются подмножества в U : подмножество c_{ij} состоит из всех коннекторов, соединяющих вершину x_i с вершиной x_j .

В работе развивается алгебраическая техника, позволяющая оперировать с матрицами, элементами которых служат подмножества не только в U , но и в различных декартовых степенях U^k .

Это позволяет использовать степени матрицы смежности для представления множеств *путей* (понимаемых как последовательности коннекторов) из одной вершины в другую.

Соответствующие вычисления автоматизированы с привлечением *систем компьютерной алгебры*.

Обеспечивается также компьютерная *визуализация* изучаемых объектов.

Е. А. ТУМАНОВА

Ивановский государственный университет

ОБ АППРОКСИМИРУЕМОСТИ КОНЕЧНЫМИ π -ГРУППАМИ ОБОБЩЕННЫХ СВОБОДНЫХ ПРОИЗВЕДЕНИЙ С НОРМАЛЬНОЙ ОБЪЕДИНЕННОЙ ПОДГРУППОЙ

Пусть π – непустое множество простых чисел, H – собственная нормальная подгруппа группы A , K – собственная нормальная подгруппа группы B , $\varphi: H \rightarrow K$ – изоморфизм, $G = (A * B; H = K, \varphi)$ – свободное произведение групп A и B с подгруппами H и K , объединенными относительно изоморфизма φ . Получен критерий аппроксимируемости конечными π -группами обобщенного свободного

произведения G при условии, что группа $\text{Aut}_G(H)$ всех автоморфизмов группы H , индуцированных внутренними автоморфизмами свободных множителей, конечна. А именно, доказана

Теорема. Пусть $\{(R_\lambda, S_\lambda)\}_{\lambda \in \Lambda}$ – семейство всех пар нормальных (H, K, φ) -совместимых подгрупп конечного π -индекса групп A и B соответственно. Если $\text{Aut}_G(H)$ – конечная группа, то группа G F_π -аппроксимируема тогда и только тогда, когда $\text{Aut}_G(H)$ является конечной π -группой, семейства $\{R_\lambda\}_{\lambda \in \Lambda}$ и $\{S_\lambda\}_{\lambda \in \Lambda}$ являются фильтрациями, подгруппа H F_π -отделима в группе A , подгруппа K F_π -отделима в группе B .

Очевидно, что если подгруппа H центральна в группе G , то множество $\text{Aut}_G(H)$ состоит только из тождественного отображения группы H и, следовательно, является конечной π -группой для любого множества π простых чисел. Поэтому из теоремы вытекает

Следствие. Пусть H – центральная подгруппа группы A , K – центральная подгруппа группы B , $\{(R_\lambda, S_\lambda)\}_{\lambda \in \Lambda}$ – семейство всех пар нормальных (H, K, φ) -совместимых подгрупп конечного π -индекса групп A и B соответственно. Группа G F_π -аппроксимируема тогда и только тогда, когда семейства $\{R_\lambda\}_{\lambda \in \Lambda}$ и $\{S_\lambda\}_{\lambda \in \Lambda}$ являются фильтрациями, подгруппа H F_π -отделима в группе A , подгруппа K F_π -отделима в группе B .

А. А. УСКОВА

Ивановский государственный университет

О ФИНИТНОЙ ОТДЕЛИМОСТИ ПОДГРУПП ОБОБЩЕННЫХ СВОБОДНЫХ ПРОИЗВЕДЕНИЙ ГРУПП

Напомним, что подгруппа H группы G называется финитно отделимой, если для любого элемента $a \in G$, не принадлежащего подгруппе H , существует гомоморфизм группы G на конечную группу, образ элемента a при котором не принадлежит образу подгруппы H .

Пусть $G = (A * B; H = K, \varphi)$ – свободное произведение групп A и B с подгруппами $H \leq A$ и $K \leq B$, объединенными в соответствии с изоморфизмом $\varphi: H \rightarrow K$. В 1969 году Н.С.Романовский доказал, что если в группах A и B все конечно порожденные подгруппы являются финитно отделимыми, то в обычном свободном произведении этих групп (когда объединяемые подгруппы H и K единичны) все конечно

порожденные подгруппы также финитно отделимы. С другой стороны, существует пример свободного произведения $G = (A * B; H = K, \varphi)$ групп A и B , все конечно порожденные подгруппы которых финитно отделимы, а объединяемые подгруппы H и K являются циклическими, содержащего неотделимую конечно порожденную подгруппу. Основным результатом данного сообщения является следующее достаточное условие наследования обобщенным свободным произведением свойства финитной отделимости всех конечно порожденных подгрупп:

Теорема. Пусть $G = (A * B; H = K, \varphi)$ – свободное произведение групп A и B с подгруппами H и K , объединенными в соответствии с изоморфизмом $\varphi: H \rightarrow K$. Пусть H является нормальной подгруппой группы A , K является нормальной подгруппой группы B и группы H и K удовлетворяют условию максимальности для подгрупп. Если в группах A и B все конечно порожденные подгруппы финитно отделимы, то и в группе G все конечно порожденные подгруппы финитно отделимы.

Среди ряда следствий этой теоремы в связи с приведенным выше примером представляет интерес утверждение о том, что если объединяемые подгруппы являются циклическими и нормальными, то группа G наследует от свободных множителей свойство финитной отделимости всех конечно порожденных подгрупп.

Э. Р. ХАМИДУЛИНА

Ивановский государственный университет

О ПОЧТИ АППРОКСИМИРУЕМОСТИ КОНЕЧНЫМИ π -ГРУППАМИ АБЕЛЕВЫХ ГРУПП

Пусть π – некоторое множество простых чисел. Группа G называется аппроксимируемой конечными π -группами, если для каждого ее неединичного элемента существует гомоморфизм группы G на конечную π -группу, переводящий этот элемент в элемент отличный от 1.

Напомним еще, что группа G называется почти аппроксимируемой конечными π -группами, если оно содержит подгруппу конечного индекса, которая аппроксимируема конечными π -группами.

В 2012 году в дипломной работе А.Г. Виноградовой был получен следующий критерий аппроксимируемости конечными π -группами для произвольной абелевой группы.

Абелева группа аппроксимируема конечными π -группами тогда и только тогда, когда она не содержит π -полных элементов, отличных от 1.

В своей дипломной работе автор настоящих тезисов исследует вопрос о почти аппроксимируемости конечными π -группами абелевых групп и доказывает, что для произвольной абелевой группы G без кручения следующие два условия равносильны между собой.

1. Группа G почти аппроксимируема конечными π -группами.

2. Группа G аппроксимируема конечными π -группами.

Для абелевых групп, имеющих кручение, эти условия уже не равносильны, но условие 2 достаточно для условия 1.

Для абелевых групп, имеющих кручение, критерий почти аппроксимируемости конечными π -группами получен в одной из работ Д. Н. Азарова, но только для случая, когда π состоит из одного простого числа. Распространить этот критерий на произвольное множество π автору настоящего доклада пока не удалось.

А. М. БУНАКОВА

Ивановский государственный университет

ИТЕРАТИВНЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ СИММЕТРИЧНЫХ ИГР

Итеративный метод решения матричных игр был предложен Г. Брауном и Дж. Робинсон. Идея метода – многократное фиктивное разыгрывание игры с заданной матрицей выигрыша. С ростом числа шагов процесса смешанные стратегии, которые приписываются игрокам, приближаются к их оптимальным стратегиям.

В данной работе рассматривается следующий алгоритм решения симметричных игр, то есть игр, платежная матрица A которых является кососимметрической.

Полагаем $u^{(0)} = 0$. На k -ом шаге, имея $u^{(k)}$, вычисляем $u^{(k+1)} = u^{(k)} + a^{(i_k)}$, где $a^{(i_k)}$ – i_k -ая строка матрицы A , при этом выбирается такая строка $a^{(i_k)}$, что u_{i_k} – минимальная компонента вектора $u^{(k)}$. Это означает, что игрок 1 выбирает такую строку, которая соответствует наибольшему суммарному проигрышу игрока 2.

Основным результатом работы является доказательство того, что $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\min u^{(k)}}{k} = 0$, где $\min u^{(k)} = \min_i u_i^{(k)}$.

С. Е. ВАГАНОВ

Ивановский государственный университет

РЕАЛИЗАЦИЯ НЕКОТОРЫХ АЛГОРИТМОВ РЕШЕНИЯ ПРОБЛЕМ ТОЖДЕСТВА И СОПРЯЖЕННОСТИ В ГРУППАХ

Пусть группа G имеет представление $\langle A; R \rangle$, где A — множество порождающих символов и R — множество определяющих соотношений. В бакалаврских работах О. Н. Терентьевой и М. П. Львовой был разработан класс Group языка C++ для представления конечно определенных групп и реализованы алгоритм перечисления всех слов, определяющих один и тот же элемент группы G , позволяющий решить проблему тождества для некоторых типов групп, и алгоритм проверки равенства элемента единице, доставляемый леммой Гриндлингера для 1/6-групп (т. е. для групп, удовлетворяющих строгому метрическому условию $C'(1/6)$).

Первым из основных результатов работы автора является дополнение указанного класса методами, реализующими алгоритмы решения проблем тождества и сопряженности для групп, удовлетворяющих строгим метрическим условиям $C'(1/4)$ и $T(4)$, а также алгоритм, решающий проблему сопряженности для 1/6-групп. За алгоритмическую основу взяты результаты М. Гриндлингера для 1/6-групп и групп, удовлетворяющих строгим метрическим условиям $C'(1/4)$ и $T(4)$ (см. *Р. Линдон, П. Шупп. Комбинаторная теория групп. М.: Мир, 1980, глава V, теоремы 4.6 и 5.4*).

При решении вышеописанной проблемы был реализован вспомогательный функционал, в который входят методы класса для проверки выполнения метрического условия $T(q)$, приведения слов к R -приведенному и R -циклически приведенному виду.

Вторым основным результатом служит уточнение полученных в бакалаврской работе М. П. Львовой оценок временной и емкостной сложности методов класса Group в лучшем и худшем случаях, а также аналогичная самостоятельно выполненная оценка сложностей всех вновь добавленных функций.

Н. С. ГОНИНА

Ивановский государственный университет

НЕКОТОРЫЕ АППРОКСИМАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА HNN-РАСШИРЕНИЙ ГРУПП

Пусть C — некоторый класс групп и X — некоторая группа. Через $C^*(X)$ будем обозначать семейство всех ко- C подгрупп группы X , то есть таких нормальных подгрупп этой группы, фактор-группы по которым принадлежат классу C .

Будем говорить, что подгруппа Y группы X отделима семейством Ω нормальных подгрупп данной группы, если $\bigcap_{N \in \Omega} YN = Y$. Полагая $\Omega = C^*(X)$, мы получаем хорошо известное определение подгруппы, отделимой в классе C . Напомним также, что группа X называется аппроксимируемой классом C , если ее единичная подгруппа C -отделима.

Через Φ будем обозначать класс всех свободных групп, а через $\Phi \cdot C$ — класс групп, каждая из которых представляет собой расширение некоторой свободной группы при помощи группы из класса C .

Основным результатом работы является следующая

Теорема. Пусть G — HNN-расширение группы A с подгруппами H и K , связанными относительно изоморфизма $\varphi: H \rightarrow K$, и пусть класс C удовлетворяет следующему условию:

$$\forall X, Y \in C^*(G) \exists T \in C^*(G) T \leq X \cap Y.$$

Пусть также подгруппы $\{1\}$, H и K отделимы в группе A семейством $C^*(G, A) = \{N \cap A \mid N \in C^*(G)\}$. Тогда:

1. Для каждого неединичного элемента $g \in G$, сопряженного с некоторым элементом подгруппы A , существует гомоморфизм группы G на группу из класса C , при котором g переходит в элемент, отличный от 1.

2. Для каждого неединичного элемента $g \in G$, не сопряженного ни с каким элементом подгруппы A , существует гомоморфизм группы G на группу из класса $\Phi \cdot C$, при котором g переходит в элемент, отличный от 1.

В частности, группа G аппроксимируется классом $\Phi \cdot C$.

Т. В. МАТВЕЕВА

Ивановский государственный университет

КОМБИНИРОВАННЫЙ МЕТОД МИНИМИЗАЦИИ ФУНКЦИОНАЛОВ НА ЛИНЕЙНЫХ НОРМИРОВАННЫХ ПРОСТРАНСТВАХ

Методы оптимизации являются одним из наиболее развивающихся и востребованных разделов математики. Все методы оптимизации можно разделить на два класса: методы безусловной и условной оптимизации. Наиболее распространенными задачами на практике являются задачи при наличии ограничений, то есть задачи поиска оптимального решения, удовлетворяющего некоторой системе ограничений. Однако безусловная оптимизация также представляет интерес, поскольку задачи условной оптимизации с помощью специальных методов могут быть сведены к задачам без ограничений. Одними из таких «специальных» методов являются методы штрафных функций, которые, в свою очередь, можно подразделить на методы внешней и внутренней точки. На практике эти методы часто используются в сочетании, образуя так называемый комбинированный алгоритм.

Комбинированные методы известны для конечномерных задач, но до сих пор остаются мало изученными на более общих пространствах. Автором рассмотрены комбинированные методы применительно к задаче:

$$J(u) \rightarrow \inf, u \in U,$$

где

$$U = \{u \in U_0 : g_i(u) \leq 0, i = \overline{1, s}; h_j(u) \leq 0, j = \overline{1, r}\}$$

или

$$U = \{u \in U_0 : g_i(u) \leq 0, i = \overline{1, m}; g_i(u) = 0, i = \overline{m+1, s}; h_j(u) \leq 0, j = \overline{1, l}; \\ h_j(u) = 0, i = \overline{l+1, r}\}.$$

$J(u); g_i(u), i = \overline{1, s}; h_j(u), j = \overline{1, r}$ определены на U_0 , где U_0 – множество из произвольного линейного нормированного пространства X .

Основной результат работы – описание условий сходимости метода для обоих типов ограничений.

Т. В. МОЧАЛОВА

Ивановский государственный университет

МЕТОД КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ КАК ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Метод конечных элементов (МКЭ) является эффективным методом решения самых разнообразных задач математической физики. Этот метод в своей основе является вариационным. МКЭ можно рассматривать как частный случай метода Ритца-Галёркина. Принципиальное различие между этими двумя методами лежит в построении базисных функций. В МКЭ базисные функции выбираются в виде сплайнов. Главная особенность этих функций состоит в их финитности. Это свойство влечет за собой разреженность и ленточную структуру матрицы жёсткости и устойчивость численного процесса решения системы. Важно отметить, что, вопервых, на практике построение базисных функций возможно только для некоторых специальных областей, и, во-вторых, соответствующие матрицы жесткости являются полными матрицами и очень часто даже для простых задач плохо обусловлены.

Пусть Ω – область в пространстве R^2 , Γ – ее граница. Рассмотрим в Ω дифференциальное уравнение $\Delta u = f$ с краевыми условиями $u = 0$ на Γ , где Δ – оператор Лапласа, $f \in C(\overline{\Omega})$. Эту задачу можно свести к задаче о минимуме функционала энергии, представив ее в операторном виде. Далее, применяя метод Ритца, решение операторного уравнения заменяют вариационной задачей минимизации функционала на системе конечномерных подпространств $\{H_n\}$ в энергетическом пространстве H_A . В Ω фиксируют конечное число точек x_1, x_2, \dots, x_K , называемых узловыми точками. Определяют значение функции u в этих точках. Область Ω приближенно представляют в виде объединения $\Omega = \bigcup \omega_e$, где ω_e – непересекающиеся по внутренним точкам подобласти, которые называют конечными элементами. Функцию u локально аппроксимируют на каждом конечном элементе непрерывными функциями f_e , однозначно определяемыми значениями u в узловых точках, принадлежащих этим элементам $x_k \in \omega_e$ ($k = 1, \dots, K$).

Изучается сходимость последовательности приближенных решений задачи к точному решению в зависимости от способа разбиения области на конечные элементы.

А. И. РУДАКОВ

Ивановский государственный университет

АППРОКСИМАЦИЯ ФУНКЦИЙ СФЕРИЧЕСКИМИ СПЛАЙНАМИ И ЕЕ ПРИМЕНЕНИЕ В ЗАДАЧАХ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Рассматриваются задачи приближения функций, определенных на сферических поверхностях. В качестве аппроксимирующего аппарата применяются натуральные сферические сплайны, решающие задачи интерполяции и сглаживания. Построение этих сплайнов можно осуществить через решение следующих экстремальных задач.

Пусть в евклидовом пространстве \mathbf{R}^n на сфере S^{n-1} задано N точек x_j , а также задано столько же вещественных чисел y_j , $j = 1, \dots, N$. Поставим задачу выбора среди всех гладких функций f , определенных на сфере S^{n-1} и удовлетворяющих интерполяционным условиям $f(x_j) = y_j$, $j = 1, \dots, N$, наиболее «плавной». В качестве критерия «плавности» принимается минимум квадратичного интеграла $\int_{S^{n-1}} (\Delta^m f)^2 d\omega$, где Δ – оператор Лапласа-Бельтрами (сферическая составляющая оператора Лапласа на сфере S^{n-1}), $d\omega$ – элемент $(n-1)$ -мерного объема сферы S^{n-1} , m – целое неотрицательное число, Δ^m – полигармонический оператор. Решением такой экстремальной задачи в классе гладких функций оказывается единственная функция – натуральный сферический интерполяционный сплайн. Если вместо условий интерполяции функция f удовлетворяет менее жестким, чем условия интерполяции, условиям $|f(x_j) - y_j| \leq \delta_j$, где δ_j , $j = 1, \dots, N$ – также заданные (вместе с x_j и y_j) положительные числа, то при минимизации того же функционала «плавности» получаем в качестве единственного решения так называемый натуральный сферический сглаживающий сплайн. Рассматриваются вопросы погрешности приближения гладких функций натуральными сферическими сплайнами.

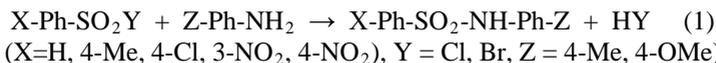
Наряду с классическими сферическими многочленами натуральные сферические сплайны – интерполяционные и сглаживающие – являются удобным средством приближенного представления функций в математических моделях различных стационарных процессов, в первую очередь, моделях геофизических явлений (при изучении магнитного поля Земли) и в моделях электромагнитных процессов деятельности коры головного мозга.

Т. А. БОГДАНОВА

Ивановский государственный университет

**АЦИЛИРОВАНИЕ АНИЛИНОВ
БЕНЗОЛСУЛЬФОНИЛГАЛОГЕНИДАМИ:
КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЙ АСПЕКТ**

Для характеристики реакционной способности органических соединений успешно используется квантовохимическая теория функционала плотности и развитие на ее основе представления о электронном химическом потенциале (μ), жесткости (η), электрофильности (ω) реагентов как глобальных динамических индексах реакционной способности (ИРС) и функции Фукуи как локальной характеристики реакционных центров (FF).



Для анализа реакционной способности ядернозамещенных ArSO₂X (X=Cl, Br) в S_NS-реакции (1) аминирования *para*-толуидином и 4-метоксианилином в среде PhNO₂ и бинарной среде 2-PrOH - MeNO₂ проведен расчет структур молекул ArSO₂X в газофазном приближении и в среде MeCN и 2-PrOH (PM6 и M06/6-311+G*, PCM, NWChem ver. 6.0). Определены уровни энергии граничных орбиталей для оценки глобальных ИРС и заряды на атоме сульфонильной серы в схемах Хиршфельда и АРТ для оценки FF. ИРС определены из соотношений $\mu = 0.5*[E(\text{HOMO}) + E(\text{LUMO})]$, $\eta = 0.5*[E(\text{LUMO}) - E(\text{HOMO})]$, $\omega = \mu^2/2\eta$, $\text{FF} = Q(\text{S}^-) - Q(\text{S}^0)$ (заряды на атоме S серы в анионе и нейтральной молекуле). Анион субстрата моделирует интермедиат процесса переноса электронной плотности с амина на ArSO₂X. Соотношение между реакционной способностью ArSO₂X и их электрофильностью линейно. Симбатный характер зависимостей между реакционной способностью ArSO₂X при их взаимодействии с *para*-толуидином в среде 2-PrOH-MeNO₂ согласуется с электрофильным характером сульфонилхлоридов как реагентов. Увеличение чувствительности реакции к изменению электрофильности при увеличении доли 2-PrOH в бинарной среде с одновременным увеличением констант скоростей согласуется с антибатной зависимостью реакционной способности

сульфонилхлоридов от локальной электрофильности реакционного центра и указывает на анионоидный отрыв уходящей группы (хлорид-аниона) как стадию, лимитирующую скорость процесса для сульфонилхлоридов.

Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф. Е. Н. Крылова

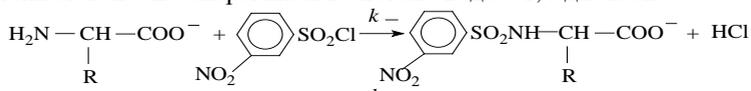
С. З. ГАРИПОВА

Ивановский государственный университет

РЕКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ *L*-АСПАРАГИНА В АРЕНСУЛЬФОНИЛИРОВАНИИ В ВОДНОМ 1,4-ДИОКСАНЕ

Целый ряд биохимических процессов с участием аминокислот связан с их *N*-ацилированием, в ходе этого взаимодействия образуются ациламиноокислоты, обладающие широким спектром действия.

Нами изучены кинетические закономерности реакции 3-нитробензолсульфонилхлорида (3-НБСХ) с алифатической α -аминокислотой – *L*-аспарагином в системе вода – 1,4-диоксан:



Здесь $\text{R} = \text{CH}_2\text{CONH}_2$. Исследование кинетики аренсульфонилирования *L*-аспарагина 3-НБСХ проводилось спектрофотометрическим методом. Для расчета активационных параметров измерения констант скоростей реакции выполняли при 3 значениях температуры с шагом в 5 К (см. табл.).

Кинетические характеристики реакции аспарагина с 3-НБСХ
в водном 1,4-диоксане ($\omega_{\text{H}_2\text{O}} = 40$ мас. %)

T , К	$T^1 \cdot 10^3$, К ⁻¹	$k \cdot 10$, л·моль ⁻¹ ·с ⁻¹	$E_{\text{акт}}$, кДж·моль ⁻¹	ΔH^\ddagger_{298} , кДж·моль ⁻¹	$-\Delta S^\ddagger_{298}$, Дж·моль ⁻¹ ·К ⁻¹
298	3,36	2,78	66,5 ± 2,5	64,0 ± 2,5	199 ± 10
303	3,30	3,02			
308	3,25	3,16			

Как следует из данных таблицы, изменение энтальпии активации изучаемой реакции существенно превышает величины

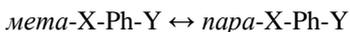
ΔH_{298}^\ddagger , полученные ранее для реакций с участием алифатических аминокислот (в среднем в 1,5–4 раза), а величина $-\Delta S_{298}^\ddagger$ является более отрицательной. Это может свидетельствовать о большей упорядоченности активированного комплекса «аспарагин–3-НБСХ» по сравнению с активированными комплексами 3-НБСХ с глицином, аланином, валином и лейцином.

*Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф.
Т. П. Кустовой*

А. А. ГОРПИНЮК
Ивановский государственный университет

КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЙ АСПЕКТ РАВНОВЕСИЙ ДИЗАМЕЩЕННЫХ БЕНЗОЛА

В соответствии с развиваемой на основе концептуальной DFT концепцией химической жесткости (η) любая химическая система в своем развитии стремится к достижению состояния с максимальной жесткостью и минимальной электрофильностью (ω) (поляризуемостью). При температурах выше 100-120°C реакции ароматического замещения становятся обратимыми, что приводит к установлению равновесия между *мета*- и *пара*-дизамещенными бензола в соответствии со схемой



Для анализа соответствия экспериментальных данных принципу максимальной жесткости проведен расчет структур 52 молекул *мета*- и *пара*-дизамещенных бензола с заместителями донорного и акцепторного характера при 298 и 450K. Рассчитаны общие энергии молекул (E_{TOT}), энергии граничных орбиталей (E_{LUMO} , E_{HOMO}) и параметры жесткости (η), определяемой в виде $\eta = 0.5 \cdot (E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}})$ в среде NWChem ver. 6.0 (PM6 и DFT M06/6-311+G*). Проведен статистический корреляционный анализ соответствия между $\lg M/P$ и ΔE_{TOT} ($\Delta \eta$) соответствующих изомеров. Обнаружено, что увеличение жесткости изомера (обычно *мета*-, хотя встречаются и отклонения от этого правила, что согласуется с литературными данными по изомерному составу фторбензолсульфонокислот [4]) приводит к увеличению относительного содержания изомера в равновесной смеси. Метод PM6 позволяет рассчитать параметры молекул, дающие аналогичные по качеству линейные соотношения между указанными параметрами сравнительно с методом M06/6-311+G*. Соотношение между жесткостью и электрофильностью (обратно

пропорциональными мягкости и поляризуемости) антибатно в обоих методах расчета указанных величин и согласуется с представлениями концептуальной теории DFT. **Обнаруженные закономерности свидетельствует о соблюдении принципа максимальной жесткости и минимальной поляризуемости для мета-/пара-равновесия дизамещенных бензола.**

Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф. Е. Н. Крылова

Н. Э. ДУБИНИНА

Ивановский государственный университет

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ИОНОВ НИКЕЛЯ, СВИНЦА И СУЛЬФИДА В СТОЧНЫХ ВОДАХ

В Ивановской области самыми распространёнными направлениями в производстве являются текстильное и машиностроительное, которые, с одной стороны, приводят к оживлению гальванического и отделочного производства, но, с другой сдерживаются его высокой экологической опасностью. Соединения металлов, выносимые сточными водами гальванического производства, весьма вредно влияют на экосистему водоем–почва–растение–животный мир–человек. При гальванопокрытии неизбежно образуются токсичные сточные воды, содержащие тяжелые металлы, такие как хром, никель, медь, цинк. Тяжелые металлы обладают высокими канцерогенными и мутагенными воздействиями на живые организмы. Содержание сульфидов в питьевой воде выше санитарных норм также оказывает вредное воздействие на здоровье человека.

Представляло интерес определить содержание ионов никеля, свинца и сульфида в промышленных сточных водах методом спектрофотометрии. Разработать метод очистки сточных вод от ионов никеля, свинца и сульфида натрия. В качестве объектов исследования были взяты сточные воды гальванических и текстильных предприятий Ивановской области.

В ходе работы были исследованы образцы сточных вод. К образцу воды гальванического производства добавляли сульфид натрия. Выпавший осадок отделяли от раствора, к отфильтрованному раствору добавляли нитропруссид и определяли оптическую плотность с помощью спектрофотометра. Затем по графику определяли содержание оставшегося сульфида.

Из материального баланса определяли количество никеля или свинца в исходном растворе и сравнивали его с ПДК сточных вод.

Полученные данные показали, что содержание никеля, свинца и сульфида в сточных водах предприятий Ивановской области, измеренное до очистки, превышает предельно допустимую норму, что может пагубно отразиться на здоровье жителей области, следовательно, эту воду необходимо пропускать через очистные сооружения. В качестве очистки сточных вод от сульфида натрия можно предложить реагентный метод, т.е. очищать сточные воды текстильного производства (с содержанием сульфида натрия) сточными водами гальванического производства (с содержанием ионов тяжёлых металлов). Этот метод является самым прогрессивным и дешёвым, т.к. не требует ввода реагентов.

*Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук
С. В. Макарова, доц. Т. Б. Хоченковой*

Д. О. ЕФИМОВА
Ивановский государственный университет

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ С НУКЛЕОФИЛАМИ: КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЙ АСПЕКТ

Для анализа и характеристики реакционной способности органических соединений используются различные подходы, в том числе метод динамических квантовохимических индексов реакционной способности (ИРС), основанных на теории DFT. К таким ИРС относятся электрофильность (ω) и индекс нуклеофильности (ω^-), учитывающий свойства как реагента, так и нуклеофила. Для реакций хлорангидридов карбоновых кислот и их сложных эфиров данный метод ранее не был применен.

Процессы замещения галогенов в ацилах, спиртовых и фенольных радикалов аминами (1, 2) относятся к реакциям $S_N(C=O)$, что делает его родственным в качестве реакционного центра ароматическому атому углерода (X, Y – заместители в ароматических кольцах).



Взаимодействие $XPhCOCl$ с $YPhNH_2$, для которого параметр ω^- определен по соотношению $\omega^- = 0.5 \cdot \eta(Nu) \cdot [\mu(Nu) - \mu(E)]^2 / [\eta(Nu) -$

$\eta(E)]$, где μ - электронный химический потенциал, η - квантовохимическая жесткость реагентов, имеет место линейная корреляция $\lg K$ и ω ($R^* = 0.847$), $P = 0.026$, которая согласуется с физическим смыслом индекса электрофильности как показателя нуклеофильной силы ароматических аминов. Аминолиз замещенных бензоилхлоридов анилином в среде MeCN описывается аналогичной корреляцией $\lg K$ и ω ($R = 0.978$). Введение учета растворителя (MeCN) в рамках метода PCM не меняет вида соотношения. Аналогичное соотношение между реакционной способностью и ω получено для реакции нитрофениловых эфиров бензойной кислоты с пиперидином в среде бинарного растворителя H_2O - 2-пропанол (50:50 масс%). Расчет ИПС в газовой фазе, PM6.

Таким образом, теория DFT ИПС в целом удовлетворительно описывает реакционную способность замещенных бензоилхлоридов и нитрофениловых эфиров бензойной кислоты при их взаимодействии с замещенными ароматическими аминами на уровне полуэмпирического метода PM6 и учета влияния растворителя методом PCM.

Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф. Е. Н. Крылова

А. Ю. МОЧАЛОВА

Ивановский государственный университет

СЕЛЕКТИВНОСТЬ РЕАКЦИИ АРОМАТИЧЕСКОГО БРОМИРОВАНИЯ

С позиций теории квантовохимических индексов реакционной способности рассмотрена субстратная селективность реакции бромирования бензола и полиметилбензолов (ПМБ). Проведен расчет (NWChem ver. 6.0) структур (ПМБ) и их катион-радикалов как модели переходного состояния реакции ароматического бромирования (по Хэммонду) (DFT B3LYP/6-311+G* и M06/6-311+G*) (AcOH, PCM) с **учетом специфической сольватации AcOH**. Определены (рассчитаны) величины функций Фукуи (FF) (заряды по Хиршфельду), энергии граничных орбиталей, жесткость, мягкость, поляризуемость (Q_{zz}) и электрофильность субстратов. Корреляционный анализ соответствия между $\lg K_{rel}$ ПМБ в реакции бромирования их Br_2 в AcOH обнаруживает симбатную зависимость между реакционной способностью и мягкостью субстратов, соответствующую физическому смыслу взаимодействия «мягкий-мягкий», и антибатные

зависимости с жесткостью и электрофильностью. Наличие корреляции между относительной реакционной способностью и Q_{zz} указывает на необходимость нуклеофильного содействия субстрата атакующему реагенту (поляризованной молекуле Br_2) и нековалентное связывание молекулярного брома в предреакционном комплексе, что согласуется с литературным экспериментом.

В целом теоретическая концепция HSAB (ЖМКО) достаточно адекватно описывает реакционную способность полиметилбензолов в реакции бромирования в среде AcOH .

Работа выполнена под руководством д-ра хим. наук, проф. Е. Н. Крылова

Научная конференция
«АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ
СОВРЕМЕННОГО ЕСТЕСТВОЗНАНИЯ»

Секция
«БИОЛОГИЯ»

<i>Ахутина С. О.</i> Проект восстановления парадной части усадебного парка Куваевых.....	3
<i>Безсинная Н. И.</i> Особенности флоры песчаных карьеров.....	4
<i>Бесшапошникова А. Г.</i> Гемоцитарная формула шмелей.....	5
<i>Бучукури Л. В.</i> Исследование мнотропной активности и нейропротекторных свойств новых фторпроизводных гамма-карболинов.....	6
<i>Вещицкий А. А.</i> Исследование функциональных коррелятов цитохромоксидазных блобов зрительной коры кошки.....	7
<i>Гавришева Н. В.</i> Разработка технологии выявления ранних маркеров дезадаптивных послестрессовых сердечно-сосудистых заболеваний.....	8
<i>Голубева М. И.</i> Влияние резонансной вибрации на процессы регенерации поврежденных тканей.....	9
<i>Груздева Н. С.</i> Особенности церебрального кровотока у студенток с разным индексом напряжения.....	10
<i>Данилова Е. И.</i> Иммуногистохимическое исследование экспрессии продукта раннего гена <i>c-fos</i> как способ выявления колонок глазодоминантности в зрительной коре кошки.....	11
<i>Доманина А. Д.</i> Влияние водорастворимых аминокислотных производных фуллерена C_{60} на индуцирование ПОЛ.....	12
<i>Зубкова О. А.</i> Гнездовая экология серой мухоловки и мухоловки-пеструшки на территории спортлагерей побережья Рубского озера.....	13
<i>Каликина Л. Н.</i> Особенности церебрального кровотока у курсантов под влиянием учебной деятельности.....	14
<i>Касаринская О. В., Виноградова Д. Е.</i> Действие производных γ -карболинов на функциональные характеристики митохондрий мозга крыс.....	15
<i>Киселёва Ю. С.</i> Окислительно-восстановительный баланс крови крыс при хроническом потреблении антиоксиданта-кверцетина и регулярной беговой нагрузке.....	16

<i>Любимова А. С.</i> Распределение крупных клеток в слое 5 первичной зрительной коры кошек в норме и при нарушении бинокулярного зрения.....	17
<i>Меньшикова Е. В.</i> Проявление учебного стресса у студентов.....	18
<i>Михайлова О. А.</i> Изменение параметров внимания первоклассников за год обучения.....	19
<i>Мишагина Д. А.</i> Виды семейства орхидные во флоре памятника природы «Рубское озеро».....	20
<i>Моисеева А. А.</i> Методы оценки оксидативного стресса.....	22
<i>Мокеева С. С.</i> Формирование коллекции многолетних декоративно-лиственных растений в ботаническом саду ИвГУ.....	23
<i>Никитина Т. В.</i> Влияние водорастворимых производных фуллеренов C ₆₀ на каталитическую активность мембраносвязанных ферментов моноаминоксидазы-А и моноаминоксидазы-В.....	24
<i>Полетаева Д. А., Файнгольд И. И., Корнев А. Б., Хакина Е. А.</i> Влияние водорастворимых поллизамещенных производных фуллеренов на каталитическую активность цитохром С-оксидазы.....	25
<i>Попова Е. А., Хижекко А. В.</i> Выявление донозологических маркеров дезадаптивных расстройств у специалистов экстремального профиля.....	26
<i>Разорвина Ю. Н.</i> Введение цветочных и других культур в композицию розария ботанического сада.....	27
<i>Русова С. С., Балакина А. А., Мумятова В. А.</i> Влияние комплексов платины на экспрессию генов в клетках линии hela.....	28
<i>Рыбкин А. Ю., Горячев Н. С., Белик А. Ю., Файнгольд И. И., Костюк Г. В., Терентьев А. А., Корнев А. Б., Трошин П. А., Котельников А. И.</i> Диады фуллерен-краситель как потенциальные фотосенсибилизаторы для медицины.....	29
<i>Сивоконь К. Д.</i> Проект озеленения малого сада.....	30
<i>Сивухин А. Н.</i> Комплексная оценка состояния окружающей среды близ реки Уводь в г. Иванове.....	31
<i>Ситникова К. И.</i> Влияние умственных нагрузок разной интенсивности на функциональное состояние студенток с разным типом темперамента.....	32
<i>Слащанина Я. А.</i> Дневные хищные птицы Клязьминского республиканского боброво-выхухолевого заказника.....	33

Смолина А. В., Полетаева Д. А., Файнгольд И. И., Рыбкин А. Ю. Молекулярные механизмы нейропротекторного действия водорастворимых полизамещенных производных фуллерена C ₆₀	34
Спиридонова А. А. Проектирование экспозиции в японском стиле на территории ботанического сада ИВГУ.....	35
Федотова Н. М. Ржавчинные грибы города Кохма.....	36
Худякова Е. А. Генетический анализ структуры смешанного поселения больших белоголовых чаек на торфокомплексе Большое болото.....	37
Часов Д. В. Особенности гнездования золотистой шурки в условиях расширения ареала.....	38
Чекунова Е. А. Флора старинного усадебного парка А. С. Татищева.....	39
Шувалова Л. С. Изучение возможности объективной оценки СРПВ для мониторинга стрессогенного состояния у специалистов экстремального профиля.....	40

**Секция
«ХИМИЯ»**

Аккуратов А. В., Сусарова Д. К., Новиков Д. В., Хакина А. Е., Мухачева О. А., Трошин П. А. Направленный дизайн сопряженных полимеров для органических солнечных батарей.....	41
Арбузов А. А., Мурадян В. Е. Композиционные материалы на основе графена.....	42
Базанова М. А. Смешаннолигандное комплексообразование комплексонатов меди(II) и никеля с аминокислотами в водном растворе.....	43
Бережнева Ю. А., Федоров М. С. Природа семиполярной связи в N-оксидах пиридина по результатам NBO-анализа.....	44
Гапон Е. В., Яшкова Е. В. Сложные эфиры(р-(N-галактозилиден)аминобензойной кислоты, синтез и свойства.....	45
Дицина О. Ю. Кинетика реакций образования амидной связи с участием эфиров бензойной и уксусной кислот.....	46
Калмыков П. А. Сравнение характеристик палладий-содержащих катализаторов гидрирования.....	47
Киселева И. С., Магдалинова Н. А. Каталитические свойства 1% Pd-PEG-4000/ZnO в гидрировании.....	48
Козьявина Ю. В., Федоров М. С. Конформационные особенности	49

группы–NH–NH ₂ на примере гидразида бензолсульфо- кислоты.....	
Кузьмичева Ю. В. Разработка огнезащитных составов для тканей специального назначения на основе коммерческого препарата «Аффламит».....	50
Лапыкина Е. А., Петрова Д. А., Ощепкова Л. Р. Флуоресцентные метки. Строение молекулы Дансил Амида.	52
Малкова Я. М. Электронографическое и квантово-химическое исследование строения молекулы 1,5-нафталиндисульфо- нилхлорида (1,5- НафДСХ).....	53
Меньшикова И. А., Федоров М. С. Электронные эффекты и групповая электроотрицательность заместителей в молекулах бензолсульфоокислот.....	54
Неманова О. Н., Терехова И. В. Изучение возможности получения капсулированных форм витаминов группы В...	55
Никитина Е. В. Реакционная способность алифатических аминов в аренсульфонилровании.....	56
Пайкова М. Г. Квантово-химическое моделирование механизма ацилирования п-аминобензойной кислоты.....	57
Россини Ю. П., Сидорова Н. М. Гидрогалоидирование галогенариллов в присутствии палладиевых катализаторов	58
Соболева Ю. В. Изучение водородных связей при терминальном взаимодействии двух молекул пентилового эфира п-(N- глюкозилиден)аминобензойной кислоты.....	59
Соловьев В. Н., Яшкова Е. В. Определение содержания влаги в металлополимерном носителе катализатора АВ-17-8-Pd гравиметрическим методом.....	61
Федоров М. С. Экспериментальное и теоретическое исследование строения <i>пара</i> -метил- и <i>мета</i> - нитробензолсульфоокислоты.....	62
Чипурина А. В. Диэлектрические свойства акрилоилокси- фениловых эфиров п-н-алкилоксибензойных кислот.....	63
Шишкина Ю. П. Изучение кинетики N-ацилирования L-серина сложным эфиром в водно-органическом растворителе.....	64
Шумилова Н. Ю. Исследование комплексообразования ампициллина с ионом Со(II) в водном растворе потенциометрическим методом.....	65
Научная конференция школьников в рамках профильной школы «ХИМИЯ ДЛЯ ЛЮБОЗНАТЕЛЬНЫХ»	
Кустова Т. П. Исследовательская работа школьников в рамках	66

профильной школы «Химия для любознательных».....

- Андреева А. В., Коришупова И. Е., Калмыков П. А.** Приготовление катализатора гидрирования на основе палладийсодержащего восстановленного оксида графена.. 67
- Байда М. М., Веретенникова А. В.** Определение йодного и кислотного чисел растительных масел..... 68
- Глазунова Л. А., Шлыкова П. С., Моторина Д. С., Дицина О. Ю.** Количественное определение витамина С в различных продуктах и влияние на его содержание сока огурца..... 69
- Шлыкова П. С., Моторина Д. С., Глазунова Л. А., Дицина О. Ю.** Исследование синтетических моющих средств..... 70
- VIII Научная конференция молодых ученых
«ЖИДКИЕ КРИСТАЛЛЫ И НАНОМАТЕРИАЛЫ»**
- Бумбина Н. В., Знойко С. А.** Компьютерное моделирование и прогноз мезоморфизма смешаннозамещенных фталоцианинов на основе молекулярных параметров..... 72
- Грачева К. А., Тихомирова Т. В.** Синтез и свойства тетра-(4-г-фенилазо)-фталоцианинов меди..... 73
- Груздева О. М., Тихомирова Т. В.** Синтез и свойства тетра-4-гетерилазо-фталоцианинов кобальта..... 74
- Казак А. В.** Оптические и электрооптические свойства производных порфина в тонких пленках..... 75
- Ковалёва М. И.** Конструирование и прогноз ахирального и хирального мезоморфизма звездообразных производных трифенилена..... 76
- Коптяев А. И., Якубов Л. А.** Темплатный синтез комплексов тетрабензопорфирина с редкоземельными элементами..... 77
- Кривова А. В., Зубкова О. Н., Знойко С. А.** Синтез и свойства октадецилсульфамойлпроизводных фталоцианинов меди, сочетающих бензотриазолил- и арилоксигруппы..... 78
- Крылова М. Е., Знойко С. А., Борисов А. В.** Синтез и исследование физико-химических свойств 2,3-дикарбокси-1,4-дихлорантрахинонов и металлопорфиразинов на их основе..... 79
- Мартынюк Т. А., Губарев Ю. А.** Взаимодействие карбоксизамещенных фталоцианинов цинка с бычьим сывороточным альбумином..... 80

<i>Москвин Д. О., Соцкий В. В.</i> Сравнение производительности алгоритмов расчета ван-дер-ваальсовых взаимодействий для метода молекулярной динамики на многопроцессорных системах с общей и смешанной памятью.....	81
<i>Попова М. Н., Терентьев В. В.</i> Исследование влияния концентрации жидкокристаллических присалок на трибологические характеристики индустриального масла.	82
<i>Романовская А. О.</i> Определение растворимости макрогетероциклов с фрагментами 1,3,4-тиадиазола в индивидуальных растворителях.....	83
<i>Сальникова М. А.</i> Ацилирование гидроксифенилпорфиринов....	84
<i>Сергеев С. А.</i> Реологические модели течения различных жидкостей.....	85
<i>Смирнов Е. В., Петрунин С. Ю.</i> Разработка нового неразрушающего метода контроля деформаций и внутренних напряжений изделий и конструкций на основе наномодифицированных цементных композитов...	86
<i>Смирнова А. С., Корельчук М. В., Борисов А. В.</i> Синтез и исследование физико-химических свойств комплексов лютеция «сэндвичевого» типа, содержащих фрагменты тетраантрахинонопорфиразина и несимметричных фталоцианинов.....	87
<i>Соловьева Е. В.</i> Растворимость трет-бутилнитрозамещенных фталоцианинов в индивидуальных растворителях.....	88

Научная конференция

«ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ФИЗИКИ»

Секция

«ОБЩАЯ И ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ»

<i>Балакирева Н. М.</i> Подготовка к реализации ФГОС будущими учителями посредством подготовки к использованию современных педагогических технологий в обучении физике.....	90
<i>Барановский В. А.</i> Традиционные и инновационные методы в профильном обучении учащихся физике.....	91
<i>Бойцова Е. И.</i> Коучинг как решение одной из проблем адаптации молодого специалиста в школе.....	92
<i>Виноградова Е. С.</i> Некоторые современные образовательные технологии при формировании универсальных учебных действий в курсе физики основной школы.....	93

<i>Володина Т. С.</i> Задачи с проблемным содержанием на уроках физики в основной школе.....	94
<i>Дмитриева О. А., Федотова М. В.</i> 3D-RISM исследование ион-молекулярного комплексообразования цвиттер-иона аланина с неорганическими ионами в биологически важных водных растворах электролитов.....	95
<i>Маслов А. А.</i> Информатизация образовательных учреждений....	96
<i>Хохлова О. А.</i> Использование художественной литературы на уроках физики в классах гуманитарного профиля.....	97
Научная конференция	
«ПРОБЛЕМЫ СОВРЕМЕННОЙ МАТЕМАТИКИ»	
<i>Секция</i>	
«КОМПЬЮТЕРНЫЕ НАУКИ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ»	
<i>Байбородина А. Е.</i> Электронное учебно-методическое пособие по языку программирования Ассемблер.....	99
<i>Коннова О. Е.</i> Создание электронной системы контроля работы сотрудников в программе «1С:Предприятие».....	100
<i>Мотова Ю. Д.</i> Обеспечение информационной безопасности в кредитной организации на примере АКБ «Акция» ОАО....	101
<i>Стройкова А. М.</i> Создание системы электронного ведения торгового учета на предприятии.....	102
<i>Тимофеева Е. В.</i> Разработка Web-приложения «Моя профессия-радиомеханик».....	103
<i>Титова Е. М.</i> Разработка системы «Свод отчетов» в 1С: Предприятие 8.2.....	104
<i>Секция</i>	
«АЛГЕБРА, МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ЛОГИКА И ДИСКРЕТНАЯ МАТЕМАТИКА»	
<i>Власова Д. В.</i> Группы с конечным числом подгрупп конечного индекса.....	105
<i>Гольцов Д. В.</i> О почти аппроксимируемости свободных произведений групп корневыми классами конечных групп.....	106
<i>Еремин В. А.</i> О финитной отделимости циклических подгрупп..	107
<i>Розов А. В.</i> Об аппроксимируемости конечными π -группами свободных произведений нильпотентных групп конечного ранга с центральным объединением.....	108
<i>Титова Е. М.</i> Мультиграфы, коннекторные схемы, матрицы над булевыми алгебрами.....	109

Туманова Е. А. Об аппроксимируемости конечными π -группами обобщенных свободных произведений с нормальной объединенной подгруппой.....	109
Ускова А. А. О финитной отделимости подгрупп обобщенных свободных произведений групп.....	110
Хамидулина. Э. Р. О почти аппроксимируемости конечными π -группами абелевых групп.....	111

Секция

«ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА»

Бунакова А. М. Итеративный метод решения симметричных игр	113
Ваганов С. Е. Реализация некоторых алгоритмов решения проблем тождества и сопряженности в группах.....	114
Гонина Н. С. Некоторые аппроксимационные свойства HNN-расширений групп.....	115
Матвеева Т. В. Комбинированный метод минимизации функционалов на линейных нормированных пространствах.....	116
Мочалова Т. В. Метод конечных элементов как вариационный метод решения уравнений математической физики.....	117
Рудаков А. И. Аппроксимация функций сферическими сплайнами и ее применение в задачах математического моделирования.....	118

Секция

«ХИМИЯ»

Подсекция 2

Богданова Т. А. Ацилирование анилинов бензолсульфонилгалогенидами: квантовохимический аспект.....	119
Гарипова С. З. Реакционная способность <i>L</i> -аспарагина в аренсульфонилировании в водном 1,4-диоксане.....	120
Горпинюк А. А. Квантовохимический аспект равновесий дизамещенных бензола.....	122
Дубинина Н. Э. Определение содержания ионов никеля, свинца и сульфида в сточных водах.....	123
Ефимова Д. О. Взаимодействие функциональных производных карбоновых кислот с нуклеофилами: квантовохимический аспект.....	124

Подписано в печать 12.04.2012 г.
Формат 60 x 84 1/16. Бумага писчая. Печать плоская.
Усл. печ. л. 7,9. Уч.-изд. л. 5,9. Тираж 100 экз.

Издательство «Ивановский государственный университет»
153025 Иваново, ул. Ермака, 39
(4932) 93-43-41. E-mail: publisher@ivanovo.ac.ru