



БАЛТИЙСКИЙ НАУЧНО-ИНЖЕНЕРНЫЙ КОНКУРС 2022

Санкт-Петербург, 21-26 марта 2022 года

Получение магнитных нефтяных сорбентов методом совместной утилизации древесных опилок и железосодержащего шлама водоподготовки

«Химия»

*Куприянец Любовь Олеговна, Усова Надежда Терентьевна (научный руководитель, Кандидат технических наук),
место выполнения работы: В школе*

Нефть и нефтепродукты являются одним из сильнейших загрязняющих факторов окружающей среды во всем мире. Соответственно разработка технологий производства и применения нефтесорбентов является одной из самых актуальных задач в мире. Магнитоуправляемые сорбенты позволяют значительно упростить сбор нефти с водной поверхности, а вовлечение различных отходов в производство подобных сорбентов позволит минимизировать количество этих отходов и снизить себестоимость получаемых сорбентов. Целью проекта было получение нефтепоглощающих магнитных сорбентов совместной утилизацией древесных опилок и железосодержащего шлама водоподготовки. Гипотеза: железосодержащий шлам, образующийся на фильтровальных сооружениях станции водоподготовки Томского водозабора, может служить основой для получения магнетита.

Использованные методы: карбонизация, гидрофобизация, определение нефтеёмкости, степени карбонизации, плавучести, насыпной плотности, магнитных свойств. Основные инструменты: колбы, электронные весы, стеклянные палочки, калька, магнит, вытяжной шкаф, муфельная печь, нагревательная плитка. Экспериментальная часть проводилась в лаборатории 16Б корпуса НИИ ТПУ.

В работе были использованы березовые и сосновые опилки. Опилки пропитывали 2, 3, 4 и 5% водной суспензией гетита, высушивали и прокаливали до 600°C в течение 30 мин. в муфельной печи. При этом происходила карбонизация образцов и активация частицами образующихся оксидов железа. Далее сорбенты подвергали гидрофобизации раствором стеариновой кислоты в диэтиловом эфире и исследовали по стандартным методикам на плавучесть и нефтеёмкость.

Полученные результаты показали: 1. Функционирующие магнитные сорбенты могут быть получены при карбонизации сосновых и березовых опилок с добавлением железосодержащего шлама водоподготовки. 2. По исследуемым характеристикам (выход сорбента после карбонизации, насыпная плотность, нефтеёмкость) получены для образцов и сосновых опилок.



БАЛТИЙСКИЙ НАУЧНО-ИНЖЕНЕРНЫЙ КОНКУРС 2022

Санкт-Петербург, 21-26 марта 2022 года

Спиртовое брожение дрожжей в космосе

«Химия»

Антонова Алёна Германовна, Шарифуллина Алина Шамилевна (научный руководитель, Учитель физики), место выполнения работы: Учебный центр Антарес

В настоящее время ученые работают над идеей постройки колонизаций на других планетах. Прежде чем самим начинать заселение планеты, мы обязаны изучить жизнедеятельность других живых организмов. Дрожжи – хорошие кандидаты на эту роль. Брожение – метаболический процесс получения энергии из сахаров, не нуждающийся в наличии кислорода, в результате которого образуются органические соединения (этанол и углекислый газ). Главной задачей является изучение процесса брожения в стратосфере (макс. высота 24 км) на прототипе аппарата CubeSat 3U, который также будет разработан. Данная тема не изучалась с 1997 года.

1. Химический эксперимент (лаборатория). 2. Проектирование (технопарк). 3. Наблюдение (лаборатория). 4. Проектирование орбит (GMAT). 5. 3D-моделирование (Fusion Autodesk).

Успешно была протестирована система обеспечения эксперимента. При комфортной для процесса температуре концентрация углекислого газа росла. Это подтверждает то, что процесс брожения в данных условиях возможен. Наши гипотезы подтвердились. Обозначено влияние герметизации и невесомости на процесс брожения.

Возможно дальнейшее изучение процесса как на орбите, так и в лаборатории. Применение доказанных благоприятных условий в производстве для ускорения процесса брожения и повышения его эффективности. Также возможно изучение дрожжей как организмов для расширения биологических справочников.



Водный синтез нанопорошков ZnO в присутствии SDS и n-PnOH для фотокаталитического разложения метиленового синего

«Химия»

Давиденко Николай Константинович, Клименко Алексей Алексеевич (научный руководитель, Инженер), место выполнения работы: дома

Одним из способов утилизации органических соединений является фотокатализ. Оксид цинка обладает подходящими свойствами для использования в качестве фотокатализатора. ZnO является перспективным фотокатализатором, показывающим высокую активность, низкую токсичность, легко синтезируется, обладает высокой термической стабильностью, хорошей химической и механической устойчивостью, а также низкой ценой производства. Получение фотокатализаторов ZnO с использованием при синтезе различных ПАВ является актуальной проблемой и активно исследуется. Например, авторы использовали SDS и PVA в качестве ПАВ при водном синтезе ZnO. Раствор нитрата цинка в данной работе в смеси с ПАВ взаимодействовал с раствором щелочи. Полученные образцы фотокатализаторов показали лучшие функциональные свойства по отношению к азокрасителю (RR141) в сравнении с оксидом цинка, полученным без добавления ПАВ, а также коммерчески доступными ZnO и TiO₂. Исследований, в которых авторы использовали SDS в качестве ПАВ при синтезе оксида цинка для использования в качестве фотокатализатора немного, и они имеют несистемный характер. Использование при синтезе в качестве ПАВ n-пентанола не было описано ранее в литературе, что представляет интерес для изучения его влияния на фотокаталитические свойства ZnO.

Методы исследования: спектроскопия диффузного отражения (СДО), УФ-видимая спектрофотометрия, ИК-Фурье спектроскопия, спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС), термогравиметрия (ТГ), синхронный термический анализ (СТА) с масс-спектрометром выходящих газов, растровая электронная микроскопия (РЭМ).

SDS по данным РЭМ влияет на морфологию и размер частиц образцов. Размер частиц лежит в диапазоне от 131 до 206 нм. Константы скорости реакции разложения МС достигают максимальных значений при использовании в качестве ПАВ n-пентанола с концентрацией 200 мМ. Полученное значение константы составляет $7,72 \cdot 10^{-7}$ моль/(л·с). Константы скорости показали, что самыми активными частицами, с которыми связано фотокаталитическое разложение МС, являются дырки h⁺, затем электроны e⁻ и, наконец, радикалы.

Измерение констант скорости реакций позволят глобально сравнивать различные фотокатализаторы, что поможет отобрать лучшие из них. Важным аспектом является применение различных ПАВ при синтезе, ведь оно способствует улучшению свойств материала. Также работа вносит вклад в создание новых наноматериалов, полезных в будущем для очистки загрязнений, защиты экологии планеты. Улучшить свойства материалов можно еще путем их допирования и создания нанокompозитов



БАЛТИЙСКИЙ НАУЧНО-ИНЖЕНЕРНЫЙ КОНКУРС 2022

Санкт-Петербург, 21-26 марта 2022 года

Синтез биоразлагаемых аналогов полиэтилена

«Химия»

Асылбаев Чингиз Сайлауулы, Антаева Гульжисхан Темировна (научный руководитель, Учитель химии), место выполнения работы: в школе

Основной целью исследовательской работы является создание и оптимизация методов получения полностью биоразлагаемых пластмасс и нахождение способа снижения объема нефти, используемой при традиционном производстве полиэтиленовых изделий. Особенностью данного проекта является определение оптимального состава биополимеров для последующего использования в качестве аналога полиэтилена и качественное сравнение полученных пластмасс между собой и полиэтиленом.

Для реализации данного проекта автором был выбран эмпирический метод исследования, включающий в себя лабораторную работу по получению образцов биоразлагаемых аналогов полиэтилена. Процедура работы состояла из нескольких этапов, которые были сформулированы на основе информации, предоставленной на различных электронных ресурсах.

1. Было определено оптимальное соотношение 1:2 биоматериала и пластификатора.
2. Внешний вид всех трех образцов имел сходство по прозрачности, плотности и эластичности с полиэтиленом низкой плотности.
3. Определена способность к растворению некоторых образцов (желатин, крахмал) в растворах 3М азотной кислоты и гидроксида натрия. Все полимеры имеют свойства термопластов.
4. Био-деградация полученных образцов составила временной интервал в 5-7 недель.

Практическая значимость не ограничивается применением полученных аналогов полиэтилена в качестве упаковочного материала. В дальнейшем предполагается исследовать данные аналоги в фармацевтической и медицинской направленности. Все образцы соответствуют установленным критериям экологической безвредности и имеют производственный потенциал ввиду относительно низкой себестоимости (в частности, пластик на основе желатина).



Изготовление пергаментной бумаги с улучшенными физико-механическими и гидрофобными свойствами

«Химия»

Улосевич Дамир Сергеевич, Юлия Дмитриевна Сташкевич (научный руководитель, учитель), место выполнения работы: Белорусский государственный технологический университет

Развитие промышленности, медицины идет вперед, а в РБ, где много уделяется внимания аграрному сектору и, соответственно, техническому совершенствованию производства пищевой промышленности, всё значительнее возникает необходимость в выпуске высококачественной специальной бумаги для пищевых товаров, позволяющей сохранять высокое качество продуктов. Одной из них является пергаментная бумага. На данном этапе в РБ целлюлозно-бумажная промышленность не производит пергамент, одними из причин являются трудоемкость и дороговизна процесса производства. Сегодня этот вид бумаги в республике является импортоориентированным, что финансово нецелесообразно для её экономики, т.к. потребность в использовании пергамента растет с каждым годом. Мировыми лидерами в производстве и экспорте пергаментной бумаги являются Швеция, Германия. Россия экспортирует в Республику Беларусь до 10% данного вида бумаги. Задача: разработать технологию получения пергаментной бумаги с улучшенными физико-механическими и гидрофобными свойствами. Термины: пергаментная бумага, целлюлоза сульфатная беленая хвойная, крахмал, полиамидные смолы, эмульсия АКД, живичная и таловая канифоль, моноэтаноламин, казеин, едкий натр, клеевая канифольная композиция ТМАС-3Н (талловая модифицированная аминспиртами в нейтральной среде), клей марки ТМ

Методы: химические и физико-химические (определение кислотного числа, температуры размягчения, содержания свободных смоляных кислот), термогравиметрические, математическое и лабораторное моделирование (план Бокса-Хартли), физико-механические (определение разрушающего усилия в сухом состоянии образцов бумаги), гидрофобные (впитываемость воды при одностороннем смачивании). Работа выполнялась в лаборатории кафедры химической переработки древесины.

Разработана методика получения клеевой канифольной композиции ТМАС-3Н, обеспечивающая получение пергаментной бумаги с улучшенными гидрофобными и прочностными свойствами. С помощью математического моделирования (план Бокса-Хартли) оптимизирована рецептура клеевой канифольной композиции, ее основные физико-химические свойства и показатели качества бумаги. Разработана технология получения пергаментной бумаги с улучшенными физико-механическими свойствами, что в последующем позволит использовать ее в целлюлозно-бумажной отрасли.

Разработанная технология позволит создать пергаментную бумагу с улучшенными свойствами. Установлено, что ни на одном из предприятий РБ не производится пергаментная бумага. Но потребность ее велика в медицине, сфере услуг, пищевой промышленности. Поэтому требуется техническое перевооружение на фабриках для производства пергаментной бумаги, которые позволили бы не только обеспечить собственную потребность, но и ее экспорт.



Приготовление безалкогольного пива с применением безглютенового солода

«Химия»

Шульга Татьяна Юрьевна, Шпак Валерия Владимировна, Строчилина Татьяна Владимировна (научный руководитель, Учитель химии ВКК, зам. директ), место выполнения работы: Кафедра ТБиСП ВГУИТ

Данное исследование проводилось с целью доказать пригодность гречишного и овсяного солода в пивоварении. Безглютеновые зерновые напитки способствуют решению проблемы выработки рационов лечебно-профилактического питания для лиц, страдающих непереносимостью глютена, например целиакией, глютеневой энтеропатией, аллергией. Зерновые напитки с содержанием выбранных нами солодов полезны и не уступают зерновым напиткам на классической основе, так как гречиха и овес превосходят другие зерновые культуры по содержанию белка, антиоксидантов, витаминов, незаменимых аминокислот. Также данные культуры прекрасно выращиваются в нашем регионе, поэтому использование их в качестве основы солодовых напитков мы видим перспективным. Нашей первоочередной задачей было получить солод, вычислить его амилолитическую способность, приготовить пивное сусло, определить его экстрактивность (содержание сухих веществ). Исследовать некоторые физико-химические показатели начального сусла. Получить само безалкогольное пиво, сравнить его показатели с ГОСТом, тем самым доказать пригодность и перспективность применения безглютенового гречишного и овсяного солода в пивоварении.

Амилолитическую активность солода определили по скорости ферментативной реакции гидролиза крахмала. Пивное сусло готовили согласно промышленной технологии. Измерили рефрактометром экстрактивность начального сусла. Сбраживали сусло пивоваренными дрожжами. Измерили в безалкогольном безглютеновом пиве содержание спирта, экстрактивность и кислотность путем прямого титрованием (ГОСТ 12788-87). Сравнили полученные показатели с ГОСТ 31711-2012.

Результаты исследования показали, что безглютеновый гречишный и овсяный солод подходит для приготовления пивного сусла. Доказано, что приготовленное безалкогольное пиво обладает высокими органолептическими показателями и соответствует физико-химическим показателям ГОСТа по безалкогольному пиву. Полученный напиток соответствует требованиям лечебно-профилактического питания для лиц, страдающих непереносимостью глютена, а выбранные нами зерновые культуры перспективны и выгодны для использования в пивоварении в нашем регионе.

Результатом данного исследования является полученное безглютеновое пиво из зерновых культур, не применяемых ранее в пивоварении. Безалкогольное пиво является популярным продуктом питания, при использовании гречишного и овсяного солода оно приобретает множество полезных свойств и подходит для употребления в пищу людям с непереносимостью глютена. Мы доказали пригодность выбранного сырья для пивоварения и экономическую выгодность его использования.



БАЛТИЙСКИЙ НАУЧНО-ИНЖЕНЕРНЫЙ КОНКУРС 2022

Санкт-Петербург, 21-26 марта 2022 года

Антибактериальная активность антисептиков для рук

«Химия»

Мирошников Егор Викторович, Трофимова Елена Владимировна (научный руководитель, Учитель химии высш. кат.), место выполнения работы: в школе

В настоящее время в мире появляется все больше смертельных заболеваний, вызываемых вирусами и бактериями. Поэтому несомненной необходимостью служит соблюдение элементарных мер безопасности и правил личной гигиены. Целью настоящей работы является экспериментальное сравнение эффективности антисептиков разного состава, применяющихся для уничтожения патогенных микроорганизмов с кожи рук. Для этого были выполнены следующие задачи: 1. Изучение литературы по данной теме. 2. Изучение состава антисептических средств, приобретенных в аптеках и магазинах нашего города. 3. Освоение методики приготовления питательной среды для выращивания бактериальных культур. 4. Проведение опытов. 5. Обработка и анализ информации. 6. Рекомендации по выбору и правильному использованию антисептиков. Использование антисептиков и дезинфицирующих средств актуально и важно не только в медицине, но и в повседневной жизни, от эффективности антисептиков зависит здоровье и безопасность людей. В проекте поднимается проблема недостаточной информированности людей об антисептических средствах. Для исследования были выбраны: вода проточная, мыло туалетное, антисептик на основе изопропилового спирта, антисептик на основе хлоргексидина, антибактериальные влажные салфетки, антисептик, содержащий ионы серебра.

Методика приготовления питательной среды на основе сухого агар-агара в школьной лаборатории: в стерильную колбу засыпать агар-агар из расчета 5 г на 100 мл воды, размешать, поставить на водяную баню до полного растворения агар-агара, остудить до 45 °С и разлить в стерильные чашки Петри. (И. И. Концевая «Микробиология: культивирование и рост бактерий»)

Результаты эксперимента показали высокую эффективность антисептиков, содержащих спирт и хлоргексидин, также результативно использование обычного туалетного мыла. Проточная вода, не спиртовые влажные салфетки и препарат с наночастицами серебра не способны уничтожить бактерии, хотя их количество уменьшается. По итогам выполнения исследовательской работы сделаны следующие выводы: мыть руки обязательно с мылом, а при отсутствии такой возможности использовать антисептики, содержащие спирт (не менее 60%) или хлоргексидин.

Задачи на будущее: приготовить недорогой, эффективный антисептик, который поможет справиться с микробами и бактериями, будет смягчать руки, не вызовет аллергических реакций и будет безопасен для окружающей среды. А также будет применяться для обеззараживания надетых медицинских перчаток, для обработки не только рук, но и поверхностей медицинских и оптических приборов, больших площадей в общественных местах.



БАЛТИЙСКИЙ НАУЧНО-ИНЖЕНЕРНЫЙ КОНКУРС 2022

Санкт-Петербург, 21-26 марта 2022 года

Очистка водных сред от тяжелых металлов сорбентами на основе хитозана

«Химия»

*Огурцова Мария Евгеньевна, Фуфаева Виктория Александровна (научный руководитель, м.н.с., аспирант ИГХТУ),
место выполнения работы: Ивановский государственный химико-технологический университет*

В настоящее время, вследствие процессов глобальной индустриализации и активной деятельности сельского хозяйства, интенсифицировалось распространение тяжелых металлов с водными потоками. Тяжелые металлы, присутствующие в воде и продуктах питания, проявляют цитотоксическое действие на организм человека, в частности, путем связывания с аминокислотами белков через $-NH_2$ и $-SH$ группы, инактивируя ряд ферментов и другие биологические активные вещества. Поэтому эффективное удаление тяжелых металлов остается актуальной задачей. В последнее время в качестве сорбентов ионов тяжелых металлов привлекают внимание различные биополимеры, в частности сорбенты на основе природных возобновляемых полисахаридов. Перспективными сорбентами для извлечения ионов тяжелых металлов являются материалы на основе хитозана, который обладает такими свойствами как биоразлагаемость, возобновляемость и нетоксичность. Главным достоинством данного биополимера является возможность его разноплановой модификации, в результате которой кратно возрастают сорбционные свойства материала при сохранении постоянства структурных характеристик. Цель работы – разработка и обоснование оптимальных условий получения сорбентов на основе хитозана с улучшенными сорбционными характеристиками по отношению к тяжелым металлам.

Изучена морфология сорбентов с помощью сканирующей электронной микроскопии. Получены ИК-спектры образцов методом нарушенного полного внутреннего отражения. Сорбция тяжелых металлов проводилась в статических условиях, как описано в [1], и динамических условиях, и контролировалась с помощью атомно-абсорбционного спектрометра 210 VGP. Расчет сорбционных характеристик и построение зависимостей осуществляли в программе Origin8.5.

Показано, что гидрогелевый хитозановый сорбент, полученный в щелочи, обладает величиной адсорбции 5.12 и 3.26 моль/кг по $Cu(II)$ и $Cd(II)$ соответственно, что в 3 и 4.8 раза выше, чем для сорбентов, полученных в пирофосфате и 5 и 7.5 раз выше, чем для необработанного хитозана. Определена лимитирующая стадия диффузионного массопереноса. Рассчитаны величины предельной адсорбции, характеристической энергии адсорбции, энергии Гиббса, степени заполнения поверхности, полной динамической обменной емкости в динамических условиях.

Разработанные сорбенты могут найти применение при решении ряда технологических и экологических задач и могут быть использованы для совершенствования сорбционных технологий в химической, пищевой и других отраслях промышленности. В дальнейшем планируется изучение влияния рН среды, фонового электролита на изменение сорбционных характеристик образцов, безопасности разработанных сорбентов методом биотестирования.



БАЛТИЙСКИЙ НАУЧНО-ИНЖЕНЕРНЫЙ КОНКУРС 2022

Санкт-Петербург, 21-26 марта 2022 года

Простые эфиры 2-нафтола. Взаимосвязь строения молекул и запаха

«Химия»

Алексеев Владислав Игоревич, Дробышев Евгений Юрьевич (научный руководитель, учитель химии), место выполнения работы: В школе

Синтез простых эфиров 2-нафтола, содержащих заместители различного строения и установление взаимосвязи строения заместителя с запахом эфира. В литературе относительно подробно описаны только 2-метоксинафталин и 2-этоксинафталин, имеющие насыщенный цветочный запах. Информация об остальных эфирах 2-нафтола обрывочна или отсутствует вовсе.

Анализ литературы, эксперимент, обработка экспериментальных данных, наблюдение.

Синтезировано 9 эфиров. Для каждого эфира определена температура плавления, рассчитан выход от теоретически возможного. Установлена взаимосвязь между запахами эфиров и строением их молекул.

Проанализированы особенности строения молекул простых эфиров 2-нафтола, установлена взаимосвязь с запахом вещества.



БАЛТИЙСКИЙ НАУЧНО-ИНЖЕНЕРНЫЙ КОНКУРС 2022

Санкт-Петербург, 21-26 марта 2022 года

Синтез комплексных соединений дифениламина с солями Zn(II), Cd(II), Mn(II)

«Химия»

Шуленко Ольга Дмитриевна, Дробышев Евгений Юрьевич (научный руководитель, учитель химии), место выполнения работы: В школе

Изучение особенностей синтеза комплексных соединений Zn(II), Cd(II), Mn(II) с дифениламином, поскольку информация о комплексах дифениламинов с металлами 2 Б группы и марганце обрывочна или отсутствует.

Анализ литературы, эксперимент, обработка данных эксперимента, наблюдение.

Получено три комплексных соединения, образование которых подтверждено ИК-спектроскопией и измерением молярной электропроводности этанольных растворов полученных образцов. Изучены условия синтеза комплексов.

Соединения получены при помощи методик, описанных в литературе, но с частичной модификацией. Дальнейшего изучения требует установление точного количественного состава комплексов, возможность синтеза подобных комплексов с катионами трехзарядных d-металлов.



БАЛТИЙСКИЙ НАУЧНО-ИНЖЕНЕРНЫЙ КОНКУРС 2022

Санкт-Петербург, 21-26 марта 2022 года

Моделирование состава дорожного полотна с включением пластиковых отходов

«Химия»

Абдрашев Нуралы Нуртуганович, Нугуманова Карина Ансагановна (научный руководитель, учитель химии, магистр химии), место выполнения работы: г.Костанай

Цель исследования: изучить технологию покрытия дорожного полотна с включением пластиковых отходов. Научная новизна исследования состоит в том, что такое направление считается одним из перспективных в развитии строительства дорожных магистралей и дорожных полотен, а также разные пути развития этого нововведения не только приведут к понижению уровня загрязнения планеты, но и позволят решить проблему, связанную с переработкой пластика.

Методы исследования: 1) обзорно-аналитический; 2) экспериментальный; 3) моделирование. Объект исследования: дорожное полотно с включением пластиковых отходов. Предмет исследования: технология моделирования дорожного полотна с включением пластиковых отходов. Школьная лаборатория

Мы собрали и систематизировали источники по теме исследования, описали характеристики оптимального типа пластика для исследования. Нами был проведен детальный анализ идеального состава дорожного покрытия. Мы смоделировали свои образцы дорожного полотна с включением пластиковых отходов, а также провели эксперимент по устойчивости дорожного покрытия с включением пластиковых отходов с некоторым факторам. Мы смоделировали 5 образцов дорожного полотна, из которых выявили наилучший образец с идеальным составом – образец № 2

В ходе работы мы доказали, что данное направление считается одним из перспективных в развитии строительства дорожных магистралей и дорожных полотен, а также создание дорожного полотна с включением пластиковых отходов не только приведет к понижению уровня загрязнения планеты, но и позволит решить проблему, связанную с переработкой пластика.



БАЛТИЙСКИЙ НАУЧНО-ИНЖЕНЕРНЫЙ КОНКУРС 2022

Санкт-Петербург, 21-26 марта 2022 года

Разработка белок-полиэлектrolитных комплексов для использования в биотехнологии

«Химия»

Бобышева Екатерина Сергеевна, Серкина Полина Сергеевна, Запруднова Елена Александровна (научный руководитель, Кандидат биологических наук), место выполнения работы: ДТ Кванториум33

Взаимодействие и структурная организация белок-полиэлектrolитных комплексов является перспективной областью для исследования. Белковые структуры являются неустойчивыми и использование их в различных отраслях биотехнологии затруднено. Актуальной проблемой является поиск веществ, способных обратимо взаимодействовать с белками, образуя устойчивые комплексы, при диссоциации которых биологическая функция пептидной молекулы сохраняется. Эти комплексы способны стабилизировать белок и защитить его от денатурирующих факторов окружающей среды. Такие комплексы доставки белка актуальны для фармацевтической и пищевой промышленности, в области получения биоактивных соединений, выделения и очистки белков, водоочистки и водоподготовки. Целью работы является исследование процесса агрегирования бычьего сывороточного альбумина в присутствии полимерных электrolитов и определение влияния на кинетику их образования различных факторов.

Модельный белок – бычий сывороточный альбумин, выбор обусловлен значением изоэлектрической точки $pI=5,6$. Модельный поликатион – полиаллиламина гидрохлорид, синтетический полиэлектrolит массой 17,5 кДа. Модельный полианион – декстран, природный полиэлектrolит массой 40 кДа. Было применено турбидиметрическое титрование для определения диапазона pH , в котором формируются комплексы, проведены измерения оптической плотности при помощи спектрофотометра

Формирование комплекса происходит за счет электростатических сил. pH пика комплексообразования с декстраном = 7,75 pH с ПАГ = 1,76. Пик комплексообразования системы белок-декстран достигнут в соотношении Белок/Декстран = 387/1, системы белок-ПАГ достигнут в соотношении белок/ПАГ = 9,3/1. Оптическая плотность комплексов с декстраном падает при воздействии ультразвука, оптическая плотность комплексов с ПАГ повышается. Белок-полиэлектrolитные комплексы устойчивы к ультразвуковому воздействию рассматриваемой частоты и продолжительности.

В перспективе данная работа может иметь развитие в области генетики. Мы бы хотели углубиться в изучение комплексов нуклеиновых кислот с полиэлектrolитами, впоследствии хотим перейти к применению комплексов в сфере адресной доставки лекарственных средств, применимые для доставки инструментов генной инженерии.



БАЛТИЙСКИЙ НАУЧНО-ИНЖЕНЕРНЫЙ КОНКУРС 2022

Санкт-Петербург, 21-26 марта 2022 года

Моделирование процесса полимеризации эпоксидной смолы

«Химия»

Загаринская Анна Николаевна, Кирюткина Ольга Геннадьевна (научный руководитель, Учитель высшей категории), место выполнения работы: МБОУ Новоленинская СОШ

Эпоксидные смолы нашли широкое применение в нашей жизни. В связи с этим исследование их свойств крайне важно. К сожалению, их экспериментальное изучение не всегда возможно в полной мере. Здесь на помощь приходит математическое моделирование. Гипотеза: должны совпасть результаты компьютерного и лабораторного экспериментов по моделированию процесса полимеризации эпоксидной смолы. Цель работы: изучить кинетику процесса полимеризации эпоксидной смолы в домашней лаборатории с применением математического моделирования. Задачи: 1. Изучить литературу по эпоксидной смоле и реакциям полимеризации, по технике безопасности при работе с ней. 2. Ознакомиться с методами математического моделирования химических реакций. 3. Составить математическую модель, описывающую процесс полимеризации во времени. 4. Уточнить параметры модели из литературных источников. 5. Провести компьютерный и лабораторный эксперимент, сравнить результаты. Математическое моделирование – это метод изучения, состоящий в подмене реального процесса (объекта) математическим для изучения, и затем переноса на реальный объект. Mathcad – программное средство для выполнения математических и технических задач.

Методы работы: теоретический – моделирование, расчет кинетики отверждения системы методом Монте-Карло, анализ; эмпирический – наблюдение, сравнение, проведение лабораторных опытов в домашних условиях, компьютерного эксперимента в Mathcad, моделирование процесса полимеризации эпоксидной смолы; математический – работа с дифференциальными уравнениями.

Исходя из сформулированных нами предположений, было доказано, что результаты компьютерного и лабораторного экспериментов совпали. При повышении температуры увеличивается скорость реакции. Показано, что математическое моделирование позволяет наглядно представить протекание реакции с помощью графиков зависимостей. Компьютерный и лабораторный эксперименты дополняют друг друга и позволяют узнать больше информации о процессе. Исследовать эпоксидные смолы можно и в лаборатории, и с использованием математического моделирования.

Изучение кинетики эпоксидных смол очень важно для химии. При помощи компьютерного и лабораторного эксперимента была показана эффективность математического моделирования кинетики реакции полимеризации эпоксидной смолы. Данный метод можно рекомендовать для более сложных исследований кинетики. Усовершенствованная модель может использоваться на производстве. В проекте вы можете увидеть результат применения моего исследования в создании украшений.



Сравнительный анализ коррозионной устойчивости металлических покрытий используемых для финишной обработки печатных плат

«Химия»

Петрова Янина Александровна, Давидович Валентин Дмитриевич, Мельникова Светлана Геннадьевна (научный руководитель, учитель химии), место выполнения работы: УО Минский государственный областной лицей

Финишная обработка печатных плат (изготавливаемых на текстолитах, гибких полимерных пленках, оксидированном алюминии и т.д.), необходимая для процесса микросборки, в зависимости от назначения изделия и предъявляемых к нему требований, может осуществляться различными способами. Целью нашей работы было получение финишных покрытий методами химического (покрытия из золота) и электрохимического осаждения из водных и неводных растворов (покрытия из олова и сплава олово-серебро) на поверхность печатных плат; проведение коррозионных испытаний полученных покрытий при использовании в качестве образцов сравнения печатных плат с финишными покрытиями из сплавов олово-свинец, олово-серебро-медь (SAC), полученными методами наплавления.

Эксперимент проводили в лаборатории химического факультета БГУ. Морфологию поверхности и элементный анализ покрытий из сплавов проводили с помощью рентгеновской приставки Rontec к сканирующему электронному микроскопу LEO 1420. Для оценки коррозионной устойчивости изучаемых покрытий использовали следующие методы: уноса массы, линейной поляризации. Коррозионные кривые анализировали при помощи программного обеспечения Nova 2.1.

Проведен анализ коррозионного поведения финишных покрытий печатных плат, полученных методами наплавления (Sn-Pb, SAC). Электрохимического осаждения в водных и неводных растворах (олово, олово-серебро) и химического восстановления (золото). Выявлено, что покрытия из сплава SAC являются наиболее устойчивыми во всех коррозионных испытаниях, что обусловлено структурой их поверхности. Из гальванических покрытий наиболее устойчиво к коррозии оловянное покрытие, формирующееся в неводном растворе.

Свинец, присутствующий в наиболее распространенных сплавах для припоев, является высокотоксичным. Новыми тенденциями в подготовке поверхности плат к микросборке является использование бессвинцовых гальванических покрытий из никеля и твердого золота, сплавов Sn-Au, Sn-Ag из неводных растворов. Возможным путём развития задачи может являться в случае нашей работы изучение паяемости.



БАЛТИЙСКИЙ НАУЧНО-ИНЖЕНЕРНЫЙ КОНКУРС 2022

Санкт-Петербург, 21-26 марта 2022 года

Сравнение методов пробоподготовки при определении подвижных форм металлов

«Химия»

Плужник Дарья Сергеевна, Васильева Марина Денисовна, Савинов Сергей Сергеевич (научный руководитель, старший преподаватель кафедры), место выполнения работы: Образовательный центр Сириус

Цель нашей работы – сравнение способов пробоподготовки при определении подвижных металлов в почве. Для достижения этой цели были поставлены следующие задачи: 1. Отобрать образцы почв, подготовить их и разделить; провести экстракцию подвижных форм металлов из почв различными способами. 2. Определить содержание подвижных форм металлов в почвах методами молекулярной фотометрии и титриметрии. 3. Обработать данные, сравнить результаты, полученные для разных способов пробоподготовки. 4. Сопоставить данные с предельно-допустимыми концентрациями.

Использовались методы такие как: гравиметрическое определение влажности на основе: ГОСТ 28268-89, однократная экстракция со встряхиванием (ГОСТ Р 50684, 50685, 50686), однократная экстракция с настаиванием (ПНД Ф 16-48-06), однократная экстракция с настаиванием и промывкой (ПНД Ф 16-78-2013), двукратная экстракция со встряхиванием (ПНД Ф 16-71-2011), а также фотометрические и титриметрические методы анализа.

По результатам нашего исследования можно отметить, что были выполнены все поставленные задачи от отбора и разделки образцов почв до анализа и математических расчетов. В итоге нам удалось сравнить методы пробоподготовки почв при определении подвижных металлов; тем самым мы смогли достигнуть поставленной нами цели.

Основные выводы: 1. Схемы пробоподготовки дают различные результаты для микроэлементов Mn и Zn: сходятся концентрации отдельно для настаиваний и встряхиваний, но между схемами сильно отличаются. 2. При определении Ca все схемы пробоподготовки дают схожие результаты. 3. Содержание определяемых металлов максимально в почве Череповца. 4. Минимальное содержание определяемых микроэлементов установлено в почве Сириуса.



БАЛТИЙСКИЙ НАУЧНО-ИНЖЕНЕРНЫЙ КОНКУРС 2022

Санкт-Петербург, 21-26 марта 2022 года

Химический анализ почвогрунта Норильского промышленного района

«Химия»

Черкашина Полина Николаевна, Окунева Светлана Валериевна (научный руководитель, Аспирант КГАУ), место выполнения работы: МБУДО СЮТ

Цель работы состояла в проведении химического анализа почвогрунта НПП и определении его плодородия.

В ходе работы были определены: потенциометрическим методом – актуальная и обменная кислотность; комплексонометрическим методом – подвижный кальций; визуально-колориметрическим методом – подвижный калий; фотоколориметрическим методом – подвижный фосфор и гумус; титриметрическим методом – гидролитическая кислотность, сумма обменных оснований, легкогидролизуемый азот. Освоен метод дистилляции на аппарате макро-Кьельдаля.

Результаты химического анализа почвогрунта НПП показали высокое содержание гумуса, легкогидролизуемого азота и калия в нём. Низкое содержание обменных фосфора и кальция. Несмотря на большое содержание легкодоступного азота для растений и гумуса в почве, коэффициент плодородия почвы на исследуемых опытных участках очень низок.

Рекомендуем учёным агрономам и экологам НИИСХиЭА ФКНЦ СО РАН провести мероприятия по восстановлению нарушенных земель: провести известкование, внести фосфорные удобрения.



БАЛТИЙСКИЙ НАУЧНО-ИНЖЕНЕРНЫЙ КОНКУРС 2022

Санкт-Петербург, 21-26 марта 2022 года

Химический состав лечебных озёр на территории Республика Хакасия

«Химия»

*Гайфуллина Юлия Ринатовна, Окунова Светлана Валерьевна (научный руководитель, Аспирант вуза КГАУ),
место выполнения работы: МБУДО «Станция юных техников»*

Многие озёра Республики Хакасия славятся своими целебными свойствами для лечения различных заболеваний. Для подтверждения их целебных свойств необходимо изучить их химический состав. В работе рассматривается изучение химического состава четырёх популярных лечебных озёр, расположенных на территории Республики Хакасия. Определяли содержание рН озёр, сульфатов, фосфатов, железа, жёсткость воды, общую щёлочность, тяжёлые металлы и токсичные элементы. Полученные результаты занесены в таблицу, это даёт возможность получить представление о химическом составе лечебных озёр. Предоставленные данные помогут людям выбрать определённое озеро для лечения того или иного заболевания.

Были освоены методики определения рН воды, титриметрического определения железа в воде, сульфатов и общей щёлочности; комплексонометрического определение кальция и магния; визуально-колориметрическое определение свинца и никеля. Изучен и освоен метод определения фосфатов фотометрическим методом. Методом инверсионной вольтамперометрии были определены тяжёлые металлы и токсичные элементы: ртуть, мышьяк, кадмий, свинец, медь и цинк.

В ходе исследований мы пришли к следующим выводам: водородный показатель рН воды исследуемых образцов составил в пределах от 8.1 до 10.3, что соответствует нормам СанПиН. Результаты исследований показывают жёсткость воды по наличию солей кальция и магния. Наличие тяжёлых металлов в водоёмах не было превышено. При проверке минерального состава озёр было обнаружено, что вода озера Иткуль недостаточно чистая и полезная для купания, так как было обнаружено превышение показателей сульфатов и фосфатов.

Полученные данные могут быть полезны людям, решившим принять лечение на озёрах. При обнаружении превышения норм по каким-либо элементам, данные могут использовать экологи для принятия мер по детоксикации водоёмов.



Реакция Эшвайлера-Кларка без муравьиной кислоты

«Химия»

*Тарабрин Игнатий Романович, Чусов Денис Александрович (научный руководитель, Доктор химических наук),
место выполнения работы: в школе*

N-метилированные амины проявляют биологическую активность, поэтому зачастую являются важными лекарствами. Их обычно получают из соответствующих аминов различными реакциями метилирования. Один из наиболее распространённых методов метилирования – реакция Эшвайлера-Кларка. Эта реакция относится к классу реакций восстановительного аминирования: формальдегид в ней является карбонильной компонентой, а муравьиная кислота – восстановителем. На самом деле, формальдегид и сам по себе является хорошим восстановителем, поэтому метилирование аминов с использованием только формальдегида также должно быть возможным (то есть формальдегид будет и источником атомов углерода метильных групп, и восстановителем). Такой процесс действительно возможен, он был изучен в ряде работ, но во всех были использованы трёхкомпонентные системы (формальдегид и соляная кислота или формальдегид и щёлочь). В качестве задачи мы предлагаем использование только 2 компонентов – амина и формальдегида. Это упрощает проведение реакции, удешевляет процесс и повышает атомную селективность. Разработке такой методики и посвящена данная работа.

Разработанный метод: навеску амина растворяли в указанном количестве растворителя в флаконе, затем добавляли формалин, герметично закрывали флакон и нагревали его при указанной температуре требуемое время. Реакционную смесь анализировали методами ГХ-МС и 1H-ЯМР (400 МГц, CDCl₃), выход определялся по 1H-ЯМР с внутренним стандартом (мезитилен) или по ГХ. Также в ходе исследования были использованы методы флэш-хроматографии и 13C-ЯМР.

Мы выяснили, что метилирование вторичных аминов формальдегидом в качестве единственного реагента возможно, и исследовали оптимальные условия для этой реакции. Она может протекать в различных растворителях при 80-110°C в течение 1-8 часов с 4-8 эквивалентами формальдегида и давать высокие выходы N-метилированного продукта.

Разработанная методика удобнее, дешевле и экологичнее, чем реакция Эшвайлера-Кларка, потому что использует один реагент вместо двух. В дальнейшие планы входит расширение спектра возможных вторичных субстратов и разработка методики для метилирования первичных аминов.



Новые кристаллические формы фармацевтической соли ципрофлоксацин - 4-аминобензойная кислота

«Химия»

Чапарина Инна Рубиковна, Воронин Александр Павлович (научный руководитель, н.сотр.), место выполнения работы: ИХР РАН

40% соединений на рынке и 80% в разработке имеют низкую растворимость в водных средах, что приводит к понижению полезных свойств лекарства и к появлению побочных эффектов.[1] Поэтому проблема низкой растворимости лекарственных соединений является актуальной. Чтобы избежать снижения эффективности лекарства, прибегают к созданию многокомпонентных кристаллов: сокристаллов и фармацевтических солей. Особенно актуальным является исследование двухкомпонентных кристаллов, в которых оба компонента проявляют биологическую активность, так называемых drug-drug кристаллов.[2] В нашей работе drug-drug технология была использована для улучшения фармацевтически значимых свойств широко используемого антибиотика ципрофлоксацина (CIP), обладающего низкой растворимостью. В качестве второго компонента был использован витамин B10 – 4-аминобензойная кислота (4AmBA). В литературе уже известна одна соль этих компонентов, но она содержит воду и неустойчива к нагреву.[3] Поэтому нашей целью было найти альтернативный метод повысить растворимость CIP по drug-drug технологии. Задачи: поиск и определение условий получения новых форм фармацевтической соли [CIP+4AmBA+H₂O], определение их свойств методами РФА и ДСК; улучшение растворимости ципрофлоксацина путём образования фармацевтической соли с витамином B10.

Исследования по получению новых форм CIP+4AmBA проводилось на базе ИХР РАН. Для получения новых форм использовали перемол в планетарной мельнице, получение из суспензии и кристаллизацию из раствора. В качестве растворителей использовались вода, этанол, метанол, изопропанол и ацетонитрил. Соотношение компонентов было 1:1, 1:2 и 1:4. Полученные образцы идентифицировали с помощью РФА, затем проверялась чистота продукта с помощью ДСК.

В данной работе были впервые получены две новые формы соли антибиотика ципрофлоксацина с 4-аминобензойной кислотой (витамином B10). Полученные формы были идентифицированы методами рентгенофазового анализа и дифференциальной сканирующей калориметрии. Установлено, что стехиометрическое соотношение компонентов в новых формах равно (1:1) и (1:4). Исследовано влияние способа и условий получения на получаемый продукт. Сформулированы рекомендации по лабораторному получению.

На следующей стадии исследования планируется выращивание монокристаллов и определение кристаллической структуры полученных форм, определение растворимости и скорости растворения солей в водных буферных растворах с рН, соответствующих среде желудочного сока и тонкого кишечника. Полученные результаты позволят создать новые лекарственные формы ципрофлоксацина с комбинированной биологической активностью и улучшенной биодоступностью.



Разработка и применение нейросети для анализа изображений реакционно-диффузионных систем

«Химия»

*Кротова Василиса Ярославовна, Константин Евгеньевич Кацуба (научный руководитель, Магистрант), место
выполнения работы: НОЦ Инфохимии НИУ ИТМО*

Глоссарий Реакционно-диффузионная система — этот тип модели сочетает пространственно распределённую химическую реакцию с диффузией химических реагентов через субстрат. Самосборка — процесс образования упорядоченной надмолекулярной структуры или среды. Сокращения: Mg^{2+} — катионы магния, SA — циануровая кислота, Mel — меламина, ДНК-TAMRA — олигонуклеотид, помеченный красителем-флуорофором. Актуальность: биоэлементология и задача скрининга элементарного состава биоматериала являются достаточно важными в сферах диагностической медицины, в пищевой промышленности для контроля качества продукции, для обеспечения безопасных условий труда. Проблема: анализ концентраций ионов металлов в биоматериале с помощью существующих методов требует значительных ресурсов и человеческого вмешательства. Цель: создание платформы на основе машинного обучения для анализа изображений реакционно-диффузионных систем для определения концентраций ионов магния. Задачи: анализ существующих методов, анализ исходных данных, разработка платформы с применением методов машинного обучения (фильтрация и аугментация датасета, оптимизация архитектуры нейронной сети относительно загруженного датасета, обучение нейронной сети, валидация), анализ полученных результатов.

Метод реакционно-диффузионной системы, флуоресцентная микроскопия, методы машинного обучения, трансферное обучение на базе НОЦ Инфохимии. Фото с Leica DMI8, анализ imagejGeForce RTX 2060 Intel® Core™ i5-10600 3,30 ГГц, 32 ГБ ОП. ЯП Python и менеджер Conda. Фреймворки Keras и TensorFlow. Библиотеки: NumPy. Для визуализации Matplotlib, Seaborn, SciPy, Scikit-learn. Для препроцессинга OpenCV-python.

1. Запущены реакционно-диффузионные системы SA-DNA-Mel с разными концентрациями катионов магния. 2. Проанализированы результаты запуска. 3. Датасет из 7000 изображений. 4. Были обучены 3 CNN: Resnet50 и VGG19, VGG16, в решении поставленной задачи VGG16 показала лучшие результаты. Точность предиктивной аналитики для VGG16 составила 96%, для VGG19 составила 86%, для Resnet50 составила 85%.

По точности разработанный метод не уступает существующим по чувствительности. Полученная точность дает право рекомендовать данную платформу для анализа реакционно-диффузионных систем. Систему можно переобучить для определения концентрации меченной ДНК, что также может стать шагом для создания нового диагностического метода. За основу, после последующей модификации, можно взять уже созданный датасет.