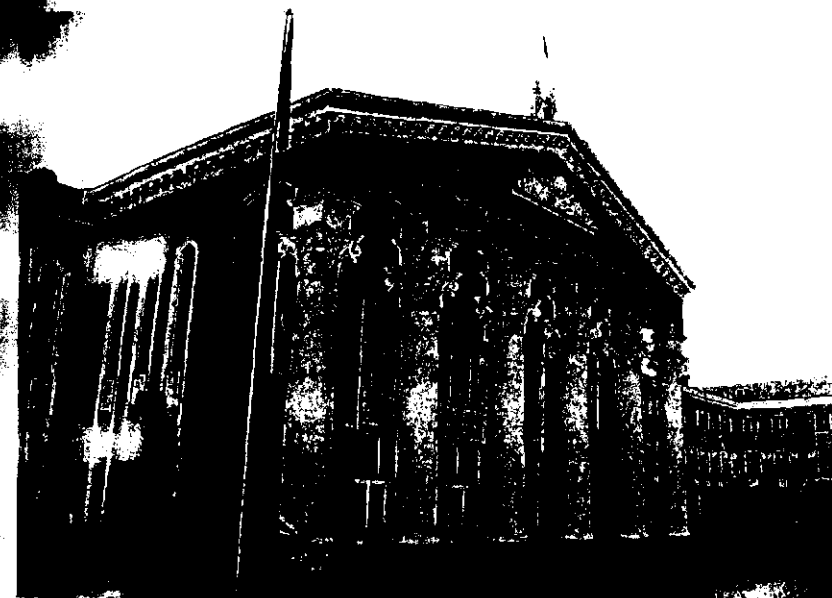


ЖУСУП БАЛАСАГЫН атындагы
КЫРГЫЗ УЛУТТУК УНИВЕРСИТЕТИНИН

ЖАРЧЫСЫ ВЕСТНИК

КЫРГЫЗСКОГО НАЦИОНАЛЬНОГО
УНИВЕРСИТЕТА имени ЖУСУПА БАЛАСАГЫНА

2007



Серия 5: Труды молодых ученых

Выпуск 1: Труды Центра магистратуры, аспирантуры и
национальных образовательных программ

Том 1. Естественные науки



Вестник КНУ им. Ж. Баласагына: Серия 5: Труды молодых ученых. - Выпуск 1: Труды ЦМАНОП. Том 1 (1-3).
Естественные науки. Гуманитарные науки. Социальные и экономические науки. - Бишкек: КНУ, 2007. - 338 с.

Рекомендовано Редакционно-издательским советом КНУ им. Ж.Баласагына

Главная редакционная коллегия:

Ы.К. Омурканов,
доктор экономических наук, профессор
(главный редактор)
В.И. Шаповалов,
заслуженный деятель культуры КР, доктор филологических наук,
профессор, лауреат Государственной премии КР,
(заместитель главного редактора)
Ч.Т. Джолдошева,
заслуженный деятель науки КР, член-корреспондент НАН КР, доктор
филологических наук, профессор
А.Т. Токтосунов,
заслуженный деятель науки КР, член-корреспондент НАН КР,
доктор биологических наук, профессор
Э.М. Мамбетакунов,
член-корреспондент НАН КР, доктор педагогических наук,
профессор, лауреат Государственной премии КР
Л.П. Мирошникенко,
Доктор педагогических наук, профессор
К.А. Исмаева,
Доктор юридических наук, профессор

Редакционная коллегия выпуска:

А.Ш. Шекеков, профессор (председатель)
К.М. Алиева, доктор философских наук, профессор
З.Э. Эралиев, доктор исторических наук, профессор
Р.К. Сарымзакова, доктор химических наук, профессор
А.С. Раимкулова, кандидат педагогических наук, доцент
А.Ч. Чекеев, доктор физико-математических наук, профессор
А.Д. Халилов, кандидат филологических наук, доцент
Р.Б. Макембаева, кандидат экономических наук, доцент
С.О. Жунушова, кандидат философских наук, доцент

© ЦМАНОП КНУ им. Ж.Баласагына, 2007

ISSN 1694-545X

© КНУ им. Ж. Баласагына. 2007

Редакторы О.И. Когай, А.А. Айдарова. Технический редактор Н.П. Доценко
Компьютерный набор и верстка К. Раманов. Ж. Рахат

Сдано в набор 30.07.2007. Подписано в печать 01.08.2007.
Формат бумаги 60x84¹. 35,25 п.л. Печать офсетная. Заказ № 79. Тираж 89 экз.
Отпечатано в типографии ОсОО «Издательство «Сетунь»
г. Бишкек, пр. Чуй 226

ВЕСТНИК КЫРГЫЗСКОГО НАЦИОНАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА им. Ж. Баласагына	Том I. Естественные науки
Научно-теоретический журнал Издаётся с 1993 г.	Выходит в шести сериях

Содержание

Математика, прикладная математика и информатика

1. Ажыманбетова Г.И. Некоторые подходы к созданию электронного компьютерного учебника. 7
2. Алымбаева А. С. Особенности решений сингулярно-возмущенных уравнений с нагрузкой. 11
3. Байжигитова Н. А. Асимптотика решений краевой задачи для слабо нелинейных интегро-дифференциальных уравнений второго порядка с малым параметром при старшей производной. 16
4. Добулова Б. К. Асимптотическое разложение решения сингулярно возмущенного уравнения. 22
5. Зайцев И.В. О некоторых аспектах создания информационной системы обучения и проверки знаний по курсу «безопасность в компьютерных сетях». 25
6. Канстов Б.Э., Агыбаев А.С., Жумалиев Т.Ж. В - паракомпактные отображения топологических пространств. 29
7. Капарова Н. З. Проблемы внедрения кредитной системы обучения (на примере КАУ им. К.И. Скрябина). 33
8. Карагулов Ш. Модульно-рейтинговая система оценки знаний студентов. 36
9. Касымова Н. Ж., Мунапысова Г.Т. Математика боюнча класстан тышкаркы иштерди уюштуруудагы факультативдик курстар. 39
10. Мааткабылова Г.М. Метод полуобращения для построения регуляризирующего оператора. 42
11. Медведева О.А., Гаврилец Е.З., Скрынников К.А. Автоматизация деятельности учебно-методического управления высшего учебного заведения. 46
12. Мусасва А., Майлибашева Ч. Замечательные точки и линии треугольника. 51
13. Муханбетов У. М. Нелинейное дифференциальное уравнение с малым параметром с вырожденным уравнением. 54
14. Усенов И.А., Усенова Н.З. Построение оператора регуляризации для решения нелинейного операторного уравнения первого рода с приближенными операторами. 59
15. Усенова Р.К. Случаи нахождения частного решения уравнения Риккати. 64

Секция №2 Физика

1. Асанакунуов Б.М., Сейткулов Н.С. Решение о задаче волнового уравнения для регистрации трехмерных голограмм на объемных регистрирующих средах. 67
2. Байсалов Н.С. Исследование механических свойств на поверхности кристалла. 72
3. Бекбердиева Н.Н., Саргазаков Т. Полиномиальные интерполяционные приближения давлений насыщенных паров H₂SO₄ и H₂O над бинарными растворами H₂SO₄ / H₂O при температурах стратосферы. 76
4. Молдонасиров Р., Иманалиев У.М. Численный анализ уравнения Уилера – де Витта. 79
5. Оразакунова А., Иманалиева У.М. Компьютерная демонстрационная программа

по квантовой механике на Matlab.....	83
6. Сагындык уулу А., Токтогонов С. А., Кыдыралиев А. Т. Лазерно - электроразрядное воздействие на мрамор.....	88
7. Садыков А., Акбеков Т.М. Связь предмета электротехники с другими предметами.....	92
8. Сандыбаева А.Т., Акбеков Т.М. Вычисление оптических постоянных кристаллов тетрагональной моноксини свинца из анализа спектров пропускания.....	93
9. Сапиева М., Шаршекеев О.Ш., Иманалиев У.М. Уравнения модифицированной теории гравитации с учетом Тензора Римана и старших производных.....	97
10. Сариев С. Ж., Токтогонов С. А. Совместное воздействие лазерного излучения и электрического поля на графитовые образцы.....	101
11. Супабаев А.Т. Моделирование высокочастотного индукционного разряда.....	105
12. Хайдаров Б. К., Кожоева З. Изучение структуры и прочности синтетических алмазов после низкотемпературных обработок.....	108

Секция №3. География, экология и природопользование

1. Абдрахманова Г.У. Туркстан кырка тоосунун түндүк капталынын топурактары жана аларды сарамжалдуу пайдалануу.....	113
2. Авазов С.Г. Түштүк Кыргызстандын гидрографиялык өзгөчөлүктөрү.....	117
3. Базаркулова Н.А. Сели и паводки в Кыргызстане.....	121
4. Джамгырчиев Д.Ч. Теоретические основы проведения геоэкологического мониторинга ландшафтов Кыргызстана в целях устойчивого природопользования.....	125
5. Жамгырчиев Ж.Ч., Бекбердиева Т.И. Изученность ландшафтов Таласской долины.....	129
6. Жээнбеков У.А., Кендирбаева А.Ж. Фергана тоо кыркасынын түндүк батыш тарабындагы жаңгак мөмө-жемиш токойундагы өсүмдүктөрдүн антропогендик динамикасы.....	132
7. Исраилова Г.С., Каримова Б.К., Турганов К.Б. Биология и анатомо- морфологические особенности <i>Ricciocarpus patans</i> L Corda в условиях юга Кыргызстана.....	136
8. Караева Д.А. Вертикальные пояса растительности северного склона Туркестанского хребта.....	138
9. Каримова Б.К., Каримов Б.А., Боронбаева А.А. Роль водных растений в решении проблем гидрокосистем юга Кыргызстана.....	143
10. Карыбаева Ч. С. Платежи за загрязнение окружающей среды.....	146
11. Карыбаева Ч. С. Экологические затраты и их характеристики в процессе устойчивого использования природных ресурсов Кыргызстана.....	151
12. Козубекова А. Т. Улучшение, использование и экологическое состояние естественных пастбищ и сенокосов Таласской долины.....	155
13. Купешева А.И. Гидрологическая характеристика бассейна реки Сокулук.....	159
14. Молдобаева А.Д. Гидрографические особенности бассейна реки Кокомерен.....	163
15. Молдосанова Ж.А., Джамгырчиев Д.Ч. Газоочистное сооружение ТЭЦ города Бишкека.....	166
16. Молдосанова Ж.А., Джамгырчиев Д.Ч. Природно-технологическая характеристика ТЭЦ города Бишкека.....	170
17. Моомбеков С.Т., Каримова Б.К. О флоре водорослей р. Чонбулак Бешаральского заповедника.....	175
18. Нарынбек уулу К. Геоморфологическое строение Западного Прииссыккуля.....	176
19. Нарынбек уулу К. Новейшие представления о возрасте ярусов рельефа Тянь-Шаня.....	181
20. Осмонбаева Ч.А. Тору-Айгыр сейсмикалык районунун азыркы кездеги	

тектоникалык структурасы.....	184
21. Осмонов А. Кочкор өрөөнүнүн мөңгүлөрү.....	187
22. Приходько Л.А., Актанова А.Т. Современное состояние сельскохозяйственной перерабатывающей промышленности и ее место во внешнеэкономических связях со странами ближнего и дальнего зарубежья.....	190
23. Рагульская А. Падыша-Атинский государственный заповедник.....	194
24. Супатаев Т.А. Современное положение и перспективы развития туристско- рекреационного комплекса в Кыргызстане.....	198
25. Топбаев О.А. Современное состояние и проблемы развития промышленности Чуйской области.....	201
26. Шабданова А.С. Высотная поясность почвенно-растительного покрова северного склона Кыргызского Алатау.....	204
27. Эркимбаева Г.Ш. Рельеф маралопитомника Нарынского государственного заповедника.....	209

Секция №4. Химия, химическая технология и биотехнология

1. Адылов С.А., Кудайкулова Г. М., Медетбекова Ж.М., Хаперская Л.С. Синтез стереоизомерных N- метил-2,6-дифенил-3-изопропил-4- этилпиперидин-4-олов.....	211
2. Алмакучукова Г.М., Байдинов Т.Б., Иманкунов Б.И., Намазова Б.С. Координационные соединения двухвалентных металлов с метиленадиамидом....	215
3. Бакирова А.А., Дермугин В.С., Джаманбаев Ж.А., Абдурашитова Ю.А., Эрназарова Б.К. Синтез и физико-химические свойства реагента Lawesson (LR)...	221
4. Волковская М.В. Характеристика локальных микрогетерогенностей в водных растворах аминокислот методом избыточных термодинамических функций.....	224
5. Джунушалиева А.К., Десятниченко Л.Н., Карабаев С.О. Сравнительная характеристика водных вытяжек пахотного слоя почв районов Чуйской области Кыргызской республики.....	229
6. Исмаилова М. К., Джусуева М. С., Пулатова З. М. Комплексы 3-д металлов с L- аскорбиновой кислотой.....	233
7. Кененбаева Ж.А., Зарипова А.А., Ли С.П. Разработка технологии получения почвенного кондиционера.....	238
8. Керимбаева А.Д., Ли С.П. Получение и характеристика биоактивных препаратов из бурого угля.....	242
9. Керимбекова Ж.Ж., Зарипова А.А. Исследование природы биологической активности гуминовых препаратов методами биотестирования на гормоноподобную активность.....	246
10. Махмадизарова Н.Д., Байдинов Т.Б., Намазова Б.С., Сатыбалдиев О.С., Сапалова С.А., Системы хлорид (сульфат) магния – N,N-диметилформамид- вода при 25°.....	250
11. Медетбекова Ж.М., Шамбетова Б.А., Хаперская Л.С., Адылов С.А. Синтез стереоизомерных 2,6-дифенил-3-изопропил-4-фенилэтилпиперидин-4-олов по реакции Фаворского.....	252
12. Медетканова А., Саркелов Ж.С., Орозбаева Н.О. Влияние температуры на растворимость глицина в водных растворах хлорида никеля.....	256
13. Муксумова З.С., Осмонбаева Ж.А., Котова Е.В., Алиева С.К. Физико-химическая характеристика глины месторождения Ак-суу.....	261
14. Мураталиева А.Д., Байдинов Т.Б., Намазова Б.С., Садыкова А.К., Сапалова С.А. Тройные системы из хлоридов магния, кальция, N,N-диметилацетамида и воды при 25°С.....	265
15. Нестеров Д.Ю., Ли С. П., Зарипова А. А. Изучение разложения гуминовых кислот под воздействием консорциума почвенных микроорганизмов.....	269

устойчивые структуры, когда молекула метилеандиацетида бидентатно координируется к металлам-комплексобразователям и через атомы кислорода.

При исследовании термической устойчивости соединений выяснено, что все метилеандиацетидные соединения оказались термически устойчивыми, разложение гидратированных комплексов при нагревании начинается с отщепления воды с последующим инконгруэнтным плавлением, сопровождающимся разложением комплексов. Процесс разложения сопровождается эндотермическими эффектами и характеризуется определенными значениями убыли массы веществ по кривой термогравиметрии (ТГ), подтверждающей составы соединений. Из расчетов потери масс следует, что после отщепления молекул воды и метилеандиацетида оставшиеся хлориды металлов окисляются до соответствующих оксидов.

Проведен рентгенофазовый анализ исходных и полученных соединений. Все соединения дают дифракционную картину и отличаются от исходных веществ интенсивностью линий и набором межплоскостных расстояний, что обусловлено различием кристаллических структур.

Изучена растворимость соединений в органических растворителях. Все соединения растворимы в этаноле. Соединения метилеандиацетида с хлоридами магния, кальция, марганца, кобальта, никеля, меди, цинка и кадмия не растворимы в бензоле, гексане, четыреххлористом углероде, растворимы в этаноле, несколько хуже в ацетоне, мало растворимы в хлороформе. На основании этого можно заключить, что комплексы растворимы в жидкостях с большой диэлектрической проницаемостью.

Определением удельных масс выяснено, что метилеандиацетидные комплексы металлов имеют низкие значения плотности кристаллов, которые говорят о менее плотной упаковке их кристаллических решеток, чем соответствующие им исходные соли.

Синтезированные метилеандиацетидные комплексы были испытаны в качестве биоактивных веществ в лабораторных и полевых условиях. Установлено, что $MgCl_2 \cdot 2C_5H_{10}O_2N_2 \cdot 2H_2O$, $CaCl_2 \cdot 2C_5H_{10}O_2N_2 \cdot 2H_2O$, $MnCl_2 \cdot C_5H_{10}O_2N_2 \cdot 2H_2O$, $CoCl_2 \cdot C_5H_{10}O_2N_2 \cdot 2H_2O$ являются стимуляторами роста пшеницы и сахарной свеклы. Опыты по замачиванию семян пшеницы 0,5, 0,1, 0,01%-ными растворами соединений свидетельствуют о том, что они положительно влияют на энергию прорастания и всхожесть семян. При этом энергия прорастания семян увеличивается на 10-15,8%, а всхожесть семян на 7,7-10,5% по сравнению с контролем, которым служила вода. Наилучшие результаты получены при намачивании семян 0,01%-ным раствором $MnCl_2 \cdot C_5H_{10}O_2N_2 \cdot 2H_2O$ (10,5% и 15,8% соответственно).

Для проверки полученных лабораторных результатов были проведены опыты по замачиванию семян сахарной свеклы 0,01%-ным раствором $MnCl_2 \cdot C_5H_{10}O_2N_2 \cdot 2H_2O$ перед посевом в полевых условиях. Результаты испытаний свидетельствуют о том, что дигидрат монометилеандиацетида хлорид марганца стимулирует энергию прорастания, ростовые процессы свеклы и продуктивность растений. Урожайность сахарной свеклы увеличивается на 20%, а сахаристость на 1,7% по сравнению с контролем.

Литература

- Иманакунов Б. Взаимодействие ацетида с неорганическими солями. – Фрунзе: Илим, 1976. – 168 с.
- Аносов В.Я., Озерова М.И., Фиалков Ю.А. Основы физико-химического анализа. – М.: Наука, 1976. – 504 с.
- Аригушкина Е.В. Руководство по химическому анализу почв. – 2-е изд., перераб., дополн. – М.: Химия, 1980. – 487 с.
- Шварценбах Г., Флашка Г. Комплексонометрическое титрование. – М.: Химия, 1970. – 255 с.

СИНТЕЗ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА РЕАГЕНТА LAWESSON (LR)

Известно, что превращение карбонильной группы в тиокарбонильную вызывает интерес среди химиков-синтетиков, потому что замена тиокарбонильной группы изменяет химические и биологические свойства органических соединений. Серосодержащие соединения часто обладают отличными свойствами по сравнению с их кислородсодержащими аналогами, как в плане поведения их в процессе химических реакций, так и проявляют особые биологические свойства. К примеру, мочевина усиливает рост растений, а тиомочевина задерживает. Однако в отличие от кислородсодержащих соединений, серосодержащие являются труднодоступными с точки зрения их синтеза. Поэтому реагенты, способные заменять в молекуле атом кислорода на атом серы, особенно в мягких условиях, как реагент Lawesson, привлекают пристальное внимание химиков-синтетиков, а изучение подобных реакций тионирования вносит весомый вклад в теоретическую органическую химию.

Органические соединения, содержащие одну или несколько карбонильных групп, такие, как кетоны, амиды, сложные эфиры, лактамы и т.д., достаточно широко известны и могут легко быть получены из доступных веществ классическими синтетическими методами органической химии.

В то же время их тиокарбонильные аналоги менее доступны, поэтому изучение реакции превращения карбонильной группы в тиокарбонильную является важным аспектом синтетической органической химии [1-5].

В качестве первого реагента по превращению карбонильной группы в тиокарбонильную был использован пентасульфид фосфора. Наиболее раннее упоминание об этом относится к 1869 г. [1]. Данная процедура проводилась в высококипящих растворителях, например, как толуол, ксилол, пиридин. Этот метод требовал большого избытка реагента, а выходы, как правило, были минимальными. Кроме того, в результате реакции образовывался пентаоксид фосфора, который часто приводил к осмолению органических соединений. Вследствие этого данный реагент получил ограниченное применение в органическом синтезе [2].

Предпринимались также попытки синтеза тиокетонов и тиоальдегидов из соответствующих кислородных аналогов с помощью сероводорода и его солей. В результате образующиеся при этом продукты реакции либо тримеризовались, либо полимеризовались согласно схеме 1 и выделить индивидуальные соединения не представлялось возможным [1].

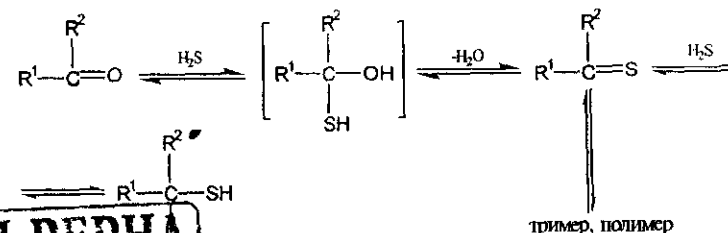
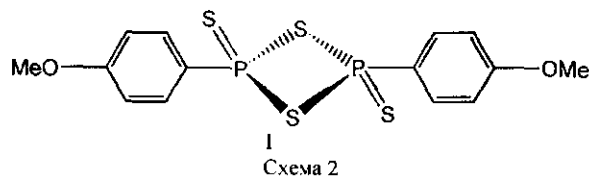


Схема 1

КОПИЯ ВЕРНА
Учёный секрет
Учёно-методический кабинет
Абрамов Б. С.

Разные группы исследователей для реакций тионирования пытались использовать о,о-дизитилдитиофосфорную кислоту, трехсернистый бор, дисульфид кремния, элементарную серу в гексаметилтриамиде фосфорной кислоты. Но, как показали дальнейшие исследования, наиболее приемлемым реагентом для этих целей оказался 2,4-бис-(п-метоксифенил)-1,3-дитиодифосфат-2,4-дисульфида (I) (реагент Lawesson (LR)) схема 2 [1-5].



В литературе описаны два подобных механизма реакции тионирования с использованием реактива LR. Обе мезомерные структуры (II, III) изображенные на схеме 3, могут реагировать с карбонилсодержащими соединениями с образованием тиаоксафосгана (IV), который разлагается с образованием соответствующих тиокетонев. Движущей силой является образование стабильной P=O связи на стадии циклообращения, которое чем-то напоминает механизм реакции Виттига.

Механизм тионирования с использованием LR представлен на схеме 3 [2]:

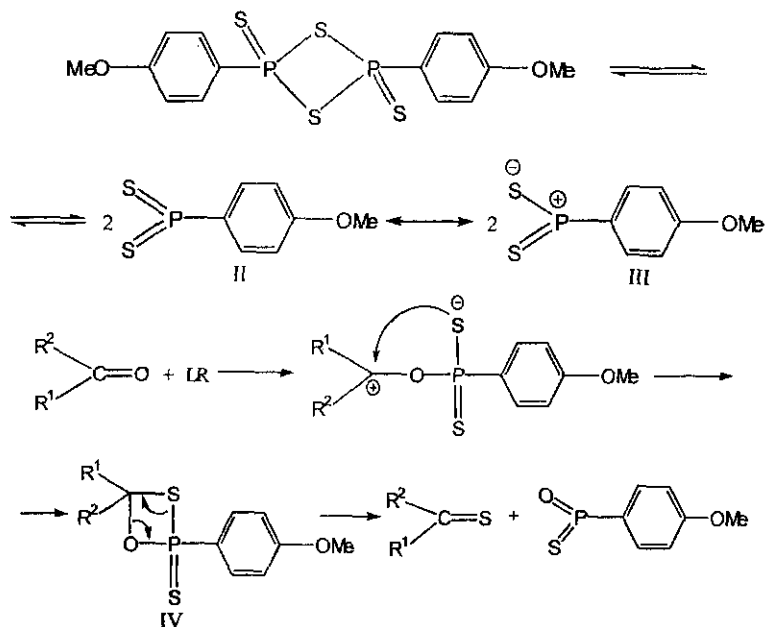


Схема 3

Реакции с LR с успехом применялись на таких классах органических соединений, как алифатические или ароматические кетоны, сложные эфиры, лактоны, амиды, лактамы,

гидразиды, аминокислоты, пептиды и т.д. [1, 5]. В то же время, анализ литературных данных показал, что не изучены такие группы веществ, как альдегиды, карбамиды и семикарбазиды. В связи с этим, изучение взаимодействия этих классов соединений с LR представляет теоретический и практический интерес.

В данной работе предлагается модифицированная методика получения LR из красного фосфора, серы и анизола. Синтезированный нами реактив Lawesson (LR) был использован в реакции тионирования бензамида [5].

Экспериментальная часть

ИК-спектры синтезированных соединений сняты на спектрофотометре «Nicolet Avatar-370» DTGS фирмы Electron Corporation 4000-400 см⁻¹, KBr.

Индивидуальность и ход реакций контролировались методом тонкослойной хроматографии на пластинках Silufol UV-254 в смеси растворителей толуол:тетрагидрофуран (5:1, 1:9). Проявитель УФ лампа. Температуру плавления измеряли на микронагревательном столике Boettius с наблюдательным устройством РНМК-05.

Синтез 2,4-бис-(*n*-метоксифенил)-1,3-дитиодифосфетан -
-2,4-дисульфида (LR)

В термостойкую колбу, снабженную обратным холодильником, хлоркальциевой трубкой помещают 3,661 г (0,114 моль) серы и 1,4 г (0,045 моль) красного фосфора. Колбу наполняют сухим углекислым газом и нагревают. Затем реакционную массу охлаждают до 100°C, добавляют 12 мл (0,11 моль) анизола и кипятят в течение шести часов. После охлаждения до комнатной температуры выпавшие кристаллы отфильтровывают и промывают абс. эфиром и бензолом. Перекристаллизовывают из абс. толуола.

Выход: 4,36г (47,8%), $T_{\text{пл}} = 228-229^{\circ}\text{C}$. (Литературные данные [4] $228-229,5^{\circ}\text{C}$).

ИК-спектр (KBr, ν , cm^{-1}) 689 (P=S), 615 (P-C), 1022, 1095, 1180 (R-O-CH₃), 1267, 1294, 1308, 1458, 1493, 1592 (аром.).

$C_{14}H_{14}O_2P_2S_4$ 404, 475 Найдено %: C-41,95; H-3,78; P-15,13; S-32,07.

Вычислено %: C-41,57; H-3,49; P-15,32; S-31,71.

Синтез трибензамида с использованием реактива Lawesson

В круглодонную колбу помещают 0,060 г бензамида, 0,103 г реактива LR и 3 мл абсолютного бензола. Колбу наполняют сухим углекислым газом и кипятят в течение 30 минут (контроль за ходом реакции ТСХ). Затем бензол упаривают, остаток перекристаллизовывают из воды.

Выход: 0,045 г (75 %), $T_{пл} = 116-118^{\circ}\text{C}$.

ИК-спектр (КВг, ν , см^{-1}) 568, 687, 707, 773, 887, 1280 (аром.), 1325, 1399 (C=S), 3360, 3283, 3157 (N-H).

C_7H_7NS 137, 205 Найдено %: C-61,45; H-5,56; N-10,54; S-22,88.

Вычислено %: C-61,28; H-5,14; N-10,21; S-23,37.

Литература

1. Thionation reactions of Lawesson's reagents/M. P. Cava, M. I. Levinson// *Tetrahedron*.-1985.- V. 41.- № 22.-P. 5061-5087.
2. Applications of Lawesson's reagents in organic and organometallic syntheses/ M. Jesberger, T. P. Davis, L. Barner// *Synthesis*.- 2003.- №13.-P. 1929-1958.
3. Studies on organophosphorus compounds XXI. The dimmer of p-methoxyphenylthiophosphine sulfide as thiation reagent. A new route to

thiocarboxamides/ S. Scheibie, B.S. Pedersen, S.O. Lawesson// Bull. Soc. Chim. Belg.-1978.- V. 87.- № 3.- P. 229-238.

- The phosponation of aromatic compounds with phosphorus pentasulfide/H. Z. Lecher, R.A. Greenwood, K.C. Whitehouse, T.H. Chao//J. Am. Chem. Soc.-1956.- V.78.- №19.- P. 5018-5022.
- Tionation using fluorous Lawesson's reagent / Z. Kaleta, B.T. Makowski, T. Soos, R. Dembinsky//Organic letters.-2006.-V. 8.-N 8.-P. 1625-1628.

УДК 541.8; 541.45; 532.7

Волковская М.В.

ХАРАКТЕРИСТИКА ЛОКАЛЬНЫХ МИКРОНЕОДНОРОДНОСТЕЙ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ АМИНОКИСЛОТ МЕТОДОМ ИЗБЫТОЧНЫХ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ

Аминокислоты играют ключевую роль в процессе жизнедеятельности организмов, их водные растворы находят широкое применение в биотехнологии, медицине, пищевой промышленности и т.д. Именно это определяет неослабевающий интерес к экспериментальному изучению и моделированию физико-химических свойств водных растворов аминокислот, специфические свойства которых определяются тем, что при нейтральных величинах pH α -аминокислоты существуют в форме цвиттер-иона $^+NH_3CHRCOO^-$ - молекулы с выраженным перераспределением заряда.

Целью настоящей работы является применение концепции сольватационного избытка для описания сольватационных эффектов как в двухкомпонентных водных растворах аминокислот, так и в трехкомпонентных, включающих растворенный инертный газ.

В работе использована величина сольватационного избытка, предложенная Пендиным в качестве характеристики избирательности сольватации [1-3]. Заметим, что сольватационный избыток $\Gamma_{(ij)}^K$, аналогичный относительному поверхностному избытку Гиббса, представляет собой среднестатистическое число частиц сорта i , на которое сольватная оболочка (ближайшее и дальнее окружение) частицы K оказывается богаче по сравнению с частицами сорта j , исходя из среднего состава раствора. Положительное значение $\Gamma_{(ij)}^K$ соответствует предпочтительной сольватации частиц K компонентом i , отрицательное значение $\Gamma_{(ij)}^K$ соответствует предпочтительной сольватации компонентом j [3].

Для двухкомпонентного раствора сольватационный избыток определяется соотношением:

$$\left(\frac{d \ln y_s}{d \ln a_s} \right)_{T,P} = -\Gamma_{S(W)}^S = -\Gamma_{W(S)}^W \quad (1),$$

где $\Gamma_{S(W)}^S$ - сольватационный избыток неводного компонента (s) над водой (w) вблизи, y_s - рациональный коэффициент активности неводного компонента бинарного растворителя, a_s - активность неводного компонента.

Уравнение (1) использовалось для расчета величин $\Gamma_{S(W)}^S = \Gamma_{W(S)}^W$ в водных растворах выбранного ряда аминокислот. Значения производной $(\partial \lg y_s / \partial \lg a_s)_{T,P}$ рассчитывались аналитическим дифференцированием соответствующих полиномов зависимости $\lg y_s = f(\lg a_s)$ при использовании пакета статистических программ Statgraphics plus for Windows [4]. Рациональные коэффициенты активности аминокислот вычислены из данных работ [5-7] и приведены в табл. 1.

Таблица 1

Рациональные коэффициенты активности аминокислот в водных растворах при 298°K

Молярная доля аминокислоты (X_s)	вода - аминокислота (X_s)				
	глицин [5]	α -аланин [6]	α -аминомасляная кислота [5]	α -аминовалериановая кислота [7]	α -аминоизовалериановая кислота (валин) [5]
	$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{CH}_2 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{CH}_2 \\ \\ \text{CH}_2 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{COO}^- \\ \\ \text{H}_3\text{N}^+-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{CH} \\ / \quad \backslash \\ \text{H}_3\text{C} \quad \text{CH}_3 \end{array}$
	y_s	y_s	y_s	y_s	y_s
0,0036	0,968	1,003	1,014	1,026	1,020
0,0054	0,953	-	1,022	1,038	1,031
0,0072	0,940	1,005	1,030	1,051	1,044
0,0089	0,927	-	1,038	1,064	1,058
0,0107	0,916	1,006	1,046	1,084	1,073
0,0116	0,910	-	1,051	-	-
0,0142	0,895	1,009	1,064	-	-
0,0160	0,885	-	1,073	-	-
0,0177	0,877	1,017	1,082	-	-
0,0212	0,861	1,025	1,101	-	-
0,0246	0,847	1,034	1,121	-	-
0,0263	0,841	-	1,132	-	-
0,0280	0,835	1,044	1,142	-	-
0,0314	0,824	1,056	1,163	-	-
0,0348	0,815	-	1,185	-	-
0,0431	0,796	-	-	-	-
0,0513	0,782	-	-	-	-

Результаты расчетов представлены на рис. 1.

