

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«МОРДОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ  
ИМЕНИ М. Е. ЕВСЕВЬЕВА»

## АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ ХИМИИ И МЕТОДИКИ ПРЕПОДАВАНИЯ ХИМИИ

Материалы всероссийской с международным участием  
очно-заочной научно-практической конференции  
«Актуальные проблемы химии и методики преподавания химии»

г. Саранск, 12 мая 2011 г.

УДК 54  
ББК 24р  
А 437

**Редакционная коллегия:**

С. А. Ямашкин, д-р хим. наук, профессор (науч. ред.);  
Е. А. Алямкина, канд. хим. наук (отв. за вып.)

**Рецензенты:**

В. И. Иичина, д-р мед. наук, проф., зав. кафедрой фармакологии Мордовского государственного университета имени Н. П. Огарева;  
А. К. Осипов, канд. хим. наук, проф., зав. кафедрой аналитической химии Мордовского государственного университета имени Н. П. Огарева

Печатается по решению редакционно-издательского совета  
Мордовского государственного педагогического института имени М. Е. Евсевьева

*Конференция проведена за счет средств ФЦП  
«Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы  
в рамках реализации проекта по проблеме «Синтез индольных и тирролохинолиновых  
структур» (гос. контракт № П988 от 27 мая 2010 г.  
с Министерством образования и науки РФ).*

**«Актуальные проблемы химии и методики преподавания  
А 437 химии». Всероссийская с международным участием очно-заочная  
науч.-практическая конф. (2010 ; Саранск). Всероссийская с меж-  
дународным участием очно-заочная научно-практическая конфе-  
ренция «Актуальные проблемы химии и методики преподавания  
химии», 12 мая 2011 г. [материалы] / редкол.: С. А. Ямашкин (науч.  
ред.), Е. А. Алямкина (отв. за вып.) ; Мордов. гос. пед. ин-т. – Саранск,  
2011. – 195 с.**

ISBN 978-5-8156-0346-2

Материалы публикуются по итогам всероссийской с международным участием очно-заочной научно-практической конференция «Актуальные проблемы химии и методики преподавания химии», проходившей в Мордовском государственном педагогическом институте имени М. Е. Евсевьева. В данный сборник вошли статьи, раскрывающие вопросы современного состояния и перспективы развития в области химии и методики ее преподавания.

Материалы сборника предназначены для студентов, аспирантов, соискателей и ученых-исследователей, специализирующихся в области химии.

УДК 54  
ББК 24р

ISBN 978-5-8156-0346-2

© ГОУ ВПО «Мордовский  
государственный педагогический  
институт имени М. Е. Евсевьева», 2011  
© Авторский коллектив, 2011

## Литература

1. Ткаченко, М. Л. Взаимное влияние компонентов системы салициламид-парацетамол на растворимость / М. Л. Ткаченко, Л. Е. Жнякина, А. С. Космынин // Фармация. – 2003. – № 1. – С. 23–25.
2. Моценский, Ю. В. Система дифференциальной сканирующей калориметрии для исследования лекарственных веществ / Ю. В. Моценский, С. В. Федотов, Л. Е. Жнякина [и др.] // Хим.-фарм. журн. – 2005. – № 11. – С. 610.

УДК 543.53

Андреева А. В., Широбоков И. Б.<sup>1</sup>, Фахретдинов П. С.,  
Голубев И. Ю.<sup>2</sup>

### МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА МИЦЕЛЛООБРАЗОВАНИЯ

<sup>1</sup> ГОУ ВПО «Удмуртский государственный университет»,  
*e-mail: foh@udsu.ru, г. Ижевск*

<sup>2</sup> Учреждение Российской академии наук  
Институт органической и физической химии имени А. Е. Арбузова  
Казанского научного центра РАН, г. Казань

Согласно концепции неклассических катионных ПАВ в неклассических КПАВ гидрофобность углеводородных радикалов фрагментируется (разрывается) полярными гетероатомными группировками. Такая структура обеспечивает их физико-химические свойства и адсорбционное поведение, отличающиеся от классических ПАВ. Дифильная природа ПАВ приводит к образованию в растворах различных наноструктур, наиболее известными из которых являются мицеллы. При изучении мицеллярных растворов ПАВ в последние десятилетия все более широкое применение находит вычислительный эксперимент, позволяющий получать детальную информацию о структурных и термодинамических характеристиках изучаемых систем. В данной работе в качестве объектов исследования был использован ряд веществ, синтезированных в ИОФХ им. Арбузова КазНЦ РАН, относящихся к классу имидазолиниевых соединений.

Задачей исследования являлось компьютерное моделирование растворов КПАВ с целью изучения изменений, происходящих в их поведении, при варьировании концентрации и температуры. В процессе достижения цели были решены следующие задачи: первое – описано строение одиночных молекул КПАВ в рамках силового поля OPLSAA и оптимизирована их геометрическая структура, второе – на основании полученных одиночных молекул созданы системы, моделирующие водные (SPC модель воды) растворы ПАВ

разной концентрации, третье – исследован процесс агрегации молекул КПАВ молекулярно-динамическим методом (пакет GROMACS v.4.5.3) при их различной концентрации и температуре, на основе анализа функций радиального распределения рассчитаны значения критической концентрации мицеллообразования (ККМ).

Изучение температурной зависимости ККМ позволило оценить изменение термодинамических параметров моделируемых систем в процессе мицеллообразования. При этом процесс мицеллообразования является самопроизвольным ( $\Delta G_m^0 < 0$ ), изменение энтальпии и энтропии процесса положительно. Анализ данных показывает, что на процесс мицеллообразования в водных растворах существенно влияет структура воды, которая способствует выталкиванию углеводородных радикалов из раствора; одновременно частично разрушается структура воды. Поэтому с образованием мицелл в растворах высвобождается структурированная вода, что и приводит к увеличению энтропии.

УДК 547.313:547.717

Берлина О. В., Метелева Г. П.

## ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ПЕРОКСОГЕТЕРОПОЛИСОЕДИНЕНИЙ ВОЛЬФРАМА(VI) И ФОСФОРА(V) В РЕАКЦИЯХ СИНТЕЗА ЭПОКСИДОВ

ГОУ ВПО «Тюменский государственный университет»,  
e-mail: berlinao@rambler.ru, г. Тюмень

Одним из наиболее перспективных областей органического синтеза является химия эпоксидных соединений. Прямое эпоксидирование алкенов пероксидом водорода в присутствии пероксикомплексов переходных металлов обеспечивает высокую селективность образования эпоксидов, однако более высокая пероксидазная активность характерна для пероксогетерополисоединений, например, вольфрама (VI) и фосфора (V).

Исследование реакции эпоксидирования алкенов направлено на решение фундаментальной проблемы создания нового типа каталитически активных фосфатооксопероксовольфрамовых соединений, генерирующихся *in situ*, в двухфазных водно-органических системах и экспериментальное установление их состава методом молярных отношений по данным каталитической активности систем в модельных реакциях эпоксидирования гексена-1 и циклогексена пероксидом водорода, в условиях межфазного катализа (МФК).

В работе проведены экспериментальные исследования влияния соотношения реагентов  $\text{Na}_2\text{WO}_4$  и  $\text{H}_3\text{PO}_4$  (в присутствии избытка  $\text{H}_2\text{O}_2$ ) и pH