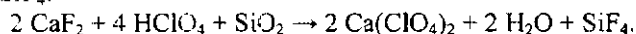


исследования, направленные на получение оптической керамики – материалов для ИК-техники, получаемых путем горячего прессования порошков. При этом основной задачей является синтез стехиометрически чистых фторидов с минимальным содержанием кислородсодержащих примесей, имеющих достаточно высокую степень дисперсности, с размером частиц (по БЭТ) порядка 20-40 нм.

Образцы дисперсного фторида кальция были синтезированы путем взаимодействия избытка плавиковой кислоты HF (ос.ч.) с карбонатом кальция, полученным из химически чистых реактивов – нитрата кальция и карбоната натрия. Все операции с участием плавиковой кислоты производились в посуде из фторопласта.

Ранее нами было показано, что при использовании собственных первичных стандартов с правильностью на уровне  $\pm 0,1\%$  состав хлоридов металлов может быть достаточно точно охарактеризован в результате определения только одного компонента – металла. В случае фторидов металлов такая возможность представляется особенно ценной, т.к. фтор определяется значительно менее точно, чем металл. Поэтому стехиометрический состав образцов определяли путем химического анализа на содержание одного элемента – кальция.

При анализе навеска фторида кальция растворялась путем выпаривания с концентрированной хлорной кислотой в кварцевой чашке, которая являлась также одним из участников реакции с образованием газообразного SiF<sub>4</sub>:



Содержание Ca в анализируемой пробе определялось путем титрования стандартным раствором трилона Б ( $\pm 0,1\%$ ). Содержание фтора находилось по разности массы навески фторида и найденной массы кальция. Общая относительная погрешность определения стехиометрического соотношения F:Ca в образцах составляла  $\pm 0,3\%$ . Методика анализа была отработана и проверена на образцах прозрачных кристаллов CaF<sub>2</sub>, полученных путем возгонки в высоком вакууме. Такие кристаллы должны иметь высокую степень стехиометрии. По результатам анализа состав этого фторида характеризуется соотношением F:Ca = 1,999  $\pm$  0,006.

Вместе с тем химический анализ синтезированных образцов CaF<sub>2</sub> показал, что они удерживают значительные количества воды и фтороводорода. Так, образец, высушенный при температуре 100°C, имел состав, который может быть выражен формулой CaF<sub>2</sub>·0,18HF·0,28H<sub>2</sub>O. Образец, высушенный при температуре 150°C, имел состав CaF<sub>2</sub>·0,02HF·0,13H<sub>2</sub>O. Вода и фтороводород полностью не удаляются даже при температуре 300°C. Столь высокая прочность удерживания остаточных количеств HF и H<sub>2</sub>O может служить указанием на хемосорбционный характер связи этих молекул с поверхностью фторида с участием водородных связей F--H.

УДК 541.64

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ АПРОТОННЫХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ НА АКТИВНОСТЬ ПРИРОДНЫХ БИОКАТАЛИТИЧЕСКИХ АНСАМБЛЕЙ

*Л.М. Ткаченко, Л.А. Шербина, А.А. Абраменко, В.И. Бордачева,  
Г.В. Бурдейная, С.С. Кисель, Т.М. Шаповалова*

**УО «Могилевский государственный университет продовольствия»  
Могилев, Республика Беларусь**

Одним из направлений развития производства новых типов полимерных материалов специального назначения является создание волокон и пленок, содержащих иммобилизованные клетки. Такие материалы позволяют организовывать непрерывные биотехнологические процессы получения органических кислот, спиртов, кетонов, углеводов, ферментов, фармакологических препаратов, очистки сточных вод и т.д.

Инклюзия клеток в матрицу полимера предполагает диспергирование клеток в прядильном растворе и формирование из него пленок или волокон. При этом важно сохранение клетками биоактивности после воздействия на них растворителей. При производстве волокнистых и пленочных материалов на основе акриловых полимеров широко используются апротонные растворители. Поэтому *in vitro* была проведена серия систематических исследований по изучению активности природных биокаталитических ансамблей после обработки их апротонными растворителями.

В качестве модельной биокаталитической системы были использованы спиртовые дрожжи. В качестве питательного субстрата применяли водный раствор сахарозы. Биологическую активность дрожжей контролировали воллометрическим методом по скорости образования углекислого газа при сбраживании субстрата при температуре 37°C. Дрожжи обрабатывали 5 + 15 мин растворителями: – или диметилформамидом или диметилсульфоксидом или водой (контроль). Затем к суспензии клеток добавляли 9-ти кратный объем 10 %-го водного раствора сахара с таким расчетом, чтобы концентрация растворителя в субстрате составила 10 %.

Установлено, что обработанные диметилсульфоксидом дрожжевые клетки после 40 минутного индукционного периода частично восстанавливали свою биоактивность. Это указывает на возможность использования апротонных растворителей для получения иммобилизованных биоактивных материалов.

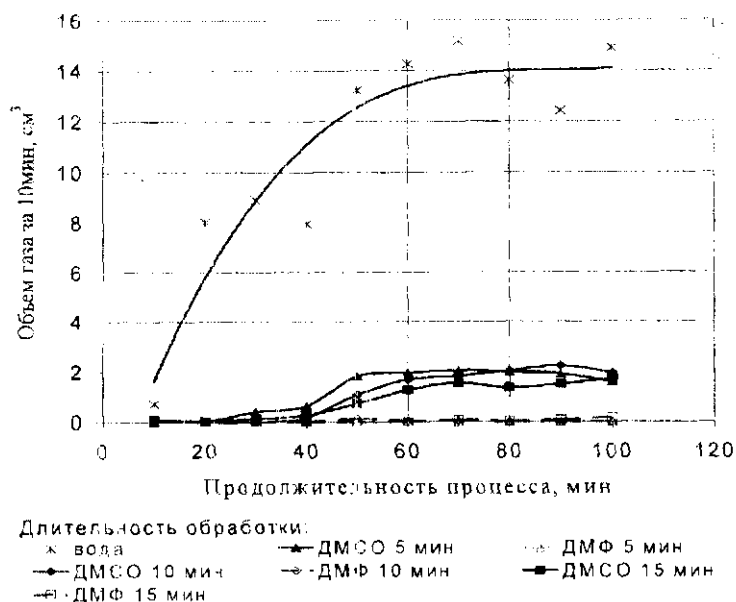


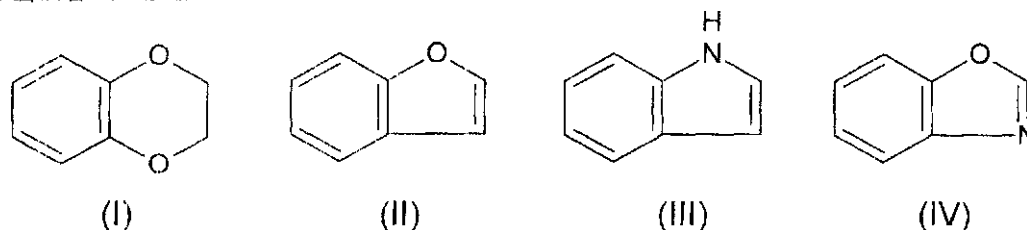
Рисунок — Зависимость активности дрожжевых клеток от продолжительности их обработки в апротонных растворителях

УДК 544.31

### ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА БЕНЗОДИОКСАНА-1,4 И ГЕТЕРОАНАЛОГОВ ИНДЕНА В СОСТОЯНИИ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА

Э.С. Волкова, П.Н. Писарев, С.В. Петрова-Куминская, Г.Н. Роганов  
УО «Могилевский государственный университет продовольствия»  
Могилев, Республика Беларусь

По молекулярным и спектральным данным определены величины термодинамических функций бензодиоксана-1,4 (I), бензофурана (II), бензопиррола (индол) (III) и бензоксазола (IV) в интервале 298.15–1000 К для веществ в состоянии идеального газа. Расчеты выполнены при условии разделения энергии по видам движения.



**Бензодиоксан-1,4.** Результаты выполненных нами и в работе [1] расчетов *ab initio* в различных приближениях с оптимизацией геометрии молекул и методом молекулярной механики ММЗ показывают, что соединение реализуется в конформации, в которой конденсированный цикл диоксана принимает форму кресла. Вторая конформация, в которой цикл диоксана имеет форму ванны, имеет существенно меньшую энергетическую стабильность ( $\Delta E = 34.4 \text{ кДж}\cdot\text{моль}^{-1}$ ) и из-за ничтожно малого содержания ее в равновесной смеси при средних температурах в расчетах не учитывались. Интерпретация колебательных спектров выполнена в [1] на основе анализа экспериментальных ИК-спектров в газовой фазе и спектров КР в жидкости, а также квантово-химических расчетов частот нормальных колебаний.  $I_A I_B I_C = 184.12 \cdot 10^{14} \text{ г}^3 \cdot \text{см}^6$ . Вращательное число симметрии  $\sigma = 2$ .

**Бензофуран, бензопиррол, бензоксазол.** Для этих соединений измерены полные инфракрасные и рамановские спектры в газовом и конденсированных агрегатных состояниях. Условное отнесение колебаний и формирование совокупности фундаментальных частот колебаний выполнено в работе [2]. Поскольку сведений об экспериментальных исследованиях геометрических параметров плоских молекул рассматриваемых соединений не обнаружено, величины длин связей и валентных углов определены расчетом *ab initio* в приближении HF/6-31G(d,p). Получены следующие значения произведений моментов инерции молекул ( $I_A I_B I_C \cdot 10^{117} \text{ г}^3 \cdot \text{см}^6$ ): (II) 74126.94; (III) 77531.82; (IV) 69331.71. Вращательные числа симметрии  $\sigma = 1$ . Расчетная энтропия бензофурана при 298.15 К согласована с ее экспериментальной величиной.