

5. Виноградова М.Г., Салтыкова М.Н. Теоретико-графовый подход в изучении взаимосвязи между строением и свойствами алкилсиланов. // *Фундаментальные исследования*, 2009. №1. С. 17-19.

6. Виноградова М.Г., Салтыкова М.Н., Ефремова А.О., Мальчевская О.А. Взаимосвязь между строением и свойствами алкилсиланов // *Успехи современного естествознания*, №1, 2010. С.136-137.

7. Виноградова М.Г., Салтыкова М.Н., Ефремова А.О. Корреляции «Структура — свойство» алкилсиланов: теоретико-графовый подход // *Успехи современного естествознания*, №3, 2010. С.141-142.

### ИЗУЧЕНИЕ КАВИТАЦИИ В НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ СТУДЕНТОВ

**Жаворонков В.И., Резник Е.Н.**

*Вятский государственный гуманитарный  
университет  
Киров, Россия*

При проведении научно-исследовательской работы студентов наибольший интерес для развития научного кругозора и формирования творческих характеристик профессионального сознания представляют темы затрагивающие смежные области различных наук. В Вятском государственном гуманитарном университете на протяжении ряда лет студенты, обучающиеся по специальностям «физика» и «химия», проводят исследования связанные с кавитацией в жидких средах.

Кавитация сопровождается рядом физико-химических эффектов таких как: сонолюминесценция, различные химические реакции, механическое воздействие, дегазация жидкости, эффективное и контролируемое диспергирование фаз. Все эти эффекты интенсивно изучаются и широко используются в науке и технике. Однако до сих пор не решены многие, связанные с ними проблемы, имеющие важное теоретическое и практическое значение.

Сравнительно несложное оборудование, позволяющее проводить исследования на достаточно глубоком уровне, и ценность практической реализации результатов делает кавитацию доступным и интересным объектом студенческой науки.

Были проведены экспериментальные исследования по обнаружению и регистрации сонолюминесценции в глицерине, влиянию кавитации на адсорбционные свойства активирован-

ного угля, изучались деструкция полисахаридов и холодный крекинг нефти, происходящие под действием ультразвука. В настоящее время исследуется образование прямых и обратных эмульсий растительного масла и воды, такие эмульсии находят применение в пищевой промышленности. Применение ультразвука позволяет в перспективе получать достаточно устойчивые системы без применения эмульгаторов, что важно как с экономической, так и экологической точки зрения.

По результатам исследований защищены три выпускные квалификационные работы, сделано несколько докладов на международных и всероссийских конференциях, получен диплом научно технической выставки.

### ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ НЕФТЕПРОДУКТОВ В ПОЧВЕ С УЧЕТОМ ИХ КАЧЕСТВЕННОГО СОСТАВА

**Околелова А.А.**

*Волгоградский государственный  
технический университет*

Существуют методики, по которым долю нефтепродуктов в почве определяют по содержанию в ней органического углерода. Нефтепродукты содержат не только углерод. Значит, их концентрация будет больше. Предлагаем для учета количества нефтепродуктов (а не только углерода) ввести поправочный коэффициент  $K_n$  — коэффициент накопления нефтепродуктов в почве и формулу его определения:

$$K_n = 100/n,$$

где  $K_n$  — коэффициент накопления нефтепродуктов в почве;  $n$  — суммарная доля углерода всех индивидуальных углеводородов, входящих в состав нефти, %; 100 — поправочный коэффициент.

Расчет суммарной доли углерода представлен на примере нефти Коробковского месторождения Волгоградской области. Ее состав в массовых процентах: этана ( $C_2H_6$ ) — 2,30, пропана ( $C_3H_8$ ) — 19,60, изобутана ( $C_4H_{10}$ ) — 21,00, н-бутана ( $C_4H_{10}$ ) — 57,10. Долю углерода в молекуле этана рассчитывают по формуле:

$$\omega_{C(C_2H_6)} = \frac{28}{34} = 82,35\%,$$

где  $\omega_{C(C_2H_6)}$  — доля углерода в молекуле этана; 28 — атомный вес углерода, 34 — атомный вес этана.

Для определения процентного содержа-

ния этана в составе нефти (x) составляем пропорцию:

$$2,30 — 100\%$$

$$X — 82,35\%,$$

тогда получим  $X = C_{(C_2H_6)} = 1,89$  г.

Аналогично рассчитываем долю углерода в молекуле пропана и бутанов. Складываем долю Сорг в составе нефти, равную 83,4 г и находим коэффициент накопления:

$$K_n = \frac{100}{83,4} = 1,2$$

Используя данные о качественном составе нефтей 14 месторождения, расположенных в различных географических регионах России мы просчитали коэффициент накопления для 107 нефтей различных месторождений. Коэффициент накопления изменяется в узком диапазоне, равном 1,19-1,21. Для определения доли нефти в почве, определенной по содержанию органического углерода, предлагаем его значение умножать на коэффициент накопления, который в среднем равен 1,2.

### СВЯЗЬ МЕЖДУ СВОЙСТВАМИ ВЕЩЕСТВ И СТРОЕНИЕМ МОЛЕКУЛ: ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД

Папулов Ю.Г.

Тверской государственный университет  
Тверь, Россия

Строение молекул — один из центральных разделов современного естествознания, затрагивающий глубокие основы физики, химии, биологии, наук о Земле и космосе, философии. Исследование молекул вносит весомый вклад в научную картину мира (природы), обогащает познавательный (понятийный) аппарат науки. Знание строения молекул необходимо для понимания их свойств, следовательно, и для разработки путей целенаправленного поиска новых веществ и материалов с заранее заданными свойствами [1].

Доклад посвящен одной из фундаментальных проблем этой области знания — установлению закономерностей, связывающих свойства веществ со строением молекул, и разработке количественных методов расчета и прогнозирования, что находится в центре внимания кафедры физической химии ТвГУ [2-9].

На современном этапе указанная проблема весьма актуальна. Число полученных веществ (их в настоящее время более 20 млн) непрерывно возрастает. Экспериментальное определение физико-

химических свойств нередко сопряжено со значительными техническими трудностями. Оно требует больших затрат материальных средств, квалифицированного труда и времени, да и не всегда возможно. В результате число изученных веществ резко отстает от числа известных (особенно это касается органических соединений, число которых исчисляется миллионами). Наличие надежных расчетных методов исследования позволяет предсказывать характеристики вещества (прежде, чем оно синтезировано, а свойство измерено) и тем самым выбирать из многих (еще не изученных и даже не полученных) соединений те, которые (согласно прогнозу) удовлетворяют поставленным требованиям. Это закладывает научные основы создания новых веществ и материалов с заранее заданными свойствами [2; 5; 7].

В принципе все физико-химические свойства веществ можно вывести исходя из фундаментальных положений квантовой механики и физической статистики. Однако полные неэмпирические расчеты (*ab initio*) весьма трудоемки и дорогостоящи, что ограничивает их практические возможности. Феноменологические методы более просты в обращении и успешно справляются с решениями задач массового расчета.

С феноменологической точки зрения молекула выступает как *система взаимодействующих атомов*. Принимая такую физическую модель, естественно предположить, что некоторое экстенсивное свойство вещества  $P$  может быть представлено как сумма свойств, приходящихся на отдельные атом-атомные взаимодействия: одно-центровые ( $p_\alpha$ ), двухцентровые — парные ( $p_{\alpha\beta}$ ), трехцентровые — тройные ( $p_{\alpha\beta\gamma}$ ) и т.д.

$$P = \sum_{\alpha} p_{\alpha} + \sum_{\alpha, \beta} p_{\alpha\beta} + \sum_{\alpha, \beta, \gamma} p_{\alpha\beta\gamma} + \dots \quad (1)$$

(общая математическая модель). Это уравнение распространяется на разные физические свойства: скалярные (например, энергия образования, энтропия), векторные (электрический дипольный момент) и тензорные (поляризуемость). Оно имеет квантовомеханическое и статистическое обоснование [10] и в принципе допускает прямые расчеты (которые в общем случае весьма трудоемки). Выражение (1) выступает как *основной постулат феноменологической теории связи свойств веществ со строением молекул* и служит базой для построения аддитивных схем расчёта [1; 2].

Внутримолекулярные взаимодействия распадаются на валентные взаимодействия и невалентные. Последние разделяются на взаимодействия атомов, удаленных по цепи молекулы через один скелетный атом, через два таких атома, через три атома и т.д. Для алканов из (1) следует [1; 2; 7]: