

Осы анықталған мәндер Р витамині топтарының азық-түліктегі мөлшерін эксперименталды зерттеу нәтижелерімен сәйкес келеді [3,5].

Бірінші және 2-ші кесте мәндері бойынша көк шайға қарағанда қара шайдың құрамындағы биофлавоноидтердің мөлшері 1,6–2,4 есе көп. Бұл айырмашылық әр түрлі сорт шайларды алуда өңдеу, сақтаудың әр түрлі әдістеріне байланысты болуы мүмкін. Яғни, бұл әдістерде биофлавоноидтердің мөлшері өзгеруі мүмкін. Көк шайды алу кезінде оның жапырақтары алдын-ала 170°–180°С температурада бумен өңделеді, оның тотығуы мүлде жүрмейді немесе 2 күннен артық жүрмейді, өйткені тотығуды қыздырумен тоқтатады. Сондықтан шай 3–12%–ға тотығады. Қара шай жапырақтарының тотығуы көк шайға қарағанда ұзағырақ болады (2 аптадан 1 айға дейін), жапырақтары 80 %–ға тотығады.

Сонымен, шайдың әр түрлі сорттарындағы биофлавоноидтердің мөлшері 2,77–10,24 %–ға дейін құрайды. Бұл ретте биофлавоноидтердің қара шайдағы мөлшері көк шайға қарағанда 1,6–2,4 есе көп. Бұл шай алу, өңдеу және сақтаудың ерекшеліктерімен байланысты.

Жұмыстың негізгі нәтижелері және қорытындысы:

1. Жұмыста Р витаминінің құрылысы, қасиеттері, адам ағзасына биохимиялық әрекеті зерттелген және витаминнің қара және көк шай сорттарындағы мөлшері сандық әдіспен анықталды. Есептеулер шай экстрактісіндегі биофлавоноидтерді $KMnO_4$ ерітіндісімен тотықтыруға негізделген титриметрлік зерттеу нәтижелері негізінде жасалды. Алынған мәндердің қателігі Корнфельд әдісі бойынша анықталды.

2. Шайдың құрамында биофлавоноидтердің мөлшері 2,77%–дан 10,24%–ға дейін болатындығы көрсетілді. Қара шайдың құрамында көк шайға қарағанда витаминдердің мөлшері 1,6–2,4 есе көп екені анықталды.

Әдебиет

1. Березов Т.Т., Коровкин Б.Ф. Биологическая химия. – М.: Медицина, 2002.
2. Строев Е.А. Биологическая химия. – М.: Высшая школа, 1986.
3. Петровский К.С. Как улучшить внутреннюю среду? // Химия и жизнь. – 1981. – №11. – с. 44–47.
4. Химические основы жизни: текст лекций / Е.В. Антина, Ю.В.Чистяков. – Иваново, 1995.
5. Химические основы жизнедеятельности: лабораторный практикум / Е.В.Антина, Ю.В.Чистяков. – Иваново, 1994.

Теории кислот и оснований и их применение

Авторы: Желтяник Л.С., Дмитренко В.Ю.

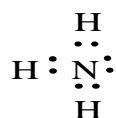
Научный руководитель Жумагалиева Б.М. х.г.к., доцент

Костанайский государственный педагогический институт

В определенных условиях многие вещества могут вести себя как кислота или как основание. Эти два понятия неразделимы, а потому

правильнее говорить о кислотнo–основных свойствах данного вещества. В 1923 г. американский физик–химик Г. Н. Льюис сформулировал одну из основных современных теорий кислот и оснований – электронную.

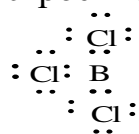
Она основывается на рассмотрении электронного строения частиц. Согласно теории Льюиса, придерживающегося взгляда, что свойства кислот и оснований объясняются их строением, **основанием** является химическое соединение, обладающее не поделённой свободной парой электронов, склонной к образованию устойчивой электронной группировки (октета) другого атома. [1] Согласно этой теории аммиак является основанием, потому что молекула



обладает указанной парой электронов.

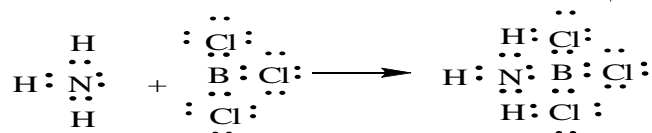
Кислотой является вещество, в молекуле которого не хватает пары электронов до устойчивой электронной группировки и которое склонно к обобществлению свободной пары электронов основания, сопровождающемуся образованием устойчивого электронного октета. С этой точки зрения хлорид бора (III),

строение которого



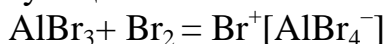
является кислотой.

Следовательно, основаниями являются донорами, а кислоты акцепторами пары электронов; реакция нейтрализации сопровождается образованием ковалентной связи за счет общей пары электронов основания:



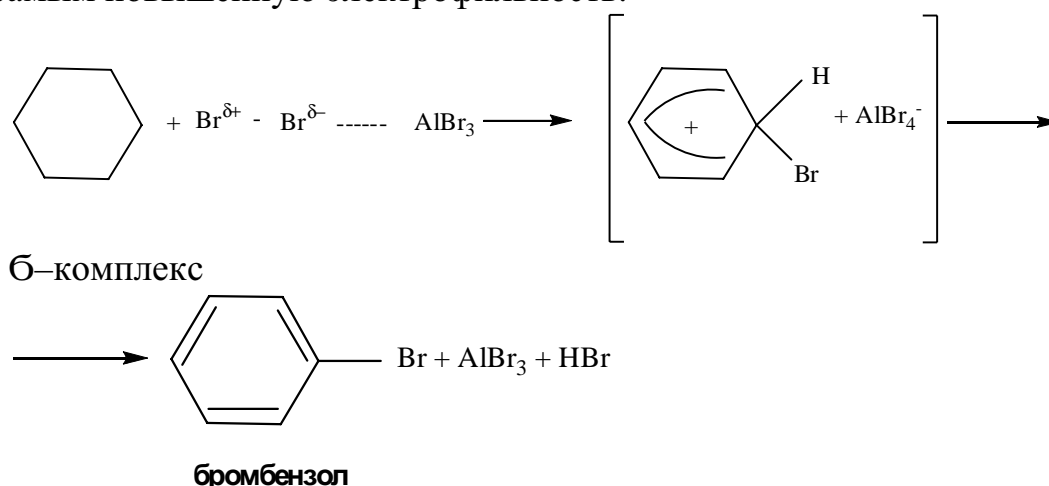
В электронной теории Льюиса происходит обобществление электронной пары основания, что принципиально отличает реакции кислотнo–основного взаимодействия от реакций окисления–восстановления, в которых окислитель полностью забирает себе электроны восстановителя.

Электронная теория Льюиса хорошо применяется в органической химии. Например, реакция бензола с бромом. Поляризующая способность молекулы бензола по отношению к бромоводороду оказывается недостаточной для успешного протекания реакции. На помощь и приходит молекула бромид алюминия, которая по отношению к бромоводороду обладает более сильной поляризующей способностью:



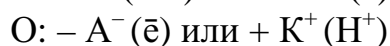
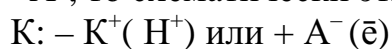
В безводном AlBr_3 атоме алюминия имеет лишь шесть электронов на внешней орбитали. Он дополняет эту группировку до октета за счет свободной электронной пары атома брома; в результате оттягивания

электронов второй атом молекулы брома приобретает положительный заряд и тем самым повышенную электрофильность:



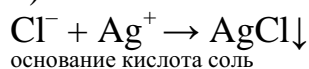
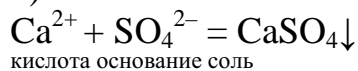
В 1939 г. известный советский химик, впоследствии академик Академии Казахской ССР, Михаил Ильич Усанович предложил новую теорию кислотно-основного взаимодействия. Эта теория по сравнению с другими, уже известными, более широко рассматривает природу кислотно-основных взаимодействий. Считалось, что продуктами таких взаимодействий являются соли. По теории Усановича, **соль** – это продукт, образующийся в результате реакции нейтрализации кислоты основанием (или основания кислотой). **Кислоты** – это частицы, способные или отдавать катионы (сюда входит и протон), или присоединять анионы (в том числе электроны), а **основания** – это частицы, способные отдавать анионы (электроны) или присоединять катионы (протон). [2]

Если обозначить кислоту буквой К, основание – О, катион – K^+ и анион – A^- , то схематически эти определения можно изобразить так:



По теории Усановича, главное место отводится образованию соли из взаимодействующих частиц. [3]

По его теории, имеется только один класс веществ – класс солей, поскольку в их состав входят катионы – кислоты и анионы – основания. Все свойства солей обусловлены проявлениям свойств этих двух частиц.



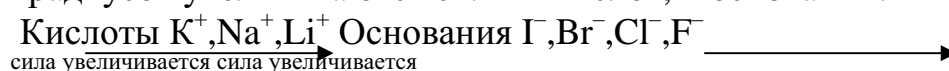
Согласно этой теории, соль – хлорид кальция – в первой реакции по катиону проявляет кислотные свойства, а во второй реакции по аниону – основные.

Для оценки кислотно–основных сил простых катионов и анионов используют величину ионного потенциала U . Она выражается отношением величины заряда заряженной частицы (Z) к ее радиусу (r):

$$U = Z / r$$

Из этого уравнения видно, что силы кислот – катионов растут с увеличением зарядов ионов (поскольку значения их радиусов увеличивается медленно), например: Na^+ , Mg^{2+} , Al^{3+} . Аналогично силы оснований – анионов растут с увеличением их зарядов, например: Cl^- , S^{2-} , N^{3-} . И для сложных анионов сохраняется такая же закономерность. Например, силы оснований NO_3^- , CO_3^{2-} , PO_4^{3-} растут в этом ряду слева направо.

Если катионы и анионы имеют одинаковые заряды, то их кислотно–основные силы оцениваются по изменению радиусов. С уменьшением ионных радиусов увеличиваются силы и кислот, и оснований:

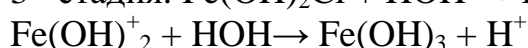
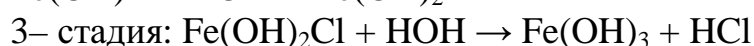
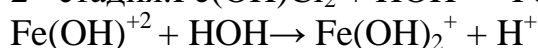
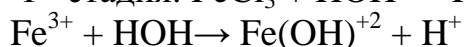


Теория Усановича объясняет химические процессы, протекающие с участием неорганических соединений, с новой позиции. Например, рассмотрим процесс гидролиза. Гидролиз (или более общий процесс сольволиза) характеризует взаимодействие ионов соли с растворителем. А соль состоит из катионов – кислоты и анионов – основания. Следовательно, с растворителем легче взаимодействует та часть соли, которая является более сильной кислотой или более сильным основанием.

В связи с этим представляет практический интерес приводить гидролиз различных солей.

1. Хлорид железа FeCl_3 .

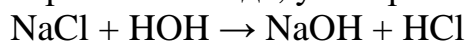
Для исследования процесса гидролиза нами были взято небольшое количество соли FeCl_3 и растворили в дистиллированной воде. Нанося каплю раствора на лакмусовую бумажку стеклянной палочкой обнаружили изменения окраски лакмусовой бумаги на розовый цвет, то есть кислую среду:

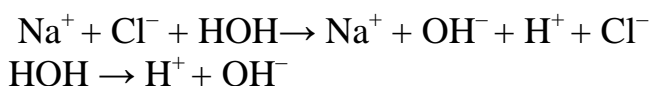


По теории Усановича Fe^{3+} является сильной кислотой, поэтому он связывает OH^- – ионы воды, а в растворе накапливаются катионы водорода, поэтому среда приобретает кислую реакцию.

2. Хлорид натрия NaCl

При растворении небольшого количества соли хлорида натрия в дистиллированной воде, универсальная бумага показала $\text{pH}=7$.





По теории Усановича, ион Na^+ является слабой кислотой, а Cl^- – слабым основанием. В связи с этим соль хлорида натрия не подвергается гидролизу.

Таким образом, теории кислот и оснований объясняют многие химические процессы с новой позиции, учитывая кислотно–основные свойства участвующих в них соединений.

Список использованной литературы

1. Крешков А.П. Основы аналитической химии – М: Химия, 1976–480с
2. Хьюи Дж. Неорганическая химия. Строения вещества и реакционная способность перевод с английского – М: Химия, 1987–696с
3. Нурахметов Н.Н., Бекишев К.Б., Заграничная Н.А. Химия – Алматы: Мектеп, 2006–336с

Прогнозирование теплоты образования химических соединений методами QSPR

Авторы: Кожукова М.Н., Самолюк Е.А.

Научные руководители: Важев В.В., Губенко М.А.

Костанайский государственный педагогический институт

Теплота (или энтальпия) образования (ΔH_f°) является фундаментальным термодинамическим свойством. Она используется для предсказания физико–химических особенностей составов. Таким образом, теплота образования важна в исследовании энергий связи, энергий резонанса, природы химических связей, вычисления констант равновесия реакций и т.д. [1, 5, 6].

В работе Wang Y.N, Chen J. W, Li X. H, Wang B, Cai X. Y, Huang L. P. теплота образования ряда алкилбензолов была соотнесена с физико–химическими и топологическими дескрипторами, рассчитанными с помощью методов QSPR [2].

В нашей работе выполнено моделирование теплоты образования алкилбензолов для 26 соединений с использованием дескрипторов, генерируемых программой Dragon. Качество прогнозирования для 7 веществ тренировочной выборки характеризуется коэффициентом корреляции $R = 0,9952$ и стандартной ошибкой $s = 1,876$, а для 19 веществ контрольной выборки $R = 0,9403$, $s = 5,911$.

Результаты моделирования представлены в таблице 1. Первые 7 веществ – тренировочная выборка (рис. 1), следующие 19 веществ – контрольная выборка (рис. 2).

Таблица 1 – Экспериментальные и рассчитанные значения теплот образования алкилбензолов по молекулярным дескрипторам