

и палладия) и 1% раствор аммиака (для десорбции серебра). При элюировании после совместной сорбции извлекается сначала серебро (I), а затем совместно платина и палладий. При этом максимальное элюирование ионов из фазы сорбента происходит при пропускании уже первых 10,0 мл элюента. Элюирование хлоридных комплексов платины и палладия происходит на уровне 88–100%. Степень извлечения серебра составляет около 97%.

Таким образом, хлоридные комплексы из-

учаемых благородных металлов могут быть успешно выделены и разделены при помощи исследуемых анионитов в данных условиях. Поэтому аниониты Purolite S985 и Purolite A500 могут быть рекомендованы для совместного извлечения хлоридных комплексов платины (IV), палладия (II) и серебра (I) из солянокислых растворов, используемых в технологических схемах по извлечению металлов платиновой группы и серебра из первичных и вторичных источников.

### Список литературы

1. Золотов Ю.А. Аналитическая химия металлов платиновой группы // Сборник обзорных статей.– М.: Едиториал УРСС, 2003.– 592с.
2. Гинзбург С.И. Аналитическая химия платиновых металлов.– М.: Наука, 1972.– 617с.
3. Пятницкий И.В. Аналитическая химия серебра.– М.: Наука, 1975.– 286с.

## КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИМЕРНЫХ КОМПЛЕКСОВ СЕЛЕНОЦИСТЕИНА

Б.М. Исмагулов, А.Ф. Курманова, И.А. Пустолайкина  
Научный руководитель – к.х.н., доцент К.Ж. Кутжанова

Карагандинский государственный университет имени Е.А. Букетова  
100028, Казахстан, г. Караганда, ул. Университетская 28, ismagulov-mc13@mail.ru

Как известно, аминокислоты обладают как кислотными, так и основными свойствами: кислотные свойства придаёт карбоксильная группа, основные – аминогруппа. В отдельной молекуле они взаимно нейтрализуют друг друга, образуя биполярные ионы.

Интересно проследить как данные свойства изменяются в димерных молекулах, изменяя протолитическую способность селеноцистеина, применяя для этого широкий арсенал квантово-химических программ и методик.

Представленная на рисунке 1 модель селеноцистеина демонстрирует геометрические параметры молекулы: межатомные расстояния и валентные углы.

Полная оптимизация геометрии проводилась в валентно-расщепленном базисе 3–21g – одном из наиболее популярных и экономичных базисных наборов, в котором АО электронов внутренней оболочки аппроксимируются тремя гауссовскими функциями орбитали валентной оболочки описываются соответственно двумя ( $N=2$ ) и одной ( $P=2$ ) гауссовской функцией.

Интересно было исследовать способность селеноцистеина к комплексообразованию за счет водородных связей (КВС) в димерных мо-

лекулах и выявить какие из возможных комплексов являются кинетически наиболее стабильными и возможно наиболее вероятными.

В таблице 1 представлены циклические комплексы за счет водородной связи, образованный при ориентации гидроксогрупп друг относительно друга.

Различие во взаимном расположении двух эдентичных молекул селеноцистеина сильно сказывается на значениях геометрических пара-

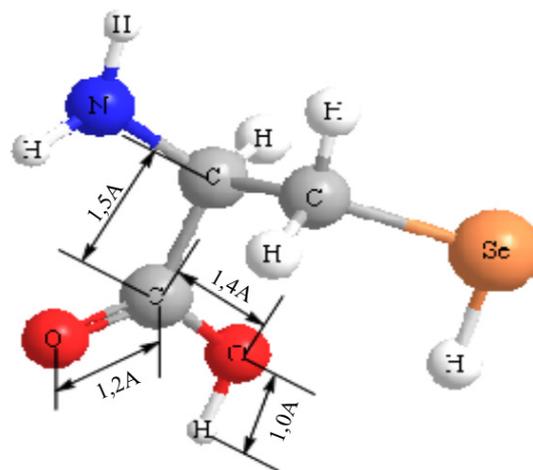


Рис. 1. Геометрические параметры селеноцистеина

Таблица 1. Циклические комплексы селеноцистеина за счет водородной связи

Димер	Геометрические параметры	$\Delta E$ , a.u	$\mu$ , Debye
I		-5417,120	1,9866
II		-5417,116	2,0702

метров рассмотренных комплексов.

Если сравнивать геометрические параметры димеров – то максимальные значения принадлежат структуре I. Возможно подобная зависимость может указывать на более слабые межатомные взаимодействия внутри молекулы и следовательно к более сильным межмолекулярным

взаимодействиям в соответствующих димерах, вследствие более высокой подвижности водорода.

Кроме того, возрастание значения дипольного момента в данном ряде свидетельствует об увеличении полярности молекул от димера I к димеру II.

## ИССЛЕДОВАНИЕ АНТИОКИСЛИТЕЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ РЯДА ПИЩЕВЫХ ДОБАВОК МЕТОДОМ СПЕКТРОФОТОМЕТРИИ

О.Д. Киреева

Научный руководитель – к.х.н., ассистент Е.В. Булычева

Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, kireevaod@gmail.com

В настоящее время в пищевой, косметической, фармацевтической отраслях используется огромное количество разнообразных добавок, в том числе антиокислительные. Антиокислители позволяют продлить сроки годности продук-

тов, улучшить их качество, повысить пищевую ценность продуктов питания и сохранить их товарный вид. Наиболее востребован такой класс добавок при производстве жиросодержащих продуктов – мясных продуктов питания, кремов