

чество белорусской пшеницы значительно улучшилось. В настоящее время в УО «ГГАУ» исследуется более 100 сортов и сортообразцов мягкой озимой пшеницы в качестве сырья для макаронной промышленности.

Общий анализ изучаемых сортов и дальнейшее улучшение их генетического потенциала – основные направления работы на пути создания исходного материала сортов мягкой озимой пшеницы макаронного назначения.

ЛИТЕРАТУРА

Официальный сайт Министерства статистики и анализа РБ, [электронный ресурс], режим доступа: <http://www.belstat.gov.by>.

УДК 691.175.5/8 : 546-3

СКРИНИНГ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ, ПРИГОДНЫХ ДЛЯ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ ПОЛИОЛЕФИНОВ

Муха Д.В.¹, Степаненко А.Б.², Литвяк В.В.³

¹ГНУ «Институт биоорганической химии НАН Беларуси»

г. Минск, Республика Беларусь

²УО «Белорусский национальный технический университет»

³РУП «Научно-практический центр Национальной академии наук

Беларуси по продовольствию»

г. Минск, Республика Беларусь

Установлено, что для получения новых типов биodeградируемых полимерных материалов на основе полиолефинов и крахмала необходимо дополнительно ввести функционализированный полимер, позволяющий совместить гидрофобный полиолефин с гидрофильным крахмалом. Важными критериями органических веществ, прививаемых на полиолефин, являются: доступность по цене; нетоксичность; нелетучесть; способность к полимеризации (наличие двойных связей); размер молекулы.

В результате проделанной работы разработан алгоритм проведения скрининга органических веществ, пригодных для функционализации полиолефинов. Сформировано подмножество химических соединений из базы химической информации PubChem, удовлетворяющее критериям, отобранным для поиска соединения-кандидата для использования в качестве биоразлагающих добавок к полимерам. Отобранные соединения прошли предварительный скрининг на отсутствие специ-

фического воздействия и токсичности в отношении человеческих клеток, тканей и органов, согласно информации в PubChem BioAssay.

Сформирован общий вид поискового запроса, основанный на реализованных в базе PubChem поисковых механизмах на основе индексов, описывающих экспериментальные и рассчитанные физико-химические свойства химических соединений. В полученном подмножестве, состоящем из 140 тысяч химических соединений, отобраны молекулы, содержащие сульфонатные и карбоксильные группы. Полученные группы веществ имеют размер 708 и 30433 соединения соответственно. Далее размер этих групп был уменьшен путем удаления соединений, содержащих «нежелательные» химические элементы, модификация которыми способна затруднить процесс биоразложения органических соединений, а также потенциально повысить их токсичность. Данные о целевых соединениях-кандидатах переведены в несколько различных форматов представления химической информации (XML, SMILES), позволяющие вести дальнейшую их обработку как пользователем в ручном режиме, так и автоматически с помощью программных средств и исполняемых сценариев.

Отобранные химические соединения содержат в своем составе полярные группы (сульфонатную, карбоксильную) с большим значением дипольного момента и способностью участвовать в образовании водородных связей. Используемый в скрининге диапазон значений коэффициента разделения между гидрофобным растворителем и водой определил наличие у соединений гидрофобных группировок и, одновременно, потенциальную возможность растворения в воде.

Выполненная работа представляет собой базис для проведения экспериментальных исследований по тестированию стимуляции биоразложения полимерных материалов микроорганизмами.

УДК 663.993.42

РАЗРАБОТКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО СТЕНДА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА ОБЖАРКИ ПИВОВАРЕННОГО СОЛОДА

Поздняков В.М., Э.И. Пол Дивейни

УО «Белорусский государственный аграрный технический университет»
г. Минск, Республика Беларусь

Для пивоваренной промышленности Республики Беларусь достаточно остро стоит проблема перехода на использование сырья местного производства, при этом существующее технологическое оборудова-