

ISSN print 2708-0536
ISSN on-line 2708-0544

**Vasyl' Stus Donetsk National University
L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic
Chemistry and Coal Chemistry**

**IV INTERNATIONAL (XIV UKRAINIAN)
SCIENTIFIC CONFERENCE
FOR STUDENTS AND YOUNG SCIENTISTS**

CURRENT CHEMICAL PROBLEMS



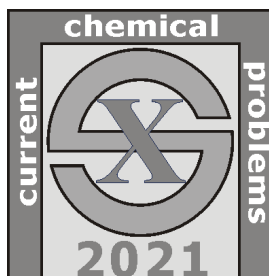
ABSTRACT BOOK

**To the 100th Anniversary of the Birth
of Academician L. M. Litvinenko**

Vinnytsia 2021

MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF UKRAINE
NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF UKRAINE
VASYL' STUS DONETSK NATIONAL UNIVERSITY
L. M. LITVINENKO INSTITUTE OF PHYSICAL-ORGANIC
CHEMISTRY AND COAL CHEMISTRY

CURRENT CHEMICAL PROBLEMS



IV International (XIV Ukrainian) scientific conference
for students and young scientists

BOOK OF ABSTRACTS

To the 100th Anniversary of the Birth of Academician L. M. Litvinenko



March 23–25, 2021
Vinnytsia

UDC 54(06)

C 95

*Approved by the Academic Council of Vasyl' Stus Donetsk National University
(minutes N 11, 26.02.2021)*

*Approved by the Academic Council of L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic
Chemistry and Coal Chemistry NAS of Ukraine (minutes N 2, 16.02.2021)*

Current chemical problems (CCP-2021): book of abstracts of the IV International (XIV Ukrainian) scientific conference for students and young scientists, March 23–25, 2021, Vinnytsia / Vasyl' Stus Donetsk National University; editorial board: O. M. Shendrik (editor-in-chief) [et al.]. Vinnytsia, 2021. 224 p.

IV International (XIV Ukrainian) scientific conference for students and young scientists "Current Chemical Problems" (CCP-2021) was held at Vasyl' Stus Donetsk National University on March 23–25, 2021.

The book of abstracts contains the results of investigations, obtained in the educational and research establishments of Ukraine, Republic of Belarus, Republic of Azerbaijan, Russian Federation, Republic of Poland, Republic of Lithuania, Federal Republic of Germany, Cyprus in the fields of analytical, quantum, inorganic, organic, physical, medicinal and pharmaceutical chemistry, biochemistry, chemical education, chemical engineering, chemistry of polymers and composites.

Conference partners:

UkrChemAnalysis Ltd.

Otava Ltd.

Association of Perfumery and Cosmetics of Ukraine

Vasyl' Stus DonNU Student Council

Chemlaborreactive Ltd.

Vinnytsia Chamber of Commerce and Industry

"INSTRUMENT-SERVIS"

"ALSI-Chrom"

"MixLab"

UkrOrgSyntez Ltd.

Editorial board: O. M. Shendrik (ed.-in-ch.)

S. V. Zhylytova (executive secretary)

I. O. Opejda

S. V. Radio

G. M. Rozantsev

O. M. Shved

Editorial board address: 21021, Vinnytsia, vul. 600-richchia, 21, Faculty of Chemistry, Biology and Biotechnologies of Vasyl' Stus Donetsk National University.

© Vasyl' Stus DonNU, 2021

© Authors, 2021

© O. M. Shendrik (ed.-in-ch.), 2021

ISSN print 2708-0536

ISSN on-line 2708-0544

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ДОНЕЦЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТУСА
ІНСТИТУТ ФІЗИКО-ОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ І ВУГЛЕХІМІЇ
ІМ. Л. М. ЛИТВИНЕНКА НАН УКРАЇНИ

ХІМІЧНІ ПРОБЛЕМИ СЬОГОДЕННЯ



IV Міжнародна (XIV Українська) наукова конференція
студентів, аспірантів і молодих учених

ЗБІРНИК ТЕЗ ДОПОВІДЕЙ

До 100-річчя від дня народження академіка Л. М. Литвиненка



23–25 березня 2021 р.
м. Вінниця

*Затверджено Вченою радою Донецького національного університету
імені Василя Стуса (протокол № 11 від 26.02.2021 р.)*

*Затверджено Вченою радою Інституту фізико-органічної хімії і вуглекимії імені
Л. М. Литвиненка Національної академії наук України (протокол № 2 від 16.02.2021 р.)*

Хімічні проблеми сьогодення (ХПС-2021): збірник тез доповідей IV Міжнародної (XIV Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених, 23–25 березня 2021 р., м. Вінниця / Донецький національний університет імені Василя Стуса; редколегія: О. М. Шендрик (відп. ред.) [та ін.]. Вінниця, 2021. 224 с.

З 23 по 25 березня 2021 року в Донецькому національному університеті імені Василя Стуса відбулася IV Міжнародна (XIV Українська) наукова конференція студентів, аспірантів і молодих учених «Хімічні проблеми сьогодення» (ХПС-2021).

У збірнику опубліковані результати досліджень, які виконані в навчальних закладах і наукових установах України, Білорусі, Азербайджану, Російської Федерації, Польщі, Литви, Німеччини, Кіпру в галузях аналітичної, квантової, неорганічної, органічної, фізичної, медичної та фармацевтичної хімії, біохімії, хімічної освіти, хімічної інженерії, хімії полімерів і композитів.

Партнери конференції:

ТОВ «УкрХімАналіз»

Науково-сервісна фірма «ОТАВА»

Асоціація «Парфумерія та косметика України»

Студентська рада ДонНУ імені Василя Стуса

ТОВ «Хімлаборреактив»

Вінницька торгово-промислова палата

Приватне підприємство «Інструмент-Сервіс»

ТОВ «АЛСІ-ХРОМ»

ТОВ «МіксЛаб»

ТОВ «НВП «Укроргсинтез»

Редакційна колегія: О. М. Шендрик (відп. ред.)

С. В. Жильцова (відп. секр.)

Й. О. Опейда

С. В. Радіо

Г. М. Розанцев

О. М. Швед

Адреса редколегії: 21021, м. Вінниця, вул. 600-річчя, 21, факультет хімії, біології і біотехнологій Донецького національного університету імені Василя Стуса.

© ДонНУ імені Василя Стуса, 2021

© Колектив авторів, 2021

© О. М. Шендрик (відп. ред.), 2021

PROGRAMME COMMITTEE

Chairman: *Prof. Oleksandr Shendrik*, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Vice-chairman, scientific secretary: *Dr. Svitlana Zhylytsova*, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Prof. Serhii Bogza, Institute of Organic Chemistry NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

Dr. Maksym Chekanov, Institute of Molecular Biology and Genetics NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

Prof. Yevgen Get'man, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Dr. Mykhailo Frasynyuk, Institute of Bioorganic Chemistry and Petrochemistry NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

Dr. Olena Khyzhan, National University of Life and Environmental Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine

Prof. Mykola Korotkikh, Institute of Organic Chemistry NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

Prof. Olga Kushch, L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic Chemistry and Coal Chemistry NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

Dr. Yulia Lesishina, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Prof. Wojciech Macyk, Jagiellonian University in Kraków, Kraków, Poland

Prof. Anatolii Matvienko, L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic Chemistry and Coal Chemistry NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

Dr. Stéphane Mazières, Paul Sabatier University (Toulouse III), Toulouse, France

Dr. Vasyl' Mel'nichenko, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Dr. Saulius Mickevicius, Vytautas Magnus University, Kaunas, Lithuania

Prof. Josyp Opeida, Department of Physical Chemistry of Fossil Fuels, L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic Chemistry and Coal Chemistry NAS of Ukraine, Lviv, Ukraine

Prof. Anatolii Popov, L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic Chemistry and Coal Chemistry NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

Dr. Serhii Radio, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Dr. Gennadiy Rayenko, L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic Chemistry and Coal Chemistry NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

Prof. Anatolii Ranskii, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia, Ukraine

Dr. Andrii Red'ko, L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic Chemistry and Coal Chemistry NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

Prof. Georgii Rozantsev, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Prof. Volodymyr Rybachenko, L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic Chemistry and Coal Chemistry NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

Prof. Peter J. Skabara, School of Chemistry, University of Glasgow, Scotland, United Kingdom

Prof. Ihor Shpanko, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Prof. Olena Shved, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

LOCAL ORGANIZING COMMITTEE

Iryna Hordieieva, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Olha Zosenko, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Dmytro Kyrychenko, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Dr. Natalya Leonova, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Oleksandra Mariichak, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Yuliia Oleksii, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Olexandr Tsiapalo, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

Kseniia Yutilova, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

До 100-річчя від дня народження видатного українського хіміка, лауреата Державної премії України в галузі науки і техніки, лауреата премії імені Л. В. Писаржевського НАН України, академіка НАН України

Леоніда Михайловича ЛИТВИНЕНКА
(12.01.1921 – 26.10.1983)



«Такі люди народжуються раз у сторіччя», – так зазвичай говорять про тих, хто своєю працею і талантом зробив особливо відчутний внесок у розвиток науки.

Річниця з дня народження академіка Л. М. Литвиненка – видатного вченого в області фізико-органічної хімії та талановитого організатора науки, є доброю нагодою відзначити його великий внесок як в розвиток цієї області хімії, так і науки в Донбасі. Символічно, що ця дата збігається з датою народження самої фізико-органічної хімії – нової і не усіма визнаної на час його наукової діяльності науки. Його досягнення відображені в численних книгах, статтях, винаходах, де викладено результати досліджень в області теорії та практики органічних реакцій, керованого ним великого наукового колективу.

Наука останніх століть – це передусім її інституції. Можливість їх створення випадає далеко не всім, навіть найвідомішим вченим. Л. М. Литвиненко отримав такий шанс і успішно використав його для розвитку обраної ним науки, а також становлення хімічної академічної науки Донбасу.

Важливою для Донбасу була організація Донецького державного університету, де академік Л. М. Литвиненко був першим ректором. На хімічному факультеті ним організовано дві кафедри: органічної хімії та біохімії, де студентів та аспірантів навчали розробленим фізико-органічною хімією інструментам, які можна використовувати для розуміння природи хімічних реакцій, контролю та створення нових процесів та речовин. Він відкриває кафедру органічної хімії, спеціальність «Біохімія» для хіміків (в єдиному університеті СРСР), створює і очолює першу в університеті спеціалізовану вчену раду із захисту кандидатських дисертацій з хімічних наук.

Л. М. Литвиненко зустрівся з нелегким викликом – за короткий час, фактично з нічого, організувати спочатку Донецьке відділення фізико-органічної хімії Інституту фізичної хімії ім. Л. В. Писаржевського АН УРСР (ДЮФОХ ІФХ АН УРСР), а потім і академічний Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії НАН України (ІнФОВ НАНУ), де він був беззмінним директором і якому присвоєно ім'я Л. М. Литвиненка. Більшість відділів в Інституті розробляли теми, пов'язані з фізико-органічною хімією.

Зусилля Л. М. Литвиненка розвинути фундаментальні дослідження з хімії на Донбасі були спрямовані на вирішення практичних завдань цього регіону, пов'язаних з вугільною промисловістю. Над проблемами вуглехімії за ініціативи Леоніда Михайловича працювали у відділах Інституту та на кафедрах Університету.

І визначальним до настільки значних змін став прихід на Донеччину 43-річного професора з Харкова, доктора хімічних наук Леоніда Михайловича Литвиненка – авторитетного і шанованого вченого, добре відомого в наукових колах вітчизняних та серед зарубіжних колег. Творча енергія та невтомний дух дослідника, що притаманні Леоніду Михайловичу, немов бурхлива екзотермічна реакція надзвичайної сили, надали нового імпульсу науковим дослідженням, спонукаючи до нових звершень в науці.

Для Леоніда Михайловича Донецьк став тим науковим плацдармом, де він зміг вповні реалізувати свої видатні здібності. У роботах Л. М. Литвиненка і його наукової школи розробляється новий для органічної хімії напрямок – екстратермодинамічний підхід, пов'язаний з пошуком, за допомогою кореляційного аналізу, залежностей між структурою реагентів та характеристиками їх реакцій. Цей підхід покладений в основу отриманих Л. М. Литвиненком із співробітниками кореляційних рівнянь, що описують залежність структура – реактивність. Цей підхід виявився продуктивним при встановленні нових залежностей типу структура молекули – її біологічна активність.

Основні наукові роботи вченого присвячено вивченню структури та реакційної здатності органічних сполук, механізмів хімічних реакцій та органічного каталізу. Академік Л. М. Литвиненко вивчав кінетику та механізм реакцій нуклеофільного заміщення у ненасичених атомів вуглецю, сірки, фосфору; запропонував рівняння Богаткова–Попова–Литвиненка, яке кількісно описує вплив електронної та просторової будови аліфатичних амінів на їх реакційну здатність; з'ясував механізм дії органічних катализаторів у процесах ацильного переносу, в тому числі особливості нуклеофільного каталізу у неводному середовищі; сформулював закономірності біфункціонального каталізу; відкрив кисень-нуклеофільний та фотоіндукційний катализ. Про нього писали і говорили як про талановитого вченого, самородка, про таких людей американці говорять: «Створив себе сам». Роботи, які принесли йому популярність в галузі фізико-органічної хімії, лягли в основу виявленого нового структурного явища – підвищеної провідності в протяжних молекулярних системах на основі біфенілу, що містять між фенільними фрагментами гетероатом з неподіленою парою електронів. Пізніше це явище було виявлено в інших молекулярних системах і отримало назву «позитивного місткового ефекту».

Унікальний масштаб особистості Леоніда Михайловича проявився у створенні потужної ефективно діючої наукової школи. Наукова спадщина Леоніда Михайловича – 3 монографії, понад 450 статей та 40 винаходів, й, звичайно, його учні – кандидати та доктори хімічних наук. Леонід Михайлович був Вченим з великої літери і однозначно був приречений на творчий науковий успіх. Неспокійний дух творення Вчитель передав своїм послідовникам. «Завжди вперед» – лейтмотив, що чітко визначає вектор наукової діяльності гідної плеяди учнів академіка Л. М. Литвиненка, які не просто продовжили його наукові дослідження, а й вивели фізико-органічну хімію на новий виток розвитку. Фізична органічна хімія має чудову історію та велике майбутнє, даючи нам уявлення про взаємозв'язок структури та властивостей хімічних частинок, різноманітних матеріалів, природних біологічно активних сполук. Сьогодні фізична органічна хімія є важливою теоретичною основою для практики, коли розробляється нова реакція або процес. Прогнізування органічної хімії, яка опиратиметься на подальший розвиток фізичної органічної хімії, також, безсумнівно, сприятиме зростанню хімії як науки в цілому.

In commemoration of the important date – 100th anniversary of the day of birth of a prominent Ukrainian chemist, Laureate of the State Prize in Science and Technology, Laureate of the L. V. Pisarzhevsky NAS of Ukraine Prize, Academician of the NAS of Ukraine

Leonid Mikhailovich LITVINENKO

(12.01.1921 – 26.10.1983)



“You don’t meet a man like that every century”, – is usually said of those who, with their work and talent, have made a particularly substantial contribution to the development of science.

Anniversary of the day of birth of academician L. M. Litvinenko – an outstanding scientist and also a talented organizer of science, whose research fields were physical and organic chemistry, is a good opportunity to celebrate his great contribution to the development of not only those particular fields, but also science in Donbass in general. Symbolically, this date coincides with the date of birth of physical organic chemistry itself, as a new discipline, not widely recognized at the time of his scientific activity. His achievements are reflected in numerous books, articles, inventions. All those published works demonstrate the results of research of the theory and practice of organic reactions,

received by the big scientific collective which he headed.

The science of recent centuries is first and foremost in its institutions. The possibility to create them does not come to most, even the famous scientists. L. M. Litvinenko received such a chance, which he successfully used to not only develop the scientific discipline he chose for himself, but also to form the basis of chemical academic science in Donbass.

Important for Donbass was the establishment of Donetsk State University, where academician L. M. Litvinenko became the first rector. He organized two departments at the Faculty of Chemistry: organic chemistry and biochemistry. There, students and graduate students learnt the tools, developed by physical and organic chemistry, that they could use to understand the nature of chemical reactions, to control and create new processes and substances. In addition to opening the specialty “Biochemistry” for chemists (at, then, the only university in the USSR), he created and headed the first specialized scientific council at the university for the defense of PhD theses in chemical sciences.

L. M. Litvinenko faced a difficult challenge – in a short time, practically out of nowhere, he organized the Donetsk Department of Physical and Organic Chemistry of L. V. Pisarzhevsky Institute of Physical Chemistry of the Academy of Sciences of the USSR, and later – the Institute of Physical Organic Chemistry and Coal Chemistry of the National Academy of Sciences of Ukraine (IPOCC NASU). He was the permanent director of IPOCC NASU, and his name is now assigned to the Institute. Most of the departments of the Institute studied the problems related to physical organic chemistry.

L. M. Litvinenko's efforts to develop fundamental chemical research in Donbass were aimed at solving practical problems in the region related to the coal industry. At the initiative

of Leonid Mikhailovich, the departments of both the Institute and the University worked on scientific tasks of coal chemistry.

The precondition for such significant changes was the arrival in Donetsk of one 43-year-old professor from Kharkov, Doctor of Chemical Sciences Leonid Mikhailovich Litvinenko – a reputable and respected scientist, known in the scientific circles of Soviet Union chemists as well as among foreign colleagues. His creative energy and tireless spirit of the true researcher, like a violent exothermic reaction of extraordinary force, gave a new impetus to scientific research, encouraged new achievements in science.

For Leonid Mikhailovich, Donetsk became the scientific foothold, a base, where he was able to fully realize his outstanding abilities. In the works of L. M. Litvinenko and the science community he established, a new direction was developed for organic chemistry – extrathermodynamic approach, associated with using correlation analysis to search for dependences between the structure of reagents and characteristics of reactions between them. This approach made the basis for correlation equations, which describe the structure-reactivity dependence, and were obtained by L. M. Litvinenko and colleagues. This approach proved to be successful in establishing new dependences of the biological activity of molecules on their structure.

His main scientific works are devoted to studying the structure and reactivity of organic compounds, mechanisms of chemical reactions and organic catalysis. Professor L. M. Litvinenko studied the kinetics and mechanism of nucleophilic substitution at unsaturated carbon, sulfur, and phosphorus atoms. He offered an equation that quantifies the influence of the electronic and spatial structure of aliphatic amines on their reactivity, which was later called the Bogatkov-Popov-Litvinenko equation. He elucidated the mechanism of action of organic catalysts in acyl transfer processes, including the particularities of nucleophilic catalysis in a non-aqueous medium. His efforts resulted in the formulation of the laws of bifunctional catalysis and discovery of oxygen-nucleophilic and photoinduced catalysis. The man was always referred to as a talented scientist, a natural, someone Americans would succinctly describe as “Self-made”. The works that brought him vast popularity in physical and organic chemistry, formed the basis for the description of a new structural phenomenon – increased conductivity in long molecular systems based on biphenyl, containing a heteroatom with a lone pair of electrons between phenyl fragments. This phenomenon was later discovered in other molecular systems and acquired the name of “positive bridge effect”.

The unique dimensions of Leonid Mikhailovich's personality manifested in the creation of a powerful and effective science community. Leonid Mikhailovich's scientific heritage includes 3 monographs, more than 450 articles and 40 inventions, and, of course, his students who became candidates and doctors of chemical sciences. He was a scientist with God-given set of skills and was unequivocally doomed to scientific success. The Teacher passed on his own rebellious creative spirit to his successors. “Always forward” is a leitmotif, which clearly defines the vector of scientific activity of a worthy pleiad of L. M. Litvinenko's students, who not only continued his research, but also brought physical and organic chemistry to a new level of development. Physical organic chemistry possesses both the great history and a promising future, due to it giving us an idea of the relationship between the structure and properties of chemical particles, various materials, natural biologically active compounds. Today, physical organic chemistry is an important theoretical basis for the practice of developing new reactions and processes. The prosperity of organic chemistry, which will be based on the further development of physical organic chemistry, will also undoubtedly contribute to the growth of chemistry as a science in general.

**ANALYTICAL CHEMISTRY /
АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ**

1-[5-(3-НІТРОБЕНЗИЛ)-1,3-ТІАЗОЛ-2-ІЛ]АЗОНАФТАЛЕН]-2-ОЛ – НОВИЙ ФОТОМЕТРИЧНИЙ РЕАГЕНТ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ Pd(II)

Гавронська М. О., Уколова М. В., Білогубка В. М., Кулинич А. І., Федішин О. С.

Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів, Україна

marina.havronska@lnu.edu.ua

В останні роки попит на паладій почав різко зростати, що пов'язано з розширенням можливостей застосування цього металу в різних галузях промисловості. Поряд з платиною, паладій знайшов широке застосування в медицині: для покриття медичних інструментів, як компонент plomb, деталей кардіостимуляторів і навіть вивчається медичною галуззю для використання в можливій новій протипухлинній формі. Стійкість до різного роду агресивних середовищ та впливів, роблять незамінним цей метал в радіоелектроніці та хімічній промисловості. Відсутність природних покладав паладію робить аналітичний контроль його вмісту в промислових об'єктах одним з актуальних для нашої держави завдань, оскільки розробка простих, експресних та доступних методик визначення паладію дає змогу оцінити доцільність регенерації цього металу з промислових відходів з метою його рекуперації. Для вирішення завдання аналітичного контролю паладію найбільш зручним є метод спектрофотометрії, оскільки в ньому поєднуються достатня чутливість визначення з простотою та експресністю визначення, а додатково покращити хіміко-аналітичні характеристики спектрофотометричної методики можна з використанням нових аналітичних реагентів.

Як новий фотометричний органічний реагент для визначення Pd(II) запропонований 1-[5-(3-нітробензил)-1,3-тіазол-2-іл]азонафтален]-2-ол. Встановлено, що взаємодія Pd(II) з органічним реагентом простежується в інтервалі рН 1,0–10,0. Як оптимальний фоновий електроліт запропоновано універсальну буферну суміш з рН 3,0. Методом молярних відношень встановлено, що співвідношення метал:ліган у комплексній сполуці є 1:2. На основі проведених досліджень розроблено чутливу ($C_{\min} = 4,6 \cdot 10^{-6}$ М) методика фотометричного визначення Pd(II) за смоугою поглинання комплексу (табл. 1).

Таблиця 1. Метрологічні характеристики спектрофотометричного визначення Pd(II) з використанням нітро-БТАН ($C_{\text{нітро-БТАН}} = 1,5 \cdot 10^{-4}$ М, рН = 3,0, $\mu = 0,3$ М, $l = 3,0$ см, $\lambda_{\text{max}} = 696$ нм, $V_{\text{ЕЮН}} = 10,0$ мл, $V_{\text{р-ну}} = 25,0$ мл)

Рівняння графіка	$\Delta A = 0,14 + 0,14 \cdot 10^5 C_{\text{Pd(II)}}$
Межа виявлення, моль/л	$4,6 \cdot 10^{-6}$
Діапазон лінійності аналітичного сигналу, моль/л	$(0,2 - 6,0) \cdot 10^{-5}$
Коефіцієнт кореляції R	0,9950

Особливої уваги заслуговує експресність визначення, адже розроблена методика, на відміну від переважної більшості спектрофотометричних методик визначення паладію, зокрема з використанням заміщених бензилтіазолілазобарвників [1], не потребує тривалого нагрівання розчинів на водяній бані, адже комплексоутворення відбувається швидко. Розроблена спектрофотометрична методика характеризується високою селективністю до більшості іонів супутніх металів. Винятком є іони металів платинової групи для яких допустимими є співмірні кількості, а іони Ru(IV) та Os(IV) заважають визначенню уже при співвідношенні 1:0,1.

[1] Тупис А. М. Спектрофотометрія сполук 1-(5-бензилтіазол-2-іл)азо-нафтален-2-олу з іонами перехідних металів та застосування їх в аналізі: дис. канд. хім. наук : 02.00.02 – аналіт / Тупис Андрій Миколайович – Львів, 2017. – 227 с.

ДОСЛІДЖЕННЯ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧНОЇ ПОВЕДІНКИ АЗОРУБІНУ НА ТВЕРДОМУ АМАЛЬГАМНОМУ ЕЛЕКТРОДІ, МОДИФІКОВАНОМУ РТУТНИМ МЕНІСКОМ

Дмухайло А. В., Дубенська Л. О.

Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Кирила і Мефодія, 6,
79005 Львів, Україна
Andrii.Dmukhailo@lnu.edu.ua

Сьогодні синтетичні харчові барвники (СХБ) майже повністю витіснили натуральні за рахунок низки своїх переваг. Одним із широко використовуваних СХБ є азобарвник червоного кольору – азорубін (кармазин, E122). Його дедалі частіше використовують разом з тартразином, амарантом, понсо 4R та іншими барвниками для забарвлення різноманітних харчових продуктів, напоїв, косметичних засобів, оболонок лікарських препаратів, засобів побутової хімії. Попри таку популярність азорубіну існує низка дослідження про його негативний вплив на організм людей. Зважаючи на це існує необхідність в розробленні чутливих, експресних, простих та дешевих методик його визначення як за індивідуальної наявності так і в сумішах з іншими СХБ. Всі ці вимоги задовольняє метод вольтамперометрії. Азорубін містить у своїй структурі азогрупу (-N=N-), що робить його придатним для катодного вольтамперометричного визначення на основі її електрохімічного відновлення.

Цю роботу присвячено розробці ефективного вольтамперометричного методу визначення азорубіну у харчових продуктах. Вперше досліджено вольтамперометричну поведінку цього азобарвника на твердому амальгамному електроді модифікованому ртутним меніском (m-AgSAE) методом вольтамперометрії із швидкою розгорткою потенціалу.

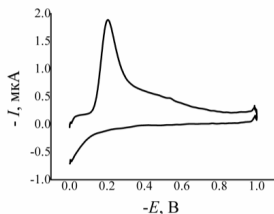


Рис. 1. Вигляд вольтамперограми відновлення азорубіну на m-AgSAE. Умови: $C = 4 \cdot 10^{-5}$ М, рН= 3.0, $V = 1$ В/с, $t_{acc} = 30$ с, $E_{acc} = -25$ мВ

На вольтамперограмах відновлення азорубіну простежується один пік у катодній ділянці, в анодній ділянці піки відсутні, що свідчить про необоротність процесу (Рис. 1). Азорубін легко відновлюється на m-AgSAE в широких межах рН 1–10, яке забезпечували універсальним буферним розчином. Найбільший струм досягається у кислому середовищі тому для подальших досліджень ми обрали рН 3.0. Потенціали піків відновлення зміщуються в негативний бік із збільшенням рН. Така поведінка показує, що електрохімічне відновлення азорубіну включає стадію перенесення протонів.

Для з'ясування природи струмів відновлення азорубіну досліджували залежність струму від значення швидкості напруги поляризації. Швидкість розгортки змінювали від 0.3 до 5.0 В/с. Із збільшенням швидкості накладання напруги поляризації, висота піків збільшується, а потенціал зсувається в катодний бік. На залежності логарифму струму від логарифму швидкості сканування простежуємо дві лінійні ділянки в межах 0.3–1.4 В/с та 1.4–5.0 В/с. Тангенс кута нахилу для цих ділянок становить: для першої – 0.36, свідчить про дифузійний струм з кінетичними утрудненнями та 0.78 другої ділянки відповідно, що вказує про адсорбційну природу струму.

Для з'ясування механізму електрохімічного відновлення азорубіну було обчислено кількість протонів та електронів, які беруть участь в електрохімічній реакції. Обчислені нами значення вказують на одностадійний двоелектронний та двопротонний процес відновлення барвника.

POLAROGRAPHIC DETERMINATION OF NICOTINE, IN THE FORM OF N-OXIDE, IN SPRAY «NICORETTE»

Dushna O. M., Dubenska L. O.

Department of Analytical Chemistry, Ivan Franko National University of Lviv, Lviv, Ukraine
olha.dushna@lnu.edu.ua

Nicotine (3-(2S)-1-methylpyrrolidin-2-yl)-pyridine) – one of the representative of the alkaloids of the pyridine series. It is contained in the leaves and stems of tobacco and other members of the nightshade family of plants and in cigarettes, cigars and refills for electronic cigarettes. Nicotine acts on the central nervous system, makes a person feel more relaxed. This effect is one of the features desired by smokers, which leads to their regular use of tobacco products containing nicotine. As a substance, nicotine is toxic and causes paralysis of the nervous system. Prolonged use of nicotine leads to hyperglycemia, hypertension, tachycardia, heart failure and myocardial infarction. It should be noted that nicotine as a substance does not cause cancer, but accelerates the growth and migration of existing cancer cells and promotes the transformation of some precancerous cells into cancer.

In the human body, nicotine is converted into metabolites. The main metabolites of nicotine are cotinine and nicotine N-oxide. Therefore, the development of methods for the determination of the alkaloid – nicotine in the form of its metabolite is actual. Previously we have reported the work on voltammetric determination of alkaloid – nefopam based on the obtaining of polarographically active derivatives – N-oxide [1]. We used the same approach for nicotine.

We have developed a technique based on two reactions: chemical – obtaining N-nicotine oxide using potassium peroxymonosulfate (KPMS) (Fig. 1.) and electrochemical – reduction of N-nicotine oxide on DME. We investigated the effect of various factors on the quantitative yield of N-oxide (pH, time and temperature of oxidation, reagent concentration), on the reduction of N-oxide in DME.

We have found that the highest yield of nicotine N-oxide at oxidation pH is pH = 9.3 in Britton-Robinson buffer solution (BR) at a temperature of 40 °C for 10 minute and it was desirable that the concentration of KPMS did not exceed 10^{-4} L·mol⁻¹, because higher KPMS concentrations lead to amplification and fluctuations of the background current. The shape of polarograms, current and nicotine reduction potential depend on the pH of the solution. Peak potentials were shifted in the negative direction with increasing pH. The highest current of reduction of N-oxide of nicotine was reached at pH 4.5, so for further research we chose pH 4.5.

Under these conditions, analytical parameters were determined. Linear the dependence of the reduction current of nicotine N-oxide on the concentration obtained in the range from $2 \cdot 10^{-6}$ L·mol⁻¹ up to $4.0 \cdot 10^{-5}$ L·mol⁻¹. The detection limit is $1.4 \cdot 10^{-6}$ L·mol⁻¹, the quantitative limit is $4.2 \cdot 10^{-6}$ L·mol⁻¹ and the correlation coefficient is 0.9979. The developed method was applied for the analysis of commercial drug oral spray "Nicorette" with recovery of 101.5 %.

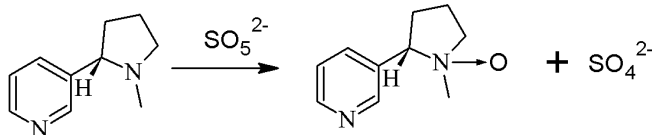


Fig. 1. Equation of the reaction of obtaining nicotine N-oxide by potassium peroxymonosulfate

1. Dubenska L., Dushna O., Pysarevska S., Blazheyevskiy M. A new approach for voltammetric determination of nefopam and its metabolite. *Electroanalysis*. 2020. Vol. 32, No 3. P. 626–634. DOI: <https://doi.org/10.1002/elan.201900595>

VOLTAMMETRIC DETERMINATION OF COCCIDIOSTAT ROBENIDINE IN ANIMAL FEED

Ivakh S.^{1,2}, Dubenska L.¹, Rydchuk M.², Plotycya S.²

¹Department of Analytical Chemistry, Ivan Franko National University of Lviv, Lviv, Ukraine

²National Reference Laboratory of Veterinary Drug Residues Control, State Scientific Research Control Institute of Veterinary Medicinal Products and Feed Additives, Lviv, Ukraine
Sofii.Ivakh@lnu.edu.ua

Coccidiostats (COCs) are widely used in veterinary medicine for the prevention and treatment of coccidiosis, especially in poultry. Coccidiosis is common protozoal disease, causing intestinal lesions, scarce weight gain, poor feed conversion and poor egg production; in its acute form, coccidiosis causes high mortality rates and results in serious economical losses in animal production. Therefore, much attention is paid to the prevention of this illness.

COCs are authorised as feed additives, according to the Regulation (EC) No 1831/2003. Feed contamination is a source of COCs residues in poultry products. Such transfer from target to non-target feed happens during the production of feed, but also during its transport and storage as well as on a farm. As a result, it can potentially cause toxic effects in non-target animals and can result in undesirable levels of COCs residues in food of animal origin. Therefore, the level of COCs in feed should be particularly monitored. With regard to robenidine (ROB) as one of COCs representatives, the Regulation (EC) No 2020/148 have authorised the use of feed with its level of 30–36 mg/kg.

The purpose of our study was to develop a method of ROB voltammetric determination in animal feed. We investigated the voltammetric behavior of ROB on a static mercury drop electrode (SMDE) and a silver solid amalgam electrode (p-AgSAE) [1]. The reduction of ROB on SMDE and p-AgSAE results in an occurrence of one cathodic peak at the potentials ca. -0.85 V and -0.94 V, respectively. The influence of supporting electrolyte, extractants, pH of the media, accumulation parameters, and scan rate were investigated.

In the study we used feed samples free from ROB (according to preliminary LC-MS/MS analysis) provided by National Reference Laboratory of Veterinary Drug Residues Control. The sample preparation procedure was as follows: different accurate amounts of ROB standard powder were added into the samples of feed depending on sample weight. Then these samples were stirred for 10 h on a vortex type mixing device. Afterwards, samples were stored in dark place at 4 °C for a week. After proper procedure of sample preparation, the final solutions were transferred by measuring pipette into an electrolytic cell. The LOQ of the methods of ROB determination in feed are 9.5 mg/kg and 2.5 mg/kg on SMDE and p-AgSAE, respectively. The accuracy was verified by the “added-found” method. The results are presented in Table 1.

Table 1. The results of ROB determination in feed (“added-found” method)

Added ROB, mg/kg	Found ROB, mg/kg		Recovery, %	
	On SMDE, <i>n</i> =5, <i>P</i> =0.95	On p-AgSAE, <i>n</i> =3, <i>P</i> =0.95	On SMDE	On p-AgSAE
17.5	19.7±0.8	–	112.57	–
18.9	18.7±0.5	–	98.94	–
19.6	19.8±0.4	19.7±0.3	101.02	100.51
40.5	40.5±0.3	40.45±0.21	100.00	99.88

Using our new voltammetric method, it is possible to accurately determine robenidine in feed in a wide content range (for large contents, the reliability of the determination is higher). The developed approach fully complies with the requirements of the Regulation (EC) No 2020/148.

[1] Ivakh S., Dubenska L., Rydchuk M., and Plotycya S. (2021). Voltammetric behavior and reliable method for the determination of coccidiostat robenidine in animal feed and poultry meat. *Electroanalysis*, 33(1), 256-267. <https://doi.org/10.1002/elan.202060225>

**ПРО ВИЗНАЧЕННЯ ВМІСТУ МАГНІЮ І ЦИНКУ В СКЛАДІ
ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ ГІДРАТОВАНИХ ДИФОСФАТІВ***Коречко С. А., Антрапцева Н. М., Бегаль М. М.*Національний університет біоресурсів і природокористування України, Київ, Україна
aspirant_nubiru@ukr.net

Питання аналітичного контролю вмісту катіонів двовалентних металів у разі їх спільної присутності в матеріалах різного призначення завжди були актуальними. Одночасна присутність в їх складі двох катіонів з близькими характеристиками робить кількісний аналіз досить складним процесом. Визначення складу ще більш ускладнюється, якщо об'єктом аналізу є твердий розчин, в якому поряд з парою катіонів присутній дифосфатний аніон. Аналіз таких сполук вимагає індивідуального підходу до відпрацювання методики стосовно кожної конкретної пари катіонів.

В літературі дослідження про вплив дифосфат-йонів на результати визначення вмісту магнію і цинку методом комплексонометричного титрування не описані.

В якості об'єктів дослідження використовували штучно виготовлені суміші розчинів з відомою концентрацією катіонів. Для приготування еталонних сумішей використовували розчини сульфатів магнію $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ (16,38 % MgO), цинку $\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ (28,31 % ZnO) кваліфікації “ч.д.а.”, стандартний 0,1н. розчин $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$. Дифосфат-йон вводили у вигляді розчину натрій дифосфату $\text{Na}_4\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 10 \text{H}_2\text{O}$ (31,83 % P_2O_5) кваліфікації “ч.д.а.”. Вміст $\text{P}_2\text{O}_7^{4-}$ в аликвоті розчину, що аналізується, змінювали в межах 0,5–28,4 мг (у перерахунку на P_2O_5). Вміст катіонів відповідав їх теоретично розрахованому вмісту в твердих розчинах дифосфатів різного складу.

Результати визначення вмісту Mg^{2+} в еталонних розчинах, що імітують тверді розчини дифосфатів магнію-цинку, методом прямого титрування 0,01 н розчином ЕДТА (при рН 10 в присутності індикатора еріохром чорний Т) показали, що магній можна визначити прямим титруванням у присутності дифосфат-йону, якщо його вміст в аликвоті розчину, що аналізується, не перевищує 3 мг (у перерахунку на P_2O_5). Збільшення концентрації дифосфат-йону призводить до завищених результатів визначення вмісту Mg^{2+} . У разі визначення магнію методом зворотнього титрування (титрант – розчин цинк сульфату, індикатор – еріохром чорний Т при рН 10), коректні результати можливі, якщо вміст $\text{P}_2\text{O}_7^{4-}$ (у перерахунку на P_2O_5) в аликвоті розчину, не перевищує 4 мг.

Для встановлення впливу дифосфат-йону на результати комплексонометричного визначення цинку у складі твердих розчинів дифосфатів магнію-цинку також було проведено дві серії дослідів. Цинк визначали прямим і зворотнім титруванням в присутності різної концентрації аніону $\text{P}_2\text{O}_7^{4-}$. Результати аналізів показали, що збільшення концентрації дифосфат-йону в аликвоті розчину з 0,5 до 28,4 мг (у перерахунку на P_2O_5) не заважає визначенню цинку. комплексонометричним титруванням прямим або зворотнім методами.

Вивчення можливості усунення впливу аніону $\text{P}_2\text{O}_7^{4-}$ на результати комплексонометричного визначення вмісту магнію і цинку в складі твердих розчинів дифосфатів проводили в окремій серії дослідів, використовуючи метод йонного обміну. Для заміни $\text{P}_2\text{O}_7^{4-}$ на Cl^- -йон, який не заважає виконанню аналізу, штучно виготовлені розчини з різною концентрацією йонів $\text{P}_2\text{O}_7^{4-}$, Mg^{2+} і Zn^{2+} пропускали через колонку з аніонітом в Cl^- формі (аніоніт ЕДЕ –10П).

Результати комплексонометричних визначень показали, що попередня заміна $\text{P}_2\text{O}_7^{4-}$ на Cl^- -йон дозволяє використовувати метод прямого і зворотнього титрування для визначення вмісту катіонів Mg^{2+} і Zn^{2+} у твердих розчинах дифосфатів, що містять значні концентрації $\text{P}_2\text{O}_7^{4-}$ (до 85,17 мг в перерахунку на P_2O_5).

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ ГОЛЬМІЮ У NiIn

Малецька Ю. В.

Кафедра аналітичної хімії, Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Кирила і Мефодія 6, 79005 Львів, Україна
Yuliia.Maletska@lnu.edu.ua

Систематичне дослідження взаємодії компонентів у системі Ho-Ni-In призвело до виявлення низки тернарних сполук та твердих розчинів [1]. За результатами рентгенівського фазового аналізу потрійних сплавів в області близькій до сполуки NiIn (стр. тип CoSn, пр. гр. *P6/mmm*, $Z=3$, $a=5,2446$ $c=4,3518$ Å, $V=103,66$ Å³) [2] встановлено зміщення дифракційних піків останньої в бік зменшення кутів, що вказує на утворення твердого розчину. Дане дослідження присвячене встановленню його меж, кристалічної структури, а відтак і його природи.

Полікристалічні зразки масою ~1 г складу Ho₄Ni₄₈In₄₈ та Ho₈Ni₄₆In₄₆ виготовлено шляхом електродугового сплавлення шихти вихідних компонентів у атмосфері аргону. Сплави відпалено у вакуумованій кварцовій ампулі при температурі 870 К випроводж 60 діб і загартовано у холодну воду разом з ампулою.

Фазовий аналіз та уточнення кристалічної структури сполук виконано за допомогою програми FullProf [3] на основі порошкових рентгенограм (дифрактометр STOE STADI P, CuK_{α1}-випромінювання, геометрія на пропускання, інтервал $6 \leq 2\theta \leq 110^\circ$, крок 0.015°, 250 с/крок).

За результатами рентгенофазового аналізу зразків виявлено, що вони містять основну фазу ізоструктурну до NiIn та домішкову фазу HoNi₄In. Результати уточнення кристалічної структури: для сплаву Ho₄Ni₄₈In₄₈ уточнений склад Ho_{0,04}Ni_{100,93}, $a=5,24478(3)$, $c=4,35776(5)$ Å, $V=103,810(2)$ Å³, $\rho=8,499$ г/см³, Ho (2e) 00z ($z=0,388(4)$), $B=0,33(8)$, $G=0,06(2)$, Ni (3f) 1/200, $B=1,44(7)$, $G=1$, In1 (2d) 1/32/31/2, $B=0,93(5)$, $G=1$, In2 (1a) 000, $B=0,33(8)$, $G=0,72(2)$, In3 (2e) 00z ($z=0,852(4)$), $B=0,33(8)$, $G=0,10(2)$, $R_p=8,56$ %, $R_{wp}=11,4$ %; для сплаву Ho₈Ni₄₆In₄₆ уточнений склад Ho_{0,12}Ni_{100,94}, $a=5,2746(1)$, $c=4,3723(2)$ Å, $V=105,345(4)$ Å³, $\rho=8,795$ г/см³, Ho (2e) 00z ($z=0,362(1)$), $B=0,6(2)$, $G=0,18(1)$, Ni (3f) 1/200, $B=0,4(2)$, $G=1$, In1 (2d) 1/32/31/2, $B=0,2(1)$, $G=1$, In2 (1a) 000, $B=0,6(2)$, $G=0,46(2)$, In3 (2e) 00z ($z=0,87(4)$), $B=0,6(2)$, $G=0,18(1)$, $R_p=12,0$ %, $R_{wp}=15,7$ %.

Включення атомів Гольмію призводить до збільшення об'єму комірки на 1,66 %. При утворенні цього твердого розчину має місце вилучення атомів індію із положення 1a 000, яке стає дефектним з одночасним переміщенням їх частини в положення 2e 00z (атоми In3). У це ж положення включаються також атоми гольмію, тобто за своєю природою це твердий розчин віднімання-включення. Якщо у бінарній сполуці NiIn у гексагональних каналах вздовж напрямку 00Z знаходяться тільки атоми In2, то у твердому розчині додатково атоми In3 та Ho. Гранична розчинність становить біля 6 ат. %.

[1] Ya.M. Kalychak, V.I. Zaremba, R. Pöttgen et al. Rare Earth – Transition Metal – Intermetallics – Synthesis, Phase Relations, Crystal Chemistry, Chemical Bonding and Physical Properties. In Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths. – 2005. – Vol. 34, Ch. 218. – P. 1–133.

[2] Okamoto H. In-Ni (Indium–Nickel). J. Phase Equilibria. –1999. –V.20, №5. – P. 540.

[3] J. Rodriguez–Carvajal, Commission on Powder Diffraction (IUCr) Newsletter 26 (2001) P. 12–19.

КОМПЛЕКСОУТВОРЕННЯ ТА ЕКСТРАКЦІЯ ЛАНТАНОЇДІВ
З КРАУН-ЕТЕРАМИКроніковський О.¹, Мисюк О.¹, Стаднічук Н.²¹Національний університет харчових технологій, Київ, Україна²ДП «Науковий центр превентивної токсикології, харчової та хімічної безпеки імені академіка Л. І. Медведя Міністерства охорони здоров'я України», Київ, Україна
oleg.kronikovsky@gmail.com

Необхідно відзначити, що для рідкісноземельних елементів неможливо побудувати такі ряди вибірковості, які відомі для екстракційних систем краун-етер – катіон лужного або лужно-земельного металу. В випадку лантаноїдів ряд вибірковості залежить не лише від будови краун-етера, а й від природи розчинника та протийона. Так найкраща екстракція хлороформом пікратів рідкісноземельних елементів спостерігалась для Pr і Nd для 15-краун-5, 18-краун-6 і дибензо-18-краун-6, в той же час як у хлористому метилени спостерігалась висока екстракція пікрату Sm для бензо-краун-етерів і La – для дициклогексил-18-краун-6. При екстракції нітратів РЗЕ бенzenом в присутності 18-краун-6 і дициклогексил-18-краун-6 залежність коефіцієнтів розподілу відповідних комплексів від атомного номера РЗ-йонів має два максимуми – для Ce – Nd і для Gd – Dy, а при вилученні трихлорацетатів лантаноїдів 1,2-дихлоретаном спостерігається монотонне зниження коефіцієнтів розподілу зі збільшенням атомного номера.

Нам виявилось цікавим отримати дані про склад та константи екстракції трихлорацетатів лантаноїдів в присутності краун-етерів. В якості розчинника нами був вибраний хлороформ, для якого отримані значення констант екстракції для значної кількості трихлорацетатних комплексів.

Тризарядні катіони Лантану, Церію, Празеодиму і Неодиму в присутності краун-етерів 18-краун-6, 15-краун-5 і дициклогексил-18-краун-6 та трихлорацетату літію в різній мірі екстрагуються хлороформом. Склад екстрагованих комплексів визначено методом зміщення рівноваги. Комплекси містять одну молекулу краун-етеру та три трихлорацетат-йони. Таким чином, процес екстракції можна відобразити слідуючим рівнянням: $M^{3+}_{(в.)} + 3 CCl_3COO_{(в.)} + L_{(орг.)} \leftrightarrow ML(CCl_3COO)_{3(орг.)}$. Виходячи із даних методу зміщення рівноваги, нами розраховані концентраційні константи екстракції комплексів РЗЕ з краун-етерами та трихлорацетат-йонем. При розрахунках враховували, що введення в водну фазу трихлорацетату літію веде до зниження коефіцієнта розподілу краун-етера між хлороформом та водою в відповідності рівнянню Сеченова $lgD/P_o = k$ (для 18-краун-6 $k = -0,75$). Стійкість бінарних комплексів РЗЕ з 18-краун-6 в воді незначна, тому утворенням їх в умовах нашого експеримента можна знехтувати. Асоціація трихлороцтової кислоти з краун-етерами при $pH > 3$ також незначна. Вплив йонної сили на активність йонів РЗЕ та трихлорацетат-йонів враховували з допомогою рівняння Девіс.

Отримані значення K_{ex} свідчать, що екстракційна здатність в трихлорацетатній системі знижується в ряду 18-краун-6 > дициклогексил-18-краун-6 >> дибензо-18-краун-6 для 18-членних макроциклів. Не вважаючи на те, що за радіусом йони Ln^{3+} , ближчі до 15-краун-5, ніж до 18-краун-6, однак екстракція 15-членними макроциклами значно менш ефективна. Звертає на себе увагу відмінність складу і констант екстракції трихлорацетатних і пікратних комплексів РЗЕ з 18-краун-6. Причиною цього може бути суттєво інша сольватація трихлорацетат-йона в хлороформі. В випадку РЗЕ вплив розчинника та протийона на екстракцію навіть більший, ніж розмір порожнини краун-етера.

IN-VESSEL HEADSPACE LIQUID PHASE MICROEXTRACTION COUPLED TO SPECTROPHOTOMETRY FOR IODATE DETERMINATION*Tamen A.-E.*, Vishnikin A. B.

Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemistry, Oles Honchar Dnipro National University, Gagarina 72, UA-49010, Dnipro, Ukraine
aetamen@yahoo.com

HS mode of LPME [Theis 2001] stands out clearly from other LPME methods. This approach allows the analyte to be easily and completely separated from complex matrices. In the HS mode of LPME, phase separation and following transfer to the instrument are greatly simplified. Unlike the other types of LPME, both water-immiscible and water-miscible solvents can be used to extract the analyte from the donor phase. Application of HS-SDME is limited to volatile or semi-volatile analytes. The most common approach in the HS-LPME is to use a microsyringe as a holder of microdrop. During the analysis.

HS-SDME is currently incompatible with most cuvettes and instruments used in spectrophotometry due to the very small volume of the extracting phase. The most common approach is to use micro-volume UV-vis spectrophotometers [Andruch 2012]. In this case, 1–2 μL of the extract is sufficient to measure the absorbance. The disadvantages of cuvetteless spectrophotometry are the short optical path of ~ 1 mm, fewer solvents, since they must have a suitable viscosity and volatility, and the high cost of the device.

In the present study, a new free space ME technique called intravascular liquid phase microextraction ((IV-HS-LPME)) was developed. The principal feature of this approach is that the acceptor phase is held in a homemade reactor, fixed in a free space above the analyzed solution in a closed vessel. The proposed approach is fully compatible with conventional microcuvettes and instruments used in spectrophotometry. The potential of the method was assessed by determining iodate by converting it to volatile iodine, then absorbing it with 1 % potassium iodide and finally measuring the absorption of the triiodide complex in a microcuvette.

To 15 mL clear or amber glass pharmacy vial add 5,5 mL of aqueous solution containing iodate (as IO_3^-) and 2.5 mL of 1M of sodium sulfate solution, After injecting 2 mL of 25 % sulfuric acid, a 50 μL of KI 1 % is exposed to the headspace of the sample and stirred at 1200 rpm for 25 min. and finally measuring the absorbance of the triiodide complex in a microcuvette. The calibration graph is linear in the range from 8.75 to 175 $\mu\text{g L}^{-1}$ (as IO_3^-) with a detection limit of 4.5 $\mu\text{g L}^{-1}$. The developed method has a high precision comparable to conventional spectrophotometric methods (0.6–1.5 %). The extraction efficiency is comparable to other previously proposed approaches. the sensitivity and efficiency of the extraction is comparable with other earlier proposed approaches. The simple theoretical model was used to calculate the constants for the equilibria between donor and gas phase and gas and acceptor phase, respectively. For the volumes of acceptor phase less than 100 μL , the experimentally obtained efficiency of extraction was significantly higher than that calculated using the found distribution constants.

In the iodate determination, in comparison with cuvetteless SP the proposed method mode uses bigger volume of acceptor phase and consequently lower preconcentration factor. Nevertheless, this is compensated by greater path length and better reproducibility. The bigger volume and surface area of the acceptor phase also assist in the increase of the sensitivity and efficiency of the determination. It was shown that efficiency of extraction of iodine is not influenced by the matrix components of such analytical samples as mineral water, sea water and table salt.

ФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ НІКЕЛЮ(II) З ВИКОРИСТАННЯМ 5-(2-ГІДРОКСИ-НАФТАЛЕН-1-ІЛАЗО)-2-МЕТИЛ-3Н-ПІРАЗОЛ- 4-ЕТИЛКАРБОКСИЛАТУ

Уколова М. В., Гавронська М. О., Білогубка В. М., Кулинич А. І., Ридчук П. В.

Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів, Україна
marina.havronska@lnu.edu.ua

Нікель характеризується унікальними властивостями: як біогенний мікроелемент, він є необхідним для нормального розвитку живих організмів, проте, водночас, сполукам нікелю притаманний токсичний вплив та канцерогенність. Оскільки межа між користю та шкодою сполук нікелю є доволі незначною, то розробка чутливих та експресних методик його аналітичного контролю в різноманітних об'єктах довкілля залишається одним з актуальних завдань аналітичної хімії. Найбільш зручним для вирішення цього завдання є фотометричний метод аналізу, якому властива висока експресність визначення та відносна доступність і простота апаратурного забезпечення, а використання нових чутливих органічних аналітичних реагентів дає можливість додатково покращити хіміко-аналітичні характеристики фотометричного визначення.

Як новий органічний реагент для фотометричного визначення нікелю досліджений 3-(2-гідрокси-нафтален-1-іл-азо)-1-метил-1Н-піразол-4-етилкарбоксилат (КЕМПАН). Введення карбоксиетильного замісника в піразольний гетероцикл сприяло значному покращенню контрастності реакції: різниця в максимумах світлопоглинання реагента та комплексу зросла на 20 нм. Натомість наявність цього замісника практично не повпливала на максимальний вихід забарвленої сполуки, який, як і для незаміщеного реагента, простежується в інтервалі рН 7,0 – 10,0 [1]. Характерним для взаємодії нікелю з КЕМПАН також залишилось ступінчасте комплексоутворення, при цьому максимальне співвідношення метал : ліганд зросло до 1 : 3, що може поставити під сумнів типове для таких сполук координування гідроксогрупою нафтолу та азогрупою. На основі проведених досліджень розроблено методику фотометричного визначення Ni(II) у вигляді комплексної сполуки з КЕМПАН (табл. 1). Запропонована методика є експресною та простою у виконанні, характеризується хорошою чутливістю визначення та інтервалом лінійності аналітичного сигналу в межах одного концентраційного порядку.

Таблиця 1. Метрологічні характеристики спектрофотометричного визначення Ni(II) з використанням КЕМПАН ($C_{NiL} = 1,0 \cdot 10^{-4}$ М, $l = 3,0$ см, $\mu = 0,4$ М, $\lambda_{max} = 600$ нм, рН = 8,0)

Рівняння графіка	$\Delta A = -0,04 + 0,11 \cdot 10^5 C_{Ni(II)}$
Межа виявлення, моль/л	$5,8 \cdot 10^{-7}$
Діапазон лінійності аналітичного сигналу, моль/л	$(0,8 - 5,0) \cdot 10^{-5}$
Коефіцієнт кореляції R	0,9999

Методика фотометричного визначення нікелю(II) з використанням КЕМПАН є достатньо селективною щодо іонів супутніх металів, за винятком Pd(II), Cu(II) та Co(II), для яких взаємодія з КЕМПАН є більш специфічною.

[1]. Марчишин М.М. 1-(1-метил-1Н-піразол-3-іл-азо)-нафтален-2-ол – новий перспективний реагент для спектрофотометричного визначення нікелю / М.М. Марчишин, Л.М. Шевчук, Н.А. Саїк, Х.М. Шкумбатюк, П.В. Ридчук // Хімічні проблеми сьогодення (ХПС-2020): зб. тез доповідей III Міжнародної (XIII Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених (25–27 березня 2020 р.), м. Вінниця, 2020. – С. 14.

**HIGHLY SENSITIVE SIMULTANEOUS SPECTROPHOTOMETRIC
DETERMINATION OF PHOSPHATE AND SILICATE BASED ON FORMATION
OF ION ASSOCIATION COMPLEXES BETWEEN ASTRA PHLOXINE AND
12-HETEROPOLYMOLYBDATE ANIONS**

Hedjazi M., Vishnikin A. B.

Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemistry, Oles Honchar Dnipro National University, Gagarina 72, ua-49010, Dnipro, Ukraine
hedjazi.mehieddine@gmail.com

Nowadays the highly sensitive determination of phosphate and silicate ions is necessary for the analysis of high purity chemicals and water, including water used as cooling water in thermal and nuclear power plants. According to the standards, their concentration should be less than 10^{-7} mol L⁻¹.

The most serious problem in the analytical chemistry of heteropoly molybdate is the mutual interfere in the determination of phosphorus (V), silicon (IV), arsenic (V), and germanium (IV). To avoid these interferences in applying spectrophotometric methods there is a need to develop a method that can determine one element by the elimination of the interference of other elements.

In the present study, a green, rapid, highly sensitive, selective, and non-extractive spectrophotometric method has been developed for individual and simultaneous determination of trace amounts of phosphate and silicate in aquatic samples and high purity chemicals. These methods are based on the formation of ion association complexes (IA) between 12- heteropoly molybdate of the indicated elements with polymethine dye Astra Phloxine FF (AP) to form a red-violet color-specific IA, Which has the maximum absorption in the difference spectrum at 574 nm. Ion associates formed between heteropolyanions (HPAs) and cationic dyes are stable for several hours. There is no need to use surfactant for the solubilization of the finely dispersed precipitate. The molar absorptivities of corresponding IAs are 1.54×10^5 and 2×10^5 L mol⁻¹ cm⁻¹ for P(V) and Si(IV), respectively. The calibration curves were linear over a concentration range of 4×10^{-8} – 8×10^{-7} and 2×10^{-8} – 8×10^{-7} mol L⁻¹ for phosphate and silicate, respectively. The corresponding limits of detection were calculated to be as low as 7 nmol L⁻¹ for both phosphate and silicate.

The interfering effect of Si(IV) on P(V) determination and vice versa can be minimized using a specific order of acidification or by applying masking agents. Silicate requires lower acidity than phosphate to form heteropoly acids but has greater stability and is not destructed even in 1 M H₂SO₄. The optimal concentration of acid used in this work for the reaction with phosphate was unsuitable for the formation of complexes with silicate. This allowed determining orthophosphate in presence of up to 20-fold excess of silicate without masking. Using masking with 6×10^{-3} mol L⁻¹ of NaF the permissible concentration of silicate ions was increased to 10^{-3} M (more than 1000-fold excess). The interference of phosphate in the determination of silicate was avoided by adding a 2×10^{-3} mol L⁻¹ of an oxalic acid solution or 2 mL of concentrated hydrochloric acid to destroy the molybdophosphoric acid complex. In the first case, permissible phosphate concentration was equal to 5×10^4 mol L⁻¹.

The proposed method was successfully applied to the simultaneous determination of phosphorus and silicon in steels immediately after dissolution, in distilled and bidistilled water, in hydrochloric and nitric acids, in samples of natural waters, and salts.

The content of P(V) and Si(IV) in distilled water was equal to 5.65 and 9 μg L⁻¹, respectively. Sodium chloride of «chemically pure» quality contained 1.047×10^{-5} % of Si(IV) and 6.28×10^{-6} % of P(V).

ВИКОРИСТАННЯ 1-(1-МЕТИЛ-1Н-ПІРАЗОЛ-3-ІЛ-АЗО)-НАФТАЛЕН-2-ОЛУ ДЛЯ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ МІКРОКЛЬКОСТЕЙ Cu(II)

Шевчук Л. М., Марчишин М. М., Шкумбатюк Х. М., Саїк Н. А., Ридчук П. В.
Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів, Україна
liubomyr99@gmail.com

Хоча купрум є необхідним біогенним мікроелементом, проте широке та інтенсивне застосування сполук Cu(II) у с/г може спричинити надлишковий вміст Cu(II) в продуктах харчування, що може призвести до цілого ряду захворювань. Тому аналітичний контроль вмісту Cu(II) в об'єктах довкілля залишається важливим завданням аналітичної хімії.

Завдяки таким перевагам, як достатньо висока чутливість визначення та експресність аналізу в поєднанні з економічною доступністю обладнання та простотою його обслуговування, спектрофотометричні методи аналізу продовжують займати основну частку серед поширених методів аналітичного контролю купруму в об'єктах із складною матрицею. Пошук нових аналітичних реагентів з високими значеннями молярних коефіцієнтів дає змогу значно покращити можливості спектрофотометричного методу аналізу. Перспективними аналітичними реагентами для спектрофотометричного визначення Cu(II) є азореагенти, що містять піразольний гетероцикл. Це зумовлено як високою стійкістю утворених комплексів, так і високими значеннями їх молярних коефіцієнтів світлопоглинання. Досліджено взаємодію іонів Cu(II) з одним з представників піразолілазореагентів – 1-(1-метил-1Н-піразол-3-іл-азо)-нафтален-2-олом (МПАН). Встановлено, що взаємодія Cu(II) утворює з МПАН простежується в широкому інтервалі кислотності середовища: від рН 1,0 до рН 10,0, при цьому максимальний вихід забарвленої сполуки простежується в інтервалі рН 3,0–8,0 (рис. 1); реакція характеризується високою контрастністю ($\Delta\lambda_{\max} = 100$ нм). Методом ізомолярних серій розчинів (рис. 2) встановлено, що Cu(II) утворює з МПАН комплекси складу 1:1. На основі проведених досліджень розроблено чутливу ($LOD = 29$ нг/мл) методику спектрофотометричного визначення Cu(II) з широким інтервалом лінійності аналітичного сигналу: 0,026–1,3 мкг/мл.

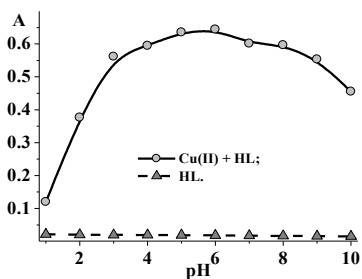


Рис. 1. Залежність оптичної густини комплексів Cu(II) з МПАН від рН розчину ($C_{Me} = 8,0 \cdot 10^{-5}$ М, $C_{HL} = 4,0 \cdot 10^{-5}$ М, $l = 1,0$ см, $\mu = 0,4$ М, $\lambda_{\max} = 548$ нм)

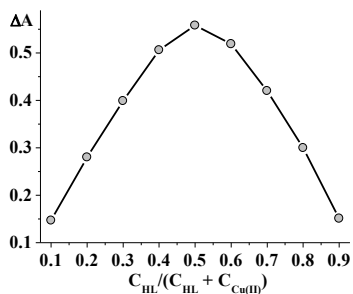


Рис. 2. Ізомолярна серія розчинів комплексів МПАН з Cu(II) ($C_{\Sigma} = 4,0 \cdot 10^{-5}$ М, $l = 2,0$ см, $\mu = 0,4$ М, $\lambda_{\max} = 548$ нм, рН = 5,0)

Спектрофотометричному визначенню Cu(II) не заважають значні концентраційні надлишки іонів супутніх металів, за винятком Pd(II). Розроблено спектрофотометричну методику апробовано під час аналізу стандартних зразків алюмінієвих сплавів (тип сплаву АК15МН, комплект А189), похибка визначення не перевищує допустимі похибки методу, $S_r = 4,5\text{--}5,0$ %.

**BIOCHEMISTRY /
БІОХІМІЯ**

БИОТЕСТИРОВАНИЕ ДРЕВЕСНОЙ ЗОЛЫ, КАК ОТХОДА ПРОИЗВОДСТВА И ПОТРЕБЛЕНИЯ

Бельская Т. Г., Шибек Л. А.

Учреждение образования «Белорусский государственный технологический университет», Минск, Республика Беларусь
Shibekal@mail.ru

Древесная зола является отходом, образующимся при сжигании дров, ветвей, древесных опилок, щепы, древесной пыли и других видов древесных материалов. Этот отход образуется в печах домашних хозяйств и котельных установках, относящихся к объектам жилищно-коммунального хозяйства и промышленным предприятиям. С учетом роста вовлечения в хозяйственный оборот местных видов топлива, в том числе отходов древесины, закономерно увеличивается количество древесной золы.

Образующаяся древесная зола, как правило, относится к категории неиспользуемых видов отходов. Вместе с тем, издавна известно, применение золы в качестве удобрения для земельных угодий. Это обусловлено наличием в составе золы ряда элементов: калия, азота, фосфора, кальция, магния, серы и др., которые могут использоваться для развития и роста растений, а также для создания благоприятных условий в почвенной среде.

Ограничение внесения древесной золы в почву могут быть связаны с присутствием в составе данного вида отхода токсичных элементов, например, тяжелых металлов.

Цель работы заключалась в определении фитотоксических свойств древесной золы по отношению к семенам ржи посевной и горчицы белой.

Биотестирование проводили с использованием древесной золы, образовавшейся на промышленном объекте, производящем сжигание собственных древесных отходов в котельной установке. В качестве тест-объектов использовали семена двух культур: ржи посевной (*Secale cereale* L.) и горчицы белой (*Sinapis alba* L.).

Водную вытяжку, полученную из древесной золы, разбавляли в объемных соотношениях вытяжка:дистиллированная вода, равных 1:1, 1:3, 1:5, 1:8 и 1:10. Полученные растворы использовали в качестве среды для проращивания семян тест-объектов. По длине проростков семян в опытных пробах и контрольной (на дистиллированной воде) оценивали величину фитотоксического эффекта.

Установлено, что величины эффекта торможения в отношении корней и проростков семян ржи посевной для всех опытных проб не превышают 20 %, что свидетельствует о недоказанности фитотоксического действия отхода в отношении семян данного тест-объекта. Однако, следует отметить, что наблюдается частичное угнетение роста проростков семян ржи (не более 9,7 %).

Результаты исследований фитотоксических свойств водной вытяжки, полученной из древесной золы, в отношении семян горчицы белой, свидетельствуют о том, что в отношении проростков наблюдается стимуляция роста. Средняя длина корней семян горчицы белой для опытных проб с величинами разбавления вытяжки дистиллированной водой, равными 1:1, 1:3, 1:5, меньше соответствующего показателя для контрольной пробы на 16 мм, 14 мм и 4 мм соответственно. Таким образом, для первых двух проб (с минимальным разбавлением вытяжки) фиксируется эффект торможения в отношении семян горчицы белой. Это подтверждает присутствие токсичных соединений в составе водной вытяжки, полученной из древесной золы.

Полученные результаты свидетельствуют об ограниченном применении древесной золы в качестве удобрения на сельскохозяйственных землях, используемых для выращивания культур, используемых человеком в качестве продуктов питания.

ПОРІВНЯННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ КАТАЛІТИЧНИХ СИСТЕМ ДЛЯ ОКСИДАТИВНОЇ ДЕГРАДАЦІЇ ТЕТРАЦИКЛІНІВ

*Бойко А. О.*¹, Старкова Г. М.¹, Гордєєва І. О.¹, Сінолуп О. О.², Куц О. В.^{1,3},
Шендрік О. М.¹

¹Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна

²Вінницький науково-дослідний експертно-криміналістичний центр МВС України,
Вінниця, Україна

³Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України,
Київ, Україна

kytaieva.a@donnu.edu.ua

Висока протимікробна активність і відносно низька вартість тетрациклінових антибіотиків сприяє їх широкому використанню в медицині і тваринництві для профілактики та лікування інфекційних захворювань, а також як стимулятор росту тварин. Розповсюджене використання цих лікарських препаратів призводить до їх накопичення в продуктах харчування тваринного походження та об'єктах навколишнього середовища.

Пошуки нових методів очищення стічних вод від антибіотиків тетрациклінового ряду є актуальною задачею. У роботі представлено порівняльне дослідження методів (ферментативного та з використанням реактиву Фентона) окиснювальної деградації тетрацикліну (ТК).

Процес каталітичного окиснення ТК проводили з використанням систем, які складаються з лаккази *T. versicolor* і медіатору (2,2',6,6'-тетраметилпіперидин-1-оксил (ТЕМПО); 1-гідроксibenзотріазол (1-НВТ); віолурова кислота (ВА)) у цитратно-фосфатній буферній системі рН 4.5 за температури 35 °С. За зміною концентрації ТК у розчині слідували за допомогою спектрофотометричного методу. В УФ-області спектру ТК спостерігається інтенсивна смуга поглинання у діапазоні 300 ÷ 400 нм з максимумом 358 нм (ϵ 13774 л/моль·см). Оптимум рН для цих трьох систем складає 4.5, що відповідає оптимуму роботи фермента лаккази *T. versicolor*. При концентрації медіатору у розчині $3,0 \times 10^{-3}$ М спостерігається насичення ферменту субстратом і при підвищенні концентрації швидкість процесу практично не змінюється. Альтернативно ферментативним процесам є використання системи

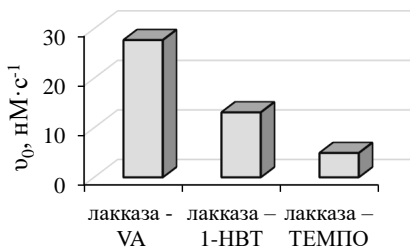
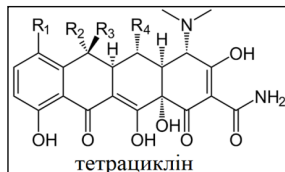


Рис. Діаграма порівняння швидкості процесу деструкції ТК під дією лакказно – медіаторних систем за участі ТЕМПО, 1-НВТ, ВА. $[TK]_0 = 2 \times 10^{-5}$ М; $[Медіатор]_0 = 3 \times 10^{-3}$ М; $[Лакказа]_0 = 124$ мкг/мл, ЦБС 4,5, 35 °С

Фентона для деградації тетрациклінів. Встановлено, що окиснення ТК під дією системи Фентона перебігає із значно більшою швидкістю ($v_0 = 2,8 \times 10^{-2}$ М·с⁻¹) порівняно з лакказно-медіаторними системами (рис.). Енергія активації цього процесу дорівнює 32,9 кДж/моль. Гідроксильні радикали, які утворюються при взаємодії пероксиду водню та Fe^{2+} є надзвичайно реакційноздатними і неселективними, тому використовуються для попередньої очистки стічних вод. Основним недоліком такого методу очистки води є утворення великої кількості осаду гідроксиду Феруму.



ASSESSMENT OF THE SELECTIVE CYTOTOXIC EFFECT OF LONG-CHAIN IONIC LIQUIDS ON HUMAN TUMOR CELL LINES

Gryniukova A., Rogalskiy S., Metelytsia L.

Department of biomedical research,

V. P. Kukhar Institute of Bioorganic Chemistry and Petrochemistry of the NAS of Ukraine
Kyiv, Ukraine

a.griniukova@mail.enamine.net

The discovery of new pharmacological drugs for the treatment of cancer remains an urgent problem. In current oncological practice there are three main traditional methods of treatment of oncological pathology – surgical, radiation therapy and chemotherapy. Low efficacy and/or high toxicity of these traditional treatments of malignant tumors requires the search for new methods and new tools in the fight against oncogenesis. One of the promising areas in modern oncology is the investigation of new cytotoxic agents that will combine both, effective inhibition of the tumor progression and inactivity against non-malignant ones.

For the last decades, the attention of the pharmaceutical industry was drawn to ionic liquids (ILs) as a potential target in search of new therapeutic agents. ILs are currently widely used as antimicrobials with high cytotoxic activity and low toxicity. ILs possess flexible physicochemical properties due to their structure that can be easily modulated by a combination of various organic cations and organic or inorganic anions. An effective method of reducing the toxicity of ILs is their chemical functionalization through incorporation of polar functional groups (hydroxyl, carboxyl, ester, amide) into the alkyl chains [3-4]. The antitumor properties of ILs have not yet been studied in detail. The main research in this area is limited to assessing the effect of ILs on cell viability, and only a few reports show in-depth research. An in-depth understanding of the cellular mechanisms of the antitumor effect of ILs may favor the research of compounds with targeted antitumor activity and higher selectivity or can help to improve the existing chemotherapeutic agents.

In the current study, we demonstrate the effect of ester-functionalized imidazolium ILs with different alkyl chains (Fig. 1).

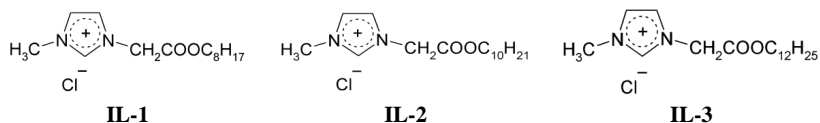


Fig. 1. Name and structures of test ILs

The cytotoxic effect was assessed on the cell lines of chronic human myelogenous leukemia K-562 (ATCC CCL-243), human neuroblastoma SK-N-DZ (CRL-2149). For the evaluation of compounds selectivity over cancer cells, human embryonic kidney cells HEK293 (ATCC CRL-1573) was used. For the assessment of compounds growth inhibition effect, we used a colorimetric method that measures the metabolic activity of cells with a redox indicator – resazurin. Compounds were assessed at the final concentrations ranging from 0.46 μM to 1000 μM (8 points, 3-fold serial dilutions).

All test compounds showed a dose-dependent cytotoxic effect on both cancer cell lines K562 and SK-N-DZ (Fig. 2 and Table 1).

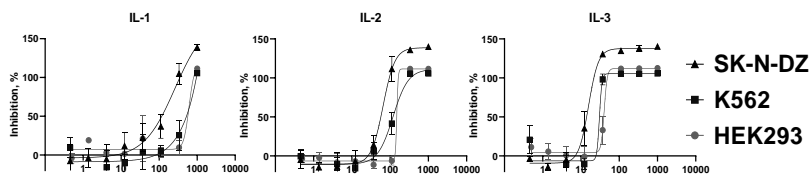


Fig. 2. Dose-response curves for test ILs in dose-response against SK-N-DZ, K562 and HEK 293 cell lines

Table 1. IC₅₀ values (uM) for the compounds tested for cytotoxic effect against SK-N-DZ, K562 and HEK 293 cell lines

Compound name	HEK293(human embryonic kidney)		K562 (myelogenous leukemia cell line)		SK-N-DZ (neuroblastoma cell line)	
	IC50	HillSlope	IC50	HillSlope	IC50	HillSlope
IL-1	609.7	6.2	NA	NA	260.2	1.1
IL-2	149.7	24.2	119.2	2.2	65.6	2.8
IL-3	40.5	11.0	30.4	13.3	15.8	3.3

The obtained results indicated that long-chain imidazolium ILs comprising polar ester groups in the alkyl chains are promising objects for the development of new drugs with antitumor properties. It should be noted, that the ionic structure of ILs creates extremely wide opportunities for compounds with the optimal combination of high and/or anticancer activity and low cytotoxicity.

Literature

1. Burrell, Rebecca A., and Charles Swanton. "Tumour heterogeneity and the evolution of polyclonal drug resistance." *Molecular oncology* 8.6 (2014): 1095–1111.
2. R. Ferraz, L. C. Branco, C. Prudêncio, J. P. Noronha, Ž. Petrovski, *ChemMedChem* 2011, 6, 975–985.
3. Przesalski S., Sarapuk J., Kleszczyńska H., Gabrielska J., Hładyszowski J., Trela Z., Kuczera J. Influence of amphiphilic compounds on membranes. *Acta Biochim Pol.* 2000, 47:627-638.
4. Trush M., Metelytsia L., Semenyuta I., Kalashnikova L., Papeykin O., Venger I., Tarasyuk O., Bodachivska L., Blagodatnyi V., Rogalsky S. Reduced ecotoxicity and improved biodegradability of cationic biocides based on ester-functionalized pyridinium ionic liquids. *Environ. Sci. Poll. Res.* 2019, 26: 4878–4889.

**ВПЛИВ ТЕТРАМЕТИЛПІПЕРИДИНІВ НА АКТИВНІСТЬ ТРАНСПОРТУ
ЕЛЕКТРОНІВ У ДИХАЛЬНОМУ ЛАНЦЮЗІ РОСЛИН *ARABIDOPSIS
THALIANA L.* У ВІДПОВІДЬ НА ДІЮ ПЕПТИДУ FLG22 ТА БАКТЕРІЙ
*PSEUDOMONAS SYRINGAE***

Дерев'янчук М. В., Бухонська Я. К., Кравець В. С.

Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря НАН України, Київ, Україна
derevmyk@ukr.net

2,2,6,6-тетраметилпіперидин-1-оксид (ТЕМРО) і 4-гідрокси-2,2,6,6-тетраметилпіперидин-1-оксид (ТЕМРОЛ) – важливі представники класу сполук азотистих гетероциклів, які виявляють унікальні властивості стабільних радикалів та можуть легко окислювати чи відновлюватися при взаємодії зі сполуками, які виникають у процесі функціонування клітини. Зокрема, ТЕМРО і ТЕМРОЛ можуть легко взаємодіяти із активним формами кисню (АФК), виступаючи у ролі антиоксидантів, що має важливий захисний ефект у протидії розвитку оксидативного стресу. Попри функцію антиоксидантів, ТЕМРОЛ є відомим індуктором генів аквапоринів та вазопресину, експресія яких пригнічена цисплатином, а також здатні знижувати пошкоджуючий ефект цисплатину на нирки мишей.

У даній роботі проводилося дослідження по визначенню біологічних активностей ТЕМРО і ТЕМРОЛ у регуляції загальних захисних реакцій рослин у відповідь на розпізнавання еліситорів та бактеріальних клітин. Отримані результати свідчать, що водорозчинні стабільні радикали на основі тетраметилпіперидинів (ТЕМРО, ТЕМРОЛ) впливають на ключові біохімічні ланки, спрямовані на адаптацію метаболізму клітини до стресових умов. Зокрема, було визначено, що ТЕМРОЛ знижує активність ціанід-чутливого та ціанід-резистентного компонентів дихального ланцюга мітохондрій при формуванні захисної відповіді клітин при введенні у листки розчину індукторів резистентності на основі пептиду flg22 чи суспензії фітопатогенної бактеріальної культури *P.syringae*. Цей ефект може бути пов'язаний із антиоксидантними властивостями ТЕМРОЛ. Отримані результати вказують на сприяння формування захисної реакції у листках і проростках рослин оброблених тетраметилпіперидинами.

Робота виконана за підтримки проєкту Національної академії наук України № 2.1.10.32-20 та проєкту ЦПДФ «Розробка стратегії розвитку пріоритетних напрямів хімії» №0112U002657.

THE EVALUATION OF THE EFFECT OF MICROPLASTIC ON BIVALVE MOLLUSK IN THE SINGLE AND COMBINE WITH IBUPROFEN EXPOSURES

*Martyniuk V.*¹, Khoma V.¹, Mackiv T.^{1,2}, Nikonchuk A.¹, Kravchuk O.¹, Gnatyshyna L.^{1,2}, Stoliar O.¹

¹Ternopil Volodymyr Hnatiuk National Pedagogical University, Ternopil, Ukraine

²I. Ya. Horbachevsky Ternopil National Medical University, Ternopil, Ukraine
martynjyk23@ukr.net

Microplastic (MP) is now internationally recognized as a ubiquitous pollutant with potentially serious consequences in the environment. It can sorb other substances and change their biological activities of other substances like nonsteroidal anti-inflammatory drugs (NSAIDs). Ibuprofen (IBU) is a common NSAID and one of the most widely distributed pollutants in the aquatic environment. However, the combine effect of MP and NSAIDs in the aquatic animals is studied scarcely. Filter feeders, such as bivalve mollusks, are particularly vulnerable to MP ingestion as they are able to feed directly on MPs. The goal of this study was to elucidate the biochemical responses of freshwater bivalve mollusk to the combine effect of MP and IBU in the environmentally relevant concentrations, utilizing the multi-marker approach. To consider the possible effect of other confounding factors, specimens of mollusk *Unio tumidus* were collected from two populations, located in the pristine and polluted sites. We treated mollusks with microplastic PET particles (MP, 1 mg L⁻¹ with a size < 0.5 mm), IBU (0.8 µg L⁻¹), or their combination (IBU-MP) for 14 days. Untreated mollusks from both sites were also examined. The oxidative stress response was assessed from the total antioxidant activity (ABTS test), Mn- and Cu,Zn-superoxide dismutases (SOD) and catalase (CAT) activities, the creation of the lipid peroxidation (TBARS) and protein carbonyls (PC), metallothionein-related thiols (MT-SH), cellular redox index (NADH/NAD⁺). The activities of biotransformation, namely Cyp450-related (EROD, Phase I) and glutathione *S*-transferase (GST, phase II) were also analyzed. The activity of the main apoptotic executive enzyme caspase-3 and lysosomal protease cathepsin D (total and its efflux from lysosomes, CTDt and CtDe, respectively), cholinesterase (ChE, marker of neurotoxicity) and citrate synthase (CS, marker of metabolic activity) and lysosomal membrane stability (viability) were evaluated to indicate the toxicity of exposure.

The residents of two populations were distinguished by substantially higher level of antioxidant defence, biotransformation, metabolic activity and low apoptotic activity in the specimens from the pristine site. The exposures did not reveal the oppression of viability or neurotoxicity in all experimental groups. The exposure to MP and IBU-MP activated Mn- and Cu,Zn-SOD in both populations. The most common manifestations were the up-regulation of CtDt and CtDe (by 2-3 times) attesting the lysosome participation in the MP detoxification, and the decrease in the redox state (ratio NADH/NAD⁺). The activation of antioxidant defence (ABTS test, TBARS and PCI) and metabolic activity was confirmed in the exposures to IBU and IBU-MP. In these exposures, EROD activity was depleted. ChE was activated only in the IBU and IBU-MP-groups. The exceptions from this regularity were the opposite responses of SOD, GST, MT-SH, caspase-3, and vitality in the specimens from two populations. The co-exposure to IBU and MP had synergistic effects on the ABTS, SOD, PC, EROD, GST, ChE and CS responses. The specimens from the polluted site were more vulnerable to the exposures. These comprehensive results confirm the valuability of the utilized model to understand the earlier effects of pharmaceuticals and stress the importanse of the evaluation of the initial resistance of the organism depending on its history of population.

This work has been granted by the Ministry of Education and Science of Ukraine to Oksana Stoliar (Ukrainian-Lithuanian R&D Project No M19/2020).

THE DISCOVERY OF METALLOTHIONEINS RESPONSE IN THE SYNOVIAL TISSUES OF RATS UNDER THE ACUTE GONARTHROSIS

Mackiv T.^{1,3}, Lytkin D.², Shebeko S.², Khoma V.³, Martinyuk V.³, Formanchuk R.³,
Gnatyshyna L.^{1,3}, Stoliar O.³

¹I. Ya. Horbachevsky Ternopil National Medical University, Ternopil, Ukraine

²National University of Pharmacy, Kharkiv, Ukraine

³Ternopil Volodymyr Hnatiuk National Pedagogical University, Ternopil, Ukraine

mackiv@tdmu.edu.ua

Metallothioneins are the unique heat-stable intracellular proteins of particular composition. They are buffering the Zinc (Zn) within the cell providing its regulatory transfer to other cellular targets. The inflammation processes are frequently accompanied by the Zn deficiency in the body. There are plural data witnessing a continuous deficiency of Zn in serum and plasma of patients with inflammation. However, to the best of our knowledges, the ability to accumulate Zn in the metallothioneins under the gonarthrosis (GA) was not investigated. Moreover, the efflux of metallothioneins from the cells can be expected under the inflammation, but the presence of these proteins in the synovial tissues was not in the focus of studies. Therefore, the aim of this study was to evaluate the presence of metallothioneins in the synovial tissues of rat with induced GA.

The acute GA was induced in rats by intra-articular administration of carrageenan. After euthanasia, knee joints were removed surgically, serum was prepared from blood. The synovial tissues were homogenized, and the supernatants were used. Thermostable proteins were isolated by size-exclusion chromatography on Sephadex G-50. For each replicate, two combined samples of tissues in each group were utilised. Each sample was comprised with 70 mg or 100 mg of tissue per individual (to the total of 350 mg or 500 mg from five specimens). The level of sialic acids in the blood serum was assayed for the indication of GA severity.

High level of sialic acids in the serum of the exposed rats confirming the GA diagnosis. Gel-filtration of the thermostable extract revealed in each group the peak with apparent molecular mass of 8 kDa. It was identified as MTs-containing peak basing upon its spectral features, thermostability and molecular weight. In each group, the UV-spectrum of this peak had the typical maximum of absorption in the area of 245–255 nm indicating the presence of metal-thiolate clusters and did not show the maximum at 280 nm reflecting the absence of the aminoacid residues with aromatic groups in these unique proteins. However, in the exposed animals, the profile of elution was distorted and had two additional peaks with the molecular mass about 15 and 5 kDa. This manifestation was particularly evident in the 500 mg-samples. These additional peaks can reflect particular instability of metallothioneins with the partial oxidative polymerization and the breakdown to the separate domains. These signs can be the results of the instability of metallothioneins in the injured tissue. The reasons for this modification of metallothionein can be the oxidative destroying of the link between two domains and oxidation of thiols with the creation of oligomers. On the other hand, the consequence of this oxidation can be the loss of the metal-binding properties and, in result, the injury of Zn homeostasis.

To summarize, we discover the metallothioneins in the knee joints of rats and detect the change of their properties under the GA pathology. The evaluation of the metallothionein chromatographic profile can be utilised in the evaluation of the injury of the synovial tissues in the degenerative disorder of the knee joint.

This work has been granted by the Ministry of Education and Science of Ukraine to Oksana Stoliar (Ukrainian-Lithuanian R&D Project No M19/2020).

ВПЛИВ ОРГАНІЧНИХ РОЗЧИННИКІВ НА АКТИВНІСТЬ ЛАККАЗИ *TRAMETES VERSICOLOR*

Паньковська А. Г.¹, Гордєєва І. О.¹, Мельниченко В. І.¹, Куш О. В.^{1,2}, Шендрик О. М.¹

¹Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна

²Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України,
Київ, Україна

pankovska.a@donnu.edu.ua

Останнім часом гриби лаккази набувають все більшого використання у різних екологічних і промислових процесах, таких як делігніфікація целюлози, очистка стічних вод, модифікація волокон, хімічний синтез, імуноаналіз. Це обумовлено широкою субстратною специфічністю оксидоредуктаз, можливістю проявляти каталітичну активність у відносно великому інтервалі рН і температури, стабільністю ферменту при його зберіганні.

Додавання органічних сполук до лакказ може призводити до денатурації білкових глобул і втрати активності ферментів. Для оптимізації промислових процесів за участю лакказ і розширення спектру їх використання за рахунок субстратів з низькою розчинністю у воді, доцільно дослідити вплив органічних розчинників на каталітичну активність ферменту шляхом вивчення зміни активності ферменту при дії різних класів органічних розчинників.

Досліджено вплив етанолу, ізопропанолу, бутанолу, ацетонітрилу, тетрагідрофурану, етилацетату на активність лаккази *Trametes versicolor* у реакції окиснення гідрокінону ферментом у цитратно-фосфатній буферній системі рН 4,5 за температури 35 °С. За зміною концентрації субстрату у розчині слідували за допомогою спектрофотометричного метода. В УФ області спектру гідрокінону спостерігається інтенсивна смуга поглинання у діапазоні 270 ÷ 310 нм з максимумом 291 нм (ϵ 3240 л/моль×см). При додаванні до розчину гідрокінону лаккази відбувається поступове зменшення інтенсивності та зникнення смуги поглинання внаслідок окиснення субстрату ферментом. Додавання аліквоти органічного розчинника перед початком досліду призводило до зменшення каталітичної активності лаккази, що наведено на рисунку.

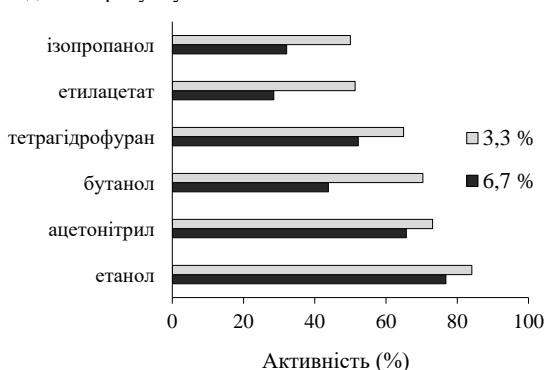


Рис. Зменшення активності лаккази у водно-органічному середовищі з вмістом розчинника 3,3 та 6,7 % (об.).
 $C_{\text{лак}}=15,5$ мг/л, $C_{\text{ГХ}}= 5,0 \cdot 10^{-3}$ М, ЦБС рН = 4,5, $t = 35$ °С

Найменша втрата каталітичної активності фермента спостерігається у випадку додавання етилового спирту. При його концентрації у системі 20,0 % (об.) активність лаккази зменшується на 64 %, а при додаванні аналогічної кількості ізопропілового спирту – на 98 %. Через те, що бутанол і етилацетат обмежено розчинні у воді, їх максимальний вміст у реакційній суміші склав 6,7 % (об.).

ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ ГЕРБІЦИДУ ЗЕНКОР НА ПРОЦЕСИ ПЕРЕКИСНОГО ОКИСНЕННЯ ЛІПІДІВ

Симонова Н. А.

Національний університет «Чернігівський колегіум» імені Т. Г. Шевченка, Чернігів,
Україна
sna_1994@ukr.net

Високоєфективна препаративна форма проти бур'янів, саме таке визначення використовується для відомого гербіциду Зенкор, дієвою речовиною якої є метрибузи. Похідна триазинів не є бажаною для застосування на території України. Більшість з них погано розчинні у воді, при потрапінні у водойми відбувається загибель бентосу, має великий негативний вплив на організм риб. Частина пестицидів має нервово-паралітичний вплив на риб (втрати рівноваги, зміна рухової активності, паралічі). При високій концентрації, інтоксикації викликають порушення системи антиоксидантного захисту в тканинах риб та розпочинають процес перекисного окиснення ліпідів (ПОЛ). В розчиненому стані пестициди викликають менший токсичний ефект. Найбільш небезпечними є їх поєднання з нафтопродуктами та поверхнево-активними речовинами (ПАР) – в цих випадках вони виявляють високу проникну здатність [1]. Мета дослідження: вивчення процесу перекисного-окиснення ліпідів, а саме малонового діальдегіду за дії гербіциду Зенкор на організм коропа лускатого (*Syrpinus carpio L.*).

Об'єктом дослідження є короп (*Syrpinus carpio L.*). Риб відбирали з природної водойми (зимувальний ставок ВАТ «Чернігіврибгосп»). Маса риб в межах 200 г. в продовж усього періоду досліджень контролювався гідрохімічний режим води. Досліди проводили у 200-літрових акваріумах з відстояною водопровідною водою, в які рибу розміщували з розрахунку 1 на 40 дм³ води. Температуру витримували близькою до природної. Дослідження проводили в 2021 році. Концентрацію досліджуваних ксенобіотиків відповідає 2 ГДК. Після 14 діб тварини були декапітовано з додержанням вимог [2]. З метою визначення біохімічних показників гомогенат тканин готували на 0,25 М сахарозі у співвідношенні 1:10. Статистична обробка результатів здійснювалася за загальними стандартами [3].

Найбільшу зміну Зенкор спричинив при дослідженні дієвих кон'югатів. Зміна у цій групі особливо велика в м'язах, результат зміни майже у два рази, мозок відзначився показником в 37 % у порівнянні з контрольною групою, печінка та зябра зміни показників до 20 %. В гідроперекисах показник зябер має зміну майже у два рази. До 46 % змінився показник м'язів та 43 % мозку, печінка в межах норми. Малоновий діальдегід тільки в мозку змінюється з великим процентом, цей показник сягає 96 %, всі інші показники в межах норми контрольної групи. Отже, за 14 днів проведення експерименту можна прослідкувати значні зміни в організмі коропа. Можна зробити висновки, що дія Зенкору призводить до зниження системи антиоксидантного захисту в організмі риб. Вплив гербіцидів на представників водного середовища зменшує кількість цих видів та може призвести до надто великих екологічних втрат.

Література

1. Колесник Н. Л. Токсичний вплив пестицидів на біоту прісних водойм України (огляд). Рибгосподарська наука. Україна. 2015. № 4. С. 31–53
2. Гельсінська декларація Всесвітньої медичної асоціації «Етичні принципи медичних досліджень за участю людини у якості об'єкта дослідження» від 01.06.1964 [Електронний ресурс]. – Режим доступу : http://zakon4.rada.gov.ua/laws/show/990_005
3. Ойвин И.А. Статистическая обработка результатов экспериментальных исследований / И. А. Ойвин // Патол. физиол. и экспер. терапия. – 1960. – № 4. – С. 76 – 85.

THE EFFECT OF COMMON SURFACE WATERS CONTAMINANTS, PESTICIDE ROUNDUP AND DRUG CHLORPROMAZINE, IN THE ENVIRONMENTALLY RELEVANT EXPOSURES ON THE BIVALVE MOLLUSK *UNIO TUMIDUS*

*Khoma V.*¹, Martinyuk V.¹, Mackiv T.^{1,2}, Yunko K.¹, Zacik U.¹, Gnatyshyna L.^{1,2}, Stoliar O.¹

¹Ternopil Volodymyr Hnatiuk National Pedagogical University, Ternopil, Ukraine

²I. Ya. Horbachevsky Ternopil National Medical University, Ternopil, Ukraine
khomav@tnpu.edu.ua

Bivalve mollusks represent the most recognized bioindicators of the surface water chemical pollution and climate changes. However, the specific responses of mollusk to certain xenobiotics are not well understood and examined mostly in the experimental acute exposures to single substances in the environmentally impossible high concentrations. This study aimed to compare the subchronic impact of common aquatic pollutants in the single and combine exposures utilizing the low environmental concentrations and to reveal the common and particular responses. Both selected substances, herbicide Roundup (the commercial composition of glyphosate) and drug chlorpromazine, are the pollutants of priority. Both substances are expected to impact the metal homeostasis, namely calcium uptake and zinc (Zn) metabolism with the realtion on the general transporting systems. Elevated temperature was shown to exacerbate the toxicity or distort effects of xenobiotics in different exposures of bivalve mollusks including the mixture contained Roundup. However, the limits of adaptive responses to combine effect of pollution and the temperature extremes are not well understood now.

We studied the effect of Roundup (Rn) and chlorpromazine (Cpz) in the single ($17 \mu\text{g L}^{-1}$ and $18 \mu\text{g L}^{-1}$ respectively at 18°C) and combine (Rn at 25°C (RnT) and RnCpz) exposures during 14 days on the mussels *Unio tumidus*. Digestive glands were examined. We applied the multi-marker approach that included the evaluation of specific responses to organic pollutants (biotransformation activities) and common oxidative stress and Zn metabolism responses. The vitality was evaluated from the lysosomal membrane stability.

Shared signs of hormetic-like response were indicated in all groups as the increase of the level of Zn-metallothioneins and antioxidant activity (ABTS*). All exposures except Rn, caused the common responses: the increase of the GSH/GSSG ratio, protein carbonyls, CYP450 related activity (EROD) (by 3 times in RnT- and Cpz-groups), and up-regulation of citrate synthase activity. On the other hand, metallothionein protein concentration was enhanced in all groups except Cpz. Cholinesterase and caspase-3 activities increased simultaneously in Rn- and RnCpz- groups. GST changed differently in Rn- and Cpz-groups. Its activity was enhanced by Rn and decreased by Cpz. Highest injury was indicated in the RnT-group due to the decrease of Zn total concentration (Zn-t) and lysosomal integrity. According to Discriminant function analysis, Cpz caused strongest differences decreasing Zn-t, GST activity and increasing lysosomal integrity. Moreover, combine exposures abolished the individual responses. Summarizing, environmentally realistic complex exposures can enhance the resistance of antioxidant defence with involving of Zn-thiolome, but the heating limited the resistance. Multi-marker expertise with application of integrated indexes has benefits in the indication of unpredictable effects of complex exposures.

This work has been granted by the Ministry of Education and Science of Ukraine to Oksana Stoliar (Ukrainian-Lithuanian R&D Project No M19/2020).

PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF THE *TRAMETES VERSICOLOR* LACCASE -DIACETYL OXIME SYSTEM IN THE PROCESSES OF DYE DECOLORIZATION

*Shevchenko J. R.*¹, Zosenko O. O.¹, Kushch O. V.^{1,2}, Hordieieva I. O.¹, Shendrik A. N.¹

¹Faculty of Chemistry, Biology and Biotechnologies, Vasyli' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

²L. M. Litvinenko Institute of Physico-organic and Coal Chemistry, NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

shevchenko.jul@donnu.edu.ua

Every year, 7×10^5 – 1×10^8 tons of synthetic dyes are produced in the world, a tenth of which is thrown into water bodies along with industrial waste. Due to their chemical structure, the dyes are resistant to fading in water. However, a wide range of physical and chemical methods for decolorizing dyes are currently available. One of the alternative methods is the biocatalytic process of enzymatic catalysis with the participation of the laccase. Recently, it has attracted a lot of attention as an effective approach to degradation of the dyes. The use of mediators makes it possible to oxidize nonspecific substrates with laccase in biocatalytic systems.

Trametes versicolor laccase and diacetyl oxime (DAO) as mediator were used for study. DAO is an inexpensive, non-toxic, small and highly water-soluble oxime molecule. Synthetic dyes such as Methylene Orange, Acid Red 1, Mordant Blue 13, Methylene Green, Crystal Violet; Reactive Blue 4; Methylene Blue and Indigo Carmine (IC) were studied in the process of dye decolorization in the presence of laccase-mediator system (LMS).

The degradation of the dye solutions was investigated spectrophotometrically using an Analytic Jena SPECORD 50 spectrophotometer equipped with a thermostatically controlled

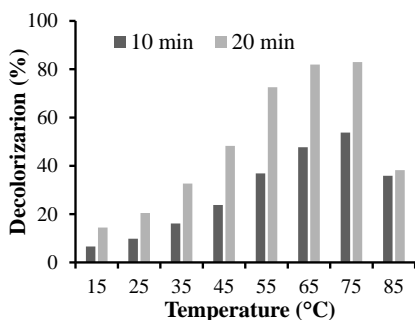


Fig. Influence of temperature on the rate of discoloration of IC after 10- and 20-minutes incubation in the presence of laccase-DAO system in citrate-phosphate buffer pH 4.5

cuvette holder. The decrease in absorption at the maximum wavelength of each dye was monitored. The dye decolorization rate in the presence of the laccase – DAO system was studied as a pH function. The pH profile of the laccase activity has the usual bell-shaped shape for laccase. Optimal pH values are largely dependent on the substrate and lie in the range of 4.0–6.0. The effect of temperature on dye decolorization rate in the presence of LMS was evaluated in the temperature range 15–85 °C. The results show (Fig. for example IC) an increase in the initial of IC decolorization with increasing temperature from 15 to 65 °C, however, with a further increase in temperature to 85 °C, the degree of dye decolorization decreased.

**QUANTUM CHEMISTRY /
КВАНТОВА ХІМІЯ**

THEORETICAL EVALUATION OF THE CHANGE IN DETONATION CHARACTERISTICS OF ENERGETIC AMINES UPON CONVERSION INTO TRIAZENES AND PENTAZOLES

Bondarchuk S. V.

The Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy, Cherkasy, Ukraine
bondchem@cdu.edu.ua

Aromatic and heterocyclic amines form a huge pool of modern energetic materials, both molecular and salt-like [1]. Simultaneous presence of amino and nitro groups in an energetic molecule provide benefit in stability due to strong intramolecular hydrogen bonds, like in 1,3-diamino-2,4,6-trinitrobenzene (DATB) and 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene (TATB), which results in high h_{50} values equal 320 and 490 cm, respectively [2]. Additionally, such amines can be converted into diazoaminoarenes (triazenes) and pentazoles via formation of diazolum salt as an intermediate (Fig. 1) [3]:

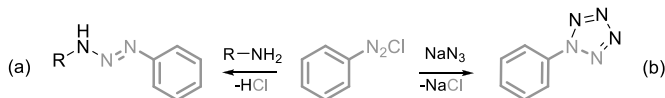
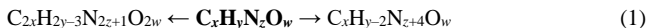


Fig. 1. Schematic presentation of the reactions studied in this work

According to our recently proposed method [4], these reactions can be schematically illustrated as the following (left – triazene, right – pentazole):



As a result, one can expect the following increase in density and heat of formation (Table 1).

Table 1. General expression for gain in density (Δd_c) and heat of formation ($\Delta\Delta H_f$)

Route	Δd_c	$\Delta\Delta H_f$
(a)	$\frac{1.020(a_1x + b_1y + c_1z + w)}{(a_2x + b_2y + c_2z + w)(a_2x + b_2y + c_2z + w - 0.091)}$	$-1.2845(-32x + 26y - 89z + 56w - 167)$
(b)	$\frac{2.398(a_3x + b_3y + c_3z - w)}{(a_2x + b_2y + c_2z + w)(a_2x + b_2y + c_2z + w + 4.386)}$	$1.2845(4N - 2H) = 524.1 \text{ kJ mol}^{-1}$

Herein, $a_1 = 1.457$, $b_1 = 0.418$, $c_1 = 1.255$, $a_2 = 1.643$, $b_2 = 0.512$, $c_2 = 1.355$, $a_3 = 2.201$, $b_3 = 1.423$ and $c_3 = 0.712$. Thus, one can easily calculate how much the detonation characteristics will increase for an arbitrary composition $C_xH_yN_zO_w$, which corresponds to an aromatic or heterocyclic amine. This is a convenient method for a crude estimation of the detonation properties without any quantum-chemical calculations. Of course, the latter are still needed for a precise estimation, but now these expensive methods can be applied for a much shortened list of potential candidates.

References

- [1] Gao, H.; Zhang, Q.; Shreeve, J. M. *J. Mater. Chem. A* **2020**, *8*, 4193-4216.
- [2] Rice, B. M.; Hare, J. J. *J. Phys. Chem. A* **2002**, *106*, 1770-1783.
- [3] H. Zollinger, *Diazo chemistry I: Aromatic and heteroaromatic compounds*, VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim, 1994.
- [4] Bondarchuk, S. V. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2021**, *60*, 1952-1961.

INFLUENCE OF HEAD GROUP NATURE IN OXIME-FUNCTIONALIZED SURFACTANTS ON OCTANOL/WATER PARTITION COEFFICIENT

*Burakov N. I.*¹, Serdyuk A. A.¹, Shumeiko A. E.^{1,2}, Kapitanov I. V.¹

¹L. M. Litvinenko Institute of Physical Organic and Coal Chemistry NASU, Kiev, Ukraine

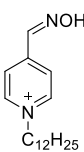
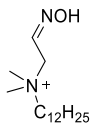
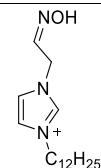
²Institute of Organic Chemistry NASU, Kiev, Ukraine

ashumeiko@ukr.net

One of the most important and fundamental property of chemical compounds is octanol/water partition coefficient (K_{ow}), which is usually used in logarithmic form ($\log P$). This parameter characterizes the compounds hydrophobicity and very often controls the biological effects as well as aggregation ability.

Values of $\log P$ were evaluated for series of oxime-functionalized surfactants with different nature of charged center in the head group (pyridinium /ammonium /imidazolium) and similar hydrophobic alkyl chain (*n*-dodecyl) with the two open access tools (<http://www.vcclab.org/lab/alogps/> and <http://www.molinspiration.com/services/logp.html>) using SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System) notation.

Table 1. Octanol/water partition coefficient ($\log P$) for series of oxyme-functionalized surfactants

Parameter	Compounds		
			
$\log P$ (www.vcclab.org)	1.27	1.27	1.41
$\log P$ (www.molinspiration.com)	1.38	1.39	1.55

Obtained results (see Table 1) are demonstrated that nature of charged center in the head group of oxime-functionalized surfactants has not significant influence on hydrophobic properties of the surfactant molecule.

The expected bioactivity profile for these molecules evaluated with open access tools <http://www.molinspiration.com/services/logp.html> included ion channel modulator and enzyme inhibitor activities.

ОЦІНКИ МАРШРУТІВ РЕАКЦІЙ *n*-ГЕКСАНУ В СИСТЕМІ Mn(III)/Mn(II) – H₂SO₄

*Волкова Л. К.*¹, Опейда Л. І.², Пастернак О. М.³

¹Інститут фізико-органічної хімії і вуглекислоти ім. Л. М. Литвиненка НАНУ,
Київ, Україна, volkovalk@gmail.com

²Відділення фізико-хімії горючих копалин ІнФОВ НАНУ, Львів, Україна
li.opeida@gmail.com

³Маріупольський державний університет, Маріуполь, Україна, o.pasternak@mdu.in.ua

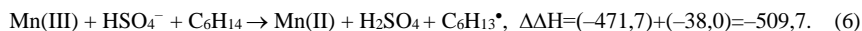
Для реакцій *n*-гексану з Mn(III)/Mn(II) та H₂SO₄ квантово-хімічним методом PM7 (пакет програм MOPAC-2016) обчислено стандартні ентальпії утворення реагуючих частинок (ΔH) та їх зміни (ΔΔH) в можливих маршрутах. У таблиці наведено величини ΔH і ΔΔH для реакцій *n*-C₆H₁₄ з Mn(III) та Mn(II) по вторинному (*втор.*) зв'язку C–H при гомолізі (відрив атома H, маршрут 1), гетеролізі (перенос гідрид-іона H⁻, м-т 3); а також при відриві електрона від молекули *n*-гексану (м-т 2). Величини ΔΔH для всіх маршрутів мають від'ємне значення, що свідчить про їх термодинамічну вигідність.

Таблиця. Зміна ентальпії (ΔΔH) при гомо-, гетеролітичному розривах *втор*-C–H та при відриві електрона в реакціях *n*-гексану в системі Mn(III)/Mn(II) – H₂SO₄

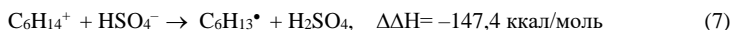
Реакції <i>n</i> -C ₆ H ₁₄ в розчинах Mn(III)/Mn(II) – H ₂ SO ₄					ΔΔH, ккал/моль		м-т №
					Mn(+3)	Mn(+2)	
Mn(+3) + C ₆ H ₁₄ → Mn–H(+3) + C ₆ H ₁₃ [*]					–57,4	–59,5	(1)
ΔH	1407,09	–38,35	1321,73	–10,39			
Mn(+3) + C ₆ H ₁₄ → Mn(+2) + C ₆ H ₁₄ ⁺					–362,3	–175,6	(2)
ΔH	1407,09	–38,35	823,71	182,71			
Mn(+3) + C ₆ H ₁₄ → Mn–H(+2) + C ₆ H ₁₃ ⁺					–464,4	–314,9	(3)
ΔH	1407,09	–38,35	736,28	168,11			
Mn(III) + HSO ₄ ⁻ → Mn(II) + HSO ₄ [*]					–471,7	–285,0	(4)
ΔH	1407,09	–222,54	823,71	–110,85			
HSO ₄ [*] + C ₆ H ₁₄ → H ₂ SO ₄ + C ₆ H ₁₃ [*]					–38,0	–38,0	(5)
ΔH	–110,85	–38,35	–176,86	–10,39			

Абсолютні значення –ΔΔH зростають від гомолізу C–H до відриву електрона й при гетеролізі C–H є найбільшими, а з Mn(+3) зростають значно більше, ніж з Mn(+2).

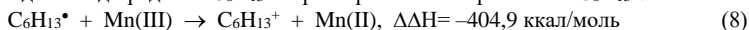
Є.С. Рудаков і співавтори кінетичних досліджень у цій системі запропонували існування радикала HSO₄^{*}, як активної частинки, що реагує з *n*-алканами. Результати підтверджують їхню гіпотезу. Оксидация Mn(III) ліганда HSO₄⁻ до HSO₄^{*} – найвигідніший маршрут (4), див. таблицю. Маршрути (4) і (5) для Mn(III) позначимо як механізм А:



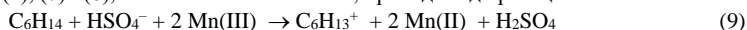
У цій роботі розглянуто механізм Б, в якому дві лімітуючі стадії, що конкурують. Перша – відрив марганцем(III) електрона, маршрут (2). Друга – перенос протона на HSO₄⁻:



У третій швидкій стадії радикал C₆H₁₃^{*} перетворюється в карбокатіон C₆H₁₃⁺:



Маршрути (2), (7) і (8), позначені як механізм Б, приводять до реакції:



з найбільшою за абсолютною величиною ΔΔH = –914,6 ккал/моль.

Механізм Б, в якому відрив H починається відривом електрона (2), а далі – реакції (7) та (8), значно вигідніший ніж механізм А, який починається відривом H-атома, як термодинамічно, так і кінетично, оскільки для реакцій *n*-алканів описує залежність вимірних констант швидкості як від потенціалу іонізації, так і від числа *втор*-C–H.

PREDICTION OF ENVIRONMENTAL TOXICITY FOR SERIES OF AMPHIPHILIC OXIMES USING GUSAR SOFTWARE

*Mikheenko V. M.*¹, Burakov N. I.², Serdyuk A. A.², Shumeiko A. E.^{2,3}, Kapitanov I. V.²

¹Donbas National Academy of Civil Engineering and Architecture, Kramatorsk, Ukraine

²L. M. Litvinenko Institute of Physical Organic and Coal Chemistry NASU, Kiev, Ukraine







³Institute of Organic Chemistry NASU, Kiev, Ukraine

vmmikheenko@gmail.com

Applications of amphiphilic compounds are very often connected with water systems and evaluation of possible environmental effects (e.g. *toxicity*) is important step on a way to eco-friendly compositions.

Using GUSAR software (<http://www.way2drug.com/gusar/environmental.html>) was performed analysis of potential environmental toxicity for series of amphiphilic oximes (Ib-IIIb) compared with non-functionalized analogs (Ia-IIIa) (see Tabl. 1). The used QSAR model was developed for the following endpoints: 96-hour fathead minnow 50 % lethal concentration, 48-hour daphnia magna 50 % lethal concentration, Tetrahymena pyriformis 50 % growth inhibition concentration and Bioconcentration Factor.

Table 1. Environmental toxicity for series of amphiphilic oximes (prediction by GUSAR)

Activity	Compounds					
						
	Ia	Ib	IIa	IIb	IIIa	IIIb
Bioaccumulation factor Log ₁₀ (BCF)	1,579	1,208	1,553	1,786	2,242	2,076
Daphnia magna LC50 -Log ₁₀ (mol/L)	4,321	5,208	5,175	5,934	5,179	5,918
Fathead Minnow LC50 Log ₁₀ (mmol/L)	-2,355	-2,951	-2,843	-3,492	-3,034	-3,556
Tetrahymena pyriformis IGC50 -Log ₁₀ (mol/L)	1,686	2,033	2,350	2,729	2,374	2,695

In all cases introduction of oxime group demonstrate significant influence on environmental toxicity of compounds Ia-IIIa / Ib-IIIb. The nature of cationic center also determinate observed tendencies.

МОДЕЛЮВАННЯ МОЛЕКУЛЯРНОЇ СТРУКТУРИ І РОЗРАХУНОК ФІЗИКО-ХІМІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОНЕНТІВ РОСЛИННОЇ СИРОВИНИ МЕТОДОМ КХР

Мощенко А. С., Чигиринець О. Е.

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», Київ, Україна
shakun.anastasiya.xd41@gmail.com

При дослідженні антиоксидантної властивості будь-якого рослинного екстракту важко передбачити основні сполуки антиоксидантної дії, в першу чергу за рахунок багатокомпонентного складу. Тому залишається не відомим, які із сполук, що входять до складу екстракту жмиху абрикосу, вносять найбільший внесок у його антиоксидантну здатність. Метою роботи є проведення прогностичної оцінки антиоксидантної здатності на основі розрахунку електронних та термодинамічних характеристик молекул.

Для визначення ефективної дії досліджуваних речовин за допомогою квантово-хімічних розрахунків (КХР) необхідно оптимізувати їх молекулярну структуру і визначити фізико-хімічні властивості: загальну енергію, електронні заряди на атомах. Для дослідження були використані наступні сполуки: хлорогенова кислота, кверцетин, епікатехін, катехін, бензойна кислота, галова кислота.

Фізико-хімічні параметри, включаючи H_f , енергію вищої зайнятої молекулярної орбіталі ($E_{ВЗМО}$) та енергію найнижчої незайнятої молекулярної орбіталі ($E_{НВМО}$), розраховували після проведення оптимізації геометрії та мінімізації енергії за допомогою напівемпіричного MNDO методу. Метод MNDO був обраний через його надійну точність. Значення H_f , $E_{ВЗМО}$ та $E_{НВМО}$ відповідних радикалів антиоксидантів розраховували за допомогою радикалів, отриманих субстракцією атома водню з належної фенольної гідроксильної групи.

ВЗМО містить електрони, таким чином, $E_{ВЗМО}$ демонструє електрондонорну здатність молекули. Значення $E_{ВЗМО}$ для сполук збільшуються в наступному порядку: хлорогенова кислота, кверцетин, епікатехін, катехін, бензойна кислота, галова кислота. З іншого боку, $E_{НВМО}$ характеризує електронно-акцепторну здатність сполуки. Значення $E_{НВМО}$ для сполук зменшуються в наступному порядку: хлорогенова кислота, бензойна кислота, галова кислота, кверцетин, епікатехін, катехін.

Малий енергетичний розрив між ВЗМО і НВМО збільшує антирадикальну активність. Енергетична щільна між ВЗМО та НВМО, також дає інформацію про її реактивність. Більша енергетична щільна вказує на нижчу хімічну реактивність та вищу кінетичну стійкість досліджуваних сполук. Значення енергетичного розриву для сполук збільшуються в наступному порядку: хлорогенова кислота, бензойна кислота, галова кислота, епікатехін, катехін, кверцетин.

Таким чином квантово-хімічні дескриптори, такі як твердість, електронегативність, індекс електрофільності, можуть давати важливу інформацію про антиоксидантну здатність досліджуваних сполук. Для наведених квантово хімічних характеристик спостерігається єдина закономірність: при зменшенні величини параметру збільшується реакційна здатність (антирадикальна активність) сполуки. Молекула, що характеризується низькою твердістю, електронегативності та індексом електрофільності класифікується як найбільш реакційна здатна молекула. З проаналізованих характеристик виходить, що сполука катехін має найбільш виражені антиоксидантні властивості.

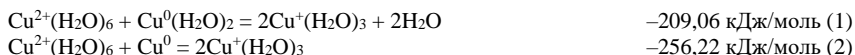
Також для порівняння були розраховані основні представники класу синтетичних антиоксидантів, такі як ВНА, ВНТ показали розраховані дескриптори на рівні натуральних антиоксидантів фенольної групи.

МОДЕЛЮВАННЯ РЕАКЦІЙ ДИСПРОПОРЦІОНУВАННЯ ІОНІВ КУПРУМУ В ПРИСУТНОСТІ МАЛЕЇНОВОЇ КИСЛОТИ У ВОДНОМУ РОЗЧИНІ

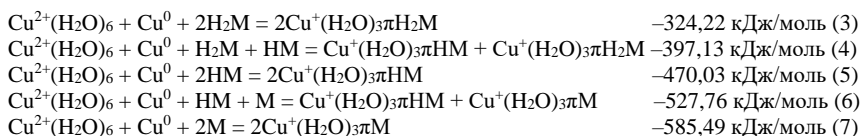
Осокин Є. С., Варгалюк В. Ф., Полонський В. А.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, Дніпро, Україна
osokin@cf.dnu.dp.ua

В попередній роботі [1] вивчались особливості будови та синтезу комплексів Купруму з малеїною кислотою (далі – МК). Представляло цікавість дослідити реакції комплексоутворення в процесі диспропорціонування іонів Купруму. Квантово-хімічні розрахунки виконані в програмі Gaussian 09, методика наведена в роботі [1]. Для порівняння моделювались реакції диспропорціонування аквакомплексів Cu^+ :



Утворення аквакомплексу $\text{Cu}^+(\text{H}_2\text{O})_3$ на 47 кДж/моль протікає більш енергетично вигідніше з дегідратованими атомами Cu^0 (2), тому ця реакція бралась за основу для подальшого моделювання реакцій комплексоутворення аквакомплексів Cu^+ з МК в різних дисоційованих (HM^- , M^{2-}), молекулярній (H_2M) формах та їх комбінаціях:



Було встановлено, що в незалежності від ступеня дисоціації малеїнової кислоти, в реакціях диспропорціонування у всіх випадках більш вірогідно утворюються комплекси Cu^+ координованими з молекулами МК за ($\text{C}=\text{C}$)-фрагментом, тобто π -комплекс. У розчині можуть протікати різні реакції диспропорціонування в залежності від співвідношення кількості молекулярних та дисоційованих форм МК, які в свою чергу будуть залежати від рівня кислотності водного середовища. За розрахованою діаграмою розподілення різних форм МК від рН (рис. 1), видно, що при рН $\sim 0-3$ може існувати молекулярна форма МК, а значить і протікання реакції (3) та (4) можливе лише в цьому діапазоні рН. При рН $\sim 4-6$ може протікати реакція (6). Слід зазначити, що при рН > 5 в рівновагу починають включатись іони OH^- . Реакція (7), незважаючи на значний енергетичний ефект не протікає, оскільки при рН ~ 8 повністю гідратовані іони Купруму не існують.

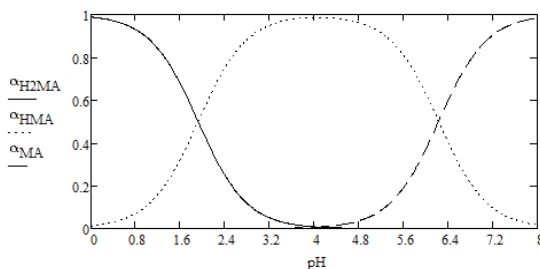


Рис. 1. Діаграма розподілення можливих форм МК від рівня рН

[1] Features of ($d\pi$ - π)-binding of Cu(I) ions with acrylic, maleic and fumaric acids in aqueous solution / V. F. Vargalyuk, Y. S. Osokin, V. A. Polonsky, V. N. Glushkov // Journal of Chemistry and Technologies. – 2019. – Vol. 27, No. 2. – P. 148–157.

ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ DFT ДЛЯ ОПТИМІЗАЦІЇ ГЕОМЕТРІЇ РАДИКАЛУ І МОЛЕКУЛИ N-ГІДРОКСИФТАЛІМІДУ

Шмирко О. В., Мельниченко В. І., Шендрік О. М.

Донецький національний університет імені Василя Стуса

вул. 600-річчя, 21, 21021 Вінниця, Україна

shmyrko.o@donnu.edu.ua

Интерес дослідників до N-гідроксифталіміду (PINOH) пов'язаний з його використанням як каталізатора в процесах окиснення вуглеводнів. Одним із етапів цього радикально-ланцюгового процесу окиснення є перенесення атому Гідрогену від субстрату на фталімід-N-окисильний радикал (PINO). Вивчення реакційної здатності PINO є важливою задачею для передбачення каталітичної активності N-гідроксифталіміду.

Метою даної роботи був розрахунок величини енергії дисоціації зв'язку (BDE) OH в молекулі N-гідроксифталіміду методом DFT з використанням функціоналу B3LYP. Розрахунки проводили у пакеті програм GAMESS (US) у розширеному базисі 6-31G (з додаванням поляризаційних і дифузних функцій) з використанням необмеженого методу Хартрі-Фока (UHF). Розрахунок BDE зв'язку (Hарту) був виконаний за формулою ($1 \text{ Hartry} = 627,51 \text{ ккал/моль}$):

$$\text{BDE} = (E_{\text{Total Energy PINO}} + E_{\text{H atom}}) - E_{\text{Total Energy PINOH}}$$

Отримані дані представлені в Таблиці.

Таблиця. Величини загальних енергій і BDE радикала і молекули N-гідроксифталіміду

Pol., diffuse function	Total Energy (PINOH)	Total Energy (PINO)	E, H-atom (+1H)	BDE, AU (Hарту)	BDE, ккал/моль
o	-587,751	-587,131	-0,498	0,122	76,8
p	-587,772	-587,140	-0,498	0,133	83,5
2p	-587,774	-587,141	-0,498	0,135	84,5
2p+	-587,776	-587,094	-0,498	0,184	115
3p	-587,778	-587,142	-0,498	0,137	85,9
pd	-587,942	-587,313	-0,498	0,131	81,9
pd+	-587,944	-587,264	-0,498	0,182	114
2pd	-587,944	-587,314	-0,498	0,132	82,6
2pd+	-587,946	-587,265	-0,498	0,183	115
2pdf	-587,978	-587,347	-0,498	0,133	83,2
2pdf+	-587,980	-587,298	-0,498	0,184	115
2p2df	-587,998	-587,367	-0,498	0,132	83,1
3p2df	-580,000	-587,368	-0,498	0,133	83,7
3p3df	-588,011	-587,380	-0,498	0,133	83,5

Встановлено, що при поступовому додаванні поляризаційних функцій (p;d:f) і дифузної функції (s) для PINOH та поляризаційних функцій (p;d:f) для PINO загальна енергія системи зменшується. Аналіз показав, що при додаванні поляризаційних функцій p та d величини загальної енергії PINOH і PINO змінюються несуттєво, а при додаванні дифузної функції (s) спостерігається збільшення загальної енергії для PINO та BDE.

**MEDICINAL AND
PHARMACEUTICAL CHEMISTRY /
МЕДИЧНА ТА
ФАРМАЦЕВТИЧНА ХІМІЯ**

HIGH-SENSITIVE MONOMETHINE CYANINE DYES AS FLUORESCENT PROBES FOR NUCLEIC ACID DETECTION AND VISUALIZATION

*Aristova D.*¹, Kosach V.¹, Chernii S.¹, Slominskii Yu.², Yarmoluk S.¹, Mokhir A.³, Kovalska V.^{1,4}

¹Institute of Molecular Biology and Genetics NASU, Kyiv, Ukraine

²Institute of Organic Chemistry NASU, Kyiv, Ukraine

³Friedrich-Alexander University Erlangen-Nürnberg (FAU), Department of Chemistry and Pharmacy, Organic Chemistry Chair II, Erlangen, Germany

⁴Scientific Services Company Otava Ltd, Kyiv, Ukraine

dar.arist@gmail.com

Fluorescent dyes are small compounds that exhibit favorable optical properties, such as brightness, photostability, and narrow bandwidth relative to fluorescent proteins. They can be designed to be membrane permeable to illuminate intracellular milieu or membrane impermeable to report extracellular structures. Thus, the aim of the research is to study the new series of monomethine cyanine dyes with different substituents as fluorescent probes for nucleic acids *in vitro* detection and visualization in microscopy. Fluorescence spectroscopy, fluorescence and confocal microscopies were used to characterize spectral-luminescent properties of studied dyes.

The studied dyes possess low fluorescence intensity in the aqueous buffer. All dyes give a stronger response in the RNA presence compared to DNA. The binding to nucleic acids also results in a significant increase in fluorescence intensity of the studied dyes. We have observed that benzoxazole quinoline dye SI-2598 and benzothiazole quinoline dye SI-2000 possesses the most significant spectral response on nucleic acids presence.

Thus, we believe these dyes could be sensitive to organelles containing nucleic acids. To prove our suggestion, we have performed staining of live and fixed cells by fluorescence microscopy. We have found that all dyes proved to be membrane-permeant and stain the sub-cellular components in live cells. Moreover, all studied dyes penetrate the nuclear membrane and stain large structures within the nucleus, which are most probably nucleoli. We have used antibodies against Ki-67 protein for a co-localization analysis of dye SI-2000 using confocal laser scanning microscopy (CLSM) to investigate this possibility. Thus, the co-localization data analysis indicates the localization of the benzothiazole quinoline cyanine dye SI-2000 in nucleoli with antibodies against Ki-67 (Fig. 1). We have also studied the photostability of SI-2000 (its photobleaching). It was shown that under direct irradiation, SI-2000 retains fluorescent staining stability in the nucleoli for 1 minute 30 seconds.

Due to the high sensitivity to ribonucleic acid and good photostability, benzothiazole quinoline cyanine SI-2000 is suggested as an efficient high-sensitive stain for nucleoli visualization in live and fixed cells.

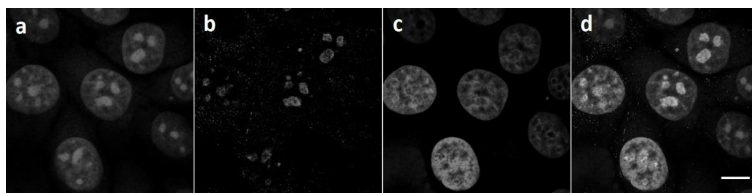


Fig. 1. CLSM images of colocalization of SI-2000 dye with antibodies against Ki-67 protein in MCF-7 cells. (a – studied dye SI-2000, b – antibodies against Ki-67 protein, c – Hoechst, d – merged channel of SI-2000, antibodies against Ki-67 and Hoechst).

Scale bars = 10 μm

This work was supported by the grant H2020-MSCA-RISE N872331.

ГЛИНИ ЯК АКТИВНА СКЛАДОВА КОСМЕТИЧНИХ ЗАСОБІВ*Бакаєва О. Д., Паєнтко В. В., Матковський О. К., Шунков В. С.*

Вінницький національний медичний університет ім. М. І. Пирогова, Вінниця, Україна

Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка, Київ, Україна

olya.bakaieva@gmail.com

Глини використовуються в сучасній медичній та фармацевтичній практиці у якості адсорбційних матеріалів, аплікацій і пов'язок, кровоспинних засобів, стоматології та дерматології. Таке широке використання зумовлене наявністю активних центрів на поверхні, мінералогічним складом, термічними характеристиками та абразивними властивостями.

Об'єкти дослідження: каолін, рожева та біло-блакитна глини були взяті через їх попит на ринку та для перевірки їх у якості активної складової косметичних засобів.

Метою нашого дослідження було визначення характеристик біло-блакитної, рожевої глин та каоліну, які важливі для створення матеріалів косметичного призначення (гідрофільності, взаємодія з барвниками, кислотно-основні властивості та морфологія поверхні).

Методи: визначення водопоглинання, кислотно-основних властивостей 2 % середовища суспензій біло-блакитної, рожевої глин та каоліну, визначення набрякання глин у воді та морфології поверхні глин, діагностичне визначення складу глин методом часткового забарвлення

В ході даного дослідження було підтверджено, що зразки рожевої, біло-блакитної глин та каоліну відносяться до групи каолінових. Було виявлено слабко кисле рН (5–6) середовища суспензій даних глин, що добре підходить під слабко кисле рН середовища епідермісу, що в свою чергу коливається від 4 до 6. Структура даних глин пластинчаста.

Виявлені властивості досліджуваних глин вказують на можливість використання їх як активної складової косметичних засобів, проте вони потребують додаткових досліджень на перевірку сумісності з іншими компонентами, що використовуються у косметичних засобах.

FLUORESCENCE STUDY OF THE EFFECT OF SILVER NANOPARTICLES ON INSULIN AMYLOID FIBRIL FORMATION

*Vus K. O.*¹, Tarabara U. K.¹, Gorbenko G. P.¹, Zhytniakivska O. A.¹, Trusova V. M.¹,
Pirko Y. V.², Turchenko V. A.³

¹V. N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine

²Institute of Food Biotechnology and Genomics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine

³National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute",
Kyiv, Ukraine

kateryna.vus@karazin.ua

Silver nanoparticles (AgNPs) have been the most thoroughly investigated nanomaterials over the past decades due to its high antibacterial, antifungal and catalytic activities. AgNPs have been applied in water purification systems, in the food and clothing industries, in biomedicine, e.g. as drugs against antibiotic resistant bacteria, for DNA/RNA detection via specific probes, etc. Chemical and optical properties of AgNPs are tunable, depending on size and shape of nanosilver, which are determined by the method of synthesis. In turn, using AgNPs as biological agents desires application of the principles of "green chemistry", leading to an eco-friendly and cheap fabrication process. Among the nanofactories capable of forming "ecology clean" AgNPs, fungi are better than plants and bacteria due to the easier large-scale production of nanosilver. Despite a huge number of AgNPs have been formed using fungi, further investigations are needed to establish a correlation between the method of synthesis (including type of fungi, concentration of fungi and AgNO₃, temperature, purification conditions) and the physico-chemical properties of nanosilver, that is necessary for the functionalization of AgNPs. One of the important and poorly studied area of potential applications of AgNPs is inhibition of amyloid fibril formation that is the early marker of the development of the severe human disorders, including Alzheimer's disease, Parkinson disease, systemic amyloidosis, etc. Amyloid fibrils are highly ordered insoluble protein aggregates, deposited in a variety of organs and tissues in over 20 human diseases. The present study was aimed at testing the potential of the novel AgNPs, referred to here as QD1, QD2, QD3, QD4, QD5, QD6, QD7 and QD8, which were synthesized extracellularly by reduction of Ag⁺ in the genus *Pleurotus* fungi aqueous extracts, to inhibit insulin amyloid fibril formation *in vitro*. The X-ray diffraction and TEM analysis showed that most of the AgNPs were ~10 nm in diameter, while dynamic light scattering and zeta-potential measurements suggested the aggregation stability of these colloidal systems. Absorption peaks of the AgNPs were within the range of 406–430 nm, although the nanoparticles showed weak fluorescence intensities at ~590–630 nm both in the absence and in the presence of insulin amyloid fibrils (InsF). Next, the kinetics of InsF amyloid formation (at 52 °C, pH 7.4, under linear shaking) was monitored using the Thioflavin T (ThT) assay, revealing that at low concentration of the AgNPs, corresponding to the absorbance values of 0.006 and 0.03, the ThT fluorescence intensity at 480 nm reached a plateau after 18 h. Furthermore, the final ThT intensity values were ~2 orders of magnitude higher than those before protein incubation, suggesting the absence of any inhibition effect of the AgNPs on the insulin fibrillization. In turn, at higher absorbance values of the AgNPs (0.1–0.5), the final ThT fluorescence intensity was 2–3 times weaker, as compared to that in the control sample (in the absence of the AgNPs). Furthermore, presence of QD2 in the insulin sample incubated at 37 °C, pH 7.4, under linear shaking, led to the ~1.3-fold increase in the lag time of the fibril formation, suggesting that insulin interactions with QD2 (most likely, with the QD2 capping proteins) induced retardation of the amyloid nucleation process. Overall, our study, revealing the ability of the AgNPs to inhibit insulin amyloid fibrillization *in vitro*, can be useful for the development of the anti-amyloid drugs based on the AgNPs.

ВЗАЄМОДІЯ ОРНІДАЗОЛУ З НАТИВНИМ ТА ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНИМИ КРЕМНЕЗЕМАМИ

*Gaidai A. P.*¹, Дем'яненко С. М.², Фуртат І. М.¹, Вакулук П. В.¹, Козакевич Р. Б.²,
Мурланова Т. В.¹, Лобанов В. В.², Тьортих В. А.²

¹Національний університет «Кієво-Могилянська академія», Київ, Україна

²Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка НАН України, Київ, Україна
alina.gaidai@ukma.edu.ua

На основі композитів різноманітних антимікробних речовин з неорганічними носіями, що мають високу дисперсність і розвинену питому поверхню, в сприятливих випадках можна створити сучасні наногібридні матеріали комплексної дії, що поєднують лікувальну дію активного компонента з високою адсорбційною здатністю носія, зокрема нанокремнезему. Окрім того, необхідно враховувати, що адсорбція антимікробних сполук може бути одним із ефективних способів створення лікарських препаратів пролонгованої дії з контрольованим виділенням активного компонента, а також дозволяє підвищити біодоступність малорозчинних лікарських засобів і забезпечити синергічний ефект. Своєю чергою, усі зазначені особливості потребують детального експериментального вивчення, насамперед взаємодії нанокompозитних матеріалів на основі кремнезему з конкретними біомолекулами і/чи лікарськими препаратами різних класів. Окрім того, сукупне застосування методів теоретичного моделювання та експериментальних досліджень за умов *in vitro* дозволяє раціонально проектувати геометрію наночастинок носіїв з метою створення ефективних систем контрольованої доставки лікарських засобів до клітин-мішеней. З огляду на викладене вище метою роботи було дослідження особливостей взаємодії орнідазолу з нативним та функціоналізованим (аміновий і метильований) кремнеземом, із використанням квантово-хімічних розрахунків і методу ІЧ-спектроскопії. Комплексні дослідження з використанням квантово-хімічних розрахунків і методу ІЧ-спектроскопії засвідчують, що механізм взаємодії орнідазолу з нативним та функціоналізованими кремнеземами полягає в утворенні водневих зв'язків між атомом Оксигену силанольної групи поверхні кремнезему і атомом Гідрогену гідроксильної групи молекули орнідазолу. У випадку взаємодії з амінованою матрицею зв'язок також виникає між атомом Нітрогену аміногрупи поверхні та орнідазолом. Формування ж комплексу орнідазолу з метильованою матрицею відбувається за рахунок дисперсійних (гідрофобних) взаємодій, якщо силанольні групи замінені триметилсилільними. З'ясовано, що найбільша енергія адсорбції орнідазолу притаманна нативному кремнезему (-87,5 кДж/моль), трохи менша енергія відмічена на амінокремнеземі -85,2 кДж/моль, тоді як кремнезем з метильними групами на поверхні характеризувався найменшою енергією адсорбції. Найактивнішою щодо взаємодії з силанольною групою кремнезему в молекулі орнідазолу є ОН-група, що утворює водневий зв'язок з силанольною групою кремнезему. Також не виключено одночасне утворення водневих зв'язків силанолів і з іміно та нітро групами орнідазолу. Порівняння ІЧ-спектрів нанокompозитів, після десорбції орнідазолу упродовж 24 год дозволило встановити, що найвищий ступінь вивільнення активної речовини властивий нанокompозитам, створеним на основі нативної, амінованої та частково метильованої (вміст - CH₃ груп на поверхні 30 %) матриці. У нанокompозитах, створених на основі метильованих матриць з вищим вмістом функціональних груп (83 і 100 %), спостерігається зниження вимивання активної речовини, що пояснюється гідрофобізацією поверхні носія.

**MEROCYANINES AS FLUORESCENT PROBES FOR THE DETECTION
IN MICROSCOPY**

Chernii S. V.¹, Syniugina A. T.¹, Syniugin A. R.¹, Losytskyy M. Yu.¹, Slominskii Yu. L.²,
Yarmoluk S. M.¹, Mokhir A. A.³, Kovalska V. B.^{1,4}

¹Institute of Molecular Biology and Genetics NASU, Kyiv, Ukraine

²Institute of Organic Chemistry NASU, Kyiv, Ukraine

³Friedrich-Alexander University Erlangen-Nürnberg (FAU), Erlangen, Germany

⁴Scientific Services Company Otava Ltd, Kyiv, Ukraine
asyniugina@gmail.com

Nowadays, the study of the drug distribution in cells is becoming an increasingly actual method of biomedical research. Far-red fluorescent probes are highly applicable due to certain advantages such as minimum photo-damaging of biological samples, high tissue penetration and allow imaging with minimal to no autofluorescence. The aim of the research was to study the novel series of far-red merocyanine dyes containing modified polymethine bridges by fluorescence microscopy.

Studied dyes are low to moderate fluorescent when free. The maxima of excitation spectra are located at 624–714 nm with the fluorescence emission maxima lie in the far-red area of the spectrum between 644–730 nm. The fluorescence intensity of all dyes increases in number of times in the presence of bovine, human and equine albumins. The equilibrium constant of dye binding with HSA (binding constant, K_b) was determined for the most promising merocyanine based on experimental measurements of the fluorescence intensity of the dye with increasing amounts of HSA. Based on the titration curve, the binding constant of dye to HSA was estimated to be $K_b = (1.2 \pm 0.1) \cdot 10^5 \text{ M}^{-1}$. The protein detection range of HSA for this dye monotonically increases from 0.007 to 4 mg/ml, which indicates the high sensitivity of the dye to this protein at low concentrations. The quantum yield value was 31 % in the presence HSA comparing to 2 % for the free dye.

To study the ability of merocyanine dyes to penetrate cell membrane, human ovarian cancer cell line A2780 were used. Fluorescence microscopy revealed that the studied dyes able to pass through biological membranes and stain the cell components in cytoplasm. Both dyes are not accumulated in nuclei as shown by co-staining with Hoechst 33342: no co-localization with nuclear DNA dye is observed. Co-staining of the studied dyes with Rhodamine 123 (a dye specific for mitochondria), was carried out to understand the organelle-specificity of the dyes. The subsequent colocalization analysis indicate that the studied dyes colocalize very poorly with the Rhodamine 123.

The lack of specificity of dyes to some specific components of the cell (for example, mitochondria) may be an advantage for this class of compounds in their use as labels for studying the drugs distribution.

This work was supported by the grant H2020-MSCA-RISE N872331.

**INORGANIC CHEMISTRY /
НЕОРГАНІЧНА ХІМІЯ**

СИНТЕЗ ТА СТЕРЕОХІМІЧНІ ОСОБЛИВОСТІ ТАРТРАТОСТАННАТІВ 1,10-ФЕНАНТРОЛНОВИХ КОМПЛЕКСІВ Fe(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II)

Афанасенко Е. В.

Кафедра прикладної хімії та хімічної освіти,
Одеський національний університет ім. І. І. Мечникова,
вул. Дворянська, 2, 65082, Одеса, Україна
afanasenkoeleonora@gmail.com

Координаційні сполуки біологічно активних металів та органічних полідентатних лігандів на сьогоднішній день вважаються найперспективнішими для створення нових ефективних нетоксичних лікарських засобів широкого спектру дії. В результаті систематичних досліджень в галузі біокоординаційної хімії, що проводяться під керівництвом д.х.н. проф. з.д.н.т. України І.Й. Сейфулліної було хімічно сконструйовано ряд комплексних гетерометальних сполук електронних аналогів германію та олова з гідроксикарбоновими кислотами та N,O-вмісними гетероциклічними лігандами. Встановлено, що сполуки відносяться до нетоксичних, виявляють широкий спектр фармакологічної дії: антивірусну, антигіпоксичну, імуностимулюючу, антиоксидантну, нейротропну та протизапальну. Оригінальним методом *in situ* вперше було одержано стійкі у водному розчині тартратостаннатні кислоти як проміжні продукти, які взаємодіють з 1,10-фенантроліновими (phen) комплексами Fe^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} . Із реакційного середовища в твердому стані виділено ізоструктурні координаційні сполуки катіон-аніонного типу спільної формули $[Me(phen)_3]_2[Sn_2(\mu-Tart)_2(H_2Tart)_2] \cdot xH_2O$, Me = Fe (1), Co (2), Ni (3), Cu (4), Zn (5) – тартратна кислота, що існують у вигляді полігідратів ($x=2/8/2/2/6$ молекул води в структурах 1–5 відповідно).

В комплексному аніоні $[Sn_2(\mu-Tart)_2(H_2Tart)_2]^{4-}$ два атоми Sn зв'язані з повністю депротонованими карбоксильними і гідроксильними групами двох тетрадентатних хелатних місткових лігандів $Tart^{4-}$. До кожного атому Sn додатково бідентатно координується термінальний H_2Tart^{2-} з однією депротонованою карбоксильною та однією гідроксильною групою. Координаційний поліедр обох атомів Sn – октаедр (Рис.). Заряд комплексного аніону компенсується двома катіонами $[Me(phen)_3]^{2+}$, координаційний поліедр Fe (1), Co (2), Ni (3), Cu (4), Zn (5) – октаедр.

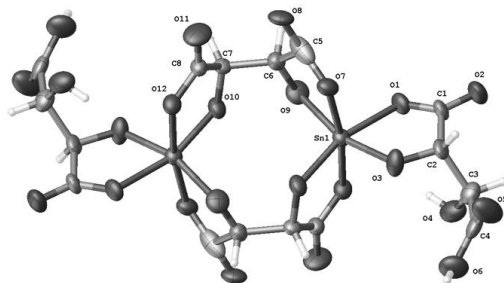


Рис. Молекулярна структура комплексного аніона $[Sn_2(\mu-Tart)_2(H_2Tart)_2]^{4-}$

Аніони, катіони та молекули води утворюють шари, що чергуються, паралельні кристалографічним площинам у структурах 1–5. Ці шари можна розділити на два типи: 1) такі, що містять аніони та молекули води, зв'язані водневими зв'язками; 2) шари, що містять лише катіони.

Кристалізація п'яти ізоструктурних комплексів підтверджує закономірний характер їх утворення, незалежно від електронної будови атома d-металу.

СИНТЕЗ ТА СПЕКТРАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ БІАДЕРНИХ КОМПЛЕКСІВ ЛАНТАНОЇДІВ З БІС-ХЕЛАТУЮЧИМ САФ ЛІГАНДОМ ТА ФЕНАНТРОЛІНОМ

Варжель Н. Р., Олишевець І. П.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка
01601, Київ, вул. Володимирська, 64/13, Україна
Varzhel13@gmail.com

Незгасаючий інтерес до координаційних сполук лантаноїдів обумовлений численними можливостями застосування даних комплексів як електролюмінесцентних матеріалів для органічних світлодіодів (OLED), функціональних матеріалів для біологічних і медичних досліджень. Тому актуальною постає проблема пошуку ефективних лігандних систем, здатних якомога яскравіше проявити ті чи інші властивості йонів лантаноїдів. Перспективними у цьому напрямку є поліхелатуючі ліганди сульфоніламідодосфатного (САФ) типу, здатні утворювати стабільні біадерні комплекси з корисними фізико-хімічними властивостями.

В даній роботі було синтезовано ряд нових біадерних координаційних сполук лантаноїдів загальної формули $[Ln_2L_3phen_2]$ ($Ln = La, Eu, Nd, Tb$) на основі *bis*-хелатуючого САФ ліганда (Рис. 1), які були охарактеризовані методами елементного та термогравіметричного аналізу, ЯМР (1H), ІЧ та електронної спектроскопії.

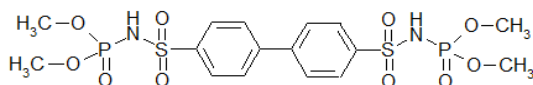


Рис. 1. Тетраметил[біфеніл-4,4'-діілди(сульфоніл)]діамідофосфат (H_2L)

На основі даних ІЧ та електронної спектроскопії було встановлено, що КЧ центрального йону у синтезованих комплексах дорівнює 8 та запропоновано бідентатно-циклічну координацію САФ лігандів через атоми кисню фосфорильної та сульфонільної груп.

У ПМР спектрі діаманітного комплексу $[La_2L_3phen_2]$ крім сигналів, віднесених до протонів сульфоніламідодосфатного ліганду з'являються додаткові сигнали, що відповідають протонам 1,10-фенантроліну. Аналіз інтегральних інтенсивностей сигналів вказує на мольне співвідношення $(L)^- : phen$, що дорівнює 3 : 2 і відповідає запропонованому складу координаційної сполуки.

Вигляд тонкої структури надчутливих переходів в електронному спектрі комплексу неодиму є характерним для координаційного числа 8. Єдина смуга поглинання в області переходу $^4I_{9/2} \rightarrow ^2P_{1/2}$ (425 – 435 нм) свідчить про присутність в розчині комплексних частинок лише одного типу (Рис. 2).

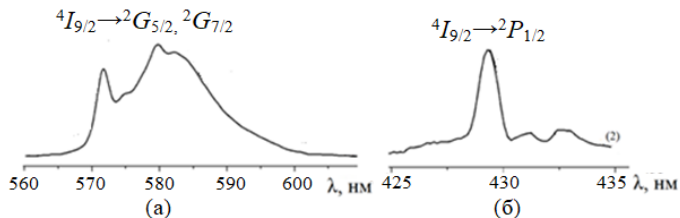


Рис. 2. Електронні спектри поглинання розчину комплексу $[Nd_2L_3phen_2]$ в метанолі в області переходу $^4I_{9/2} \rightarrow ^4G_{5/2}, ^2G_{7/2}$ (а) та $^4I_{9/2} \rightarrow ^2P_{1/2}$ (б)

СИНТЕЗ ФАЗИ α -ZnMoO₄: ПОРІВНЯННЯ ТРАДИЦІЙНОГО
ТА УЛЬТРАЗВУКОВОГО МЕТОДІВ

*Діюк Н. В.*¹, Сачук О. В.², Діюк О. А.², Зажигалов В. О.²

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка

01601, Київ, вул. Володимирська, 64/13, Україна

²Інститут сорбції та проблем ендоскопії НАН України

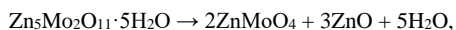
03164, Київ, вул. Генерала Наумова, 13, Україна

nvdiiuk@gmail.com

ZnMoO₄ є перспективним матеріалом, що може використовуватись як анодний матеріал для літій іонних батарей, демонструє високі каталітичні показники в реакції утворення ацетальдегіду з біоетанолу, входить до складу матеріалів газових сенсорів, фотолюмінісцентних пристроїв тощо. Також ця фаза застосовується як добавка – пригнічувач диму для виробів з ПВХ та антикорозійна добавка у фарбах.

Метою даної роботи є порівняння двох методів одержання ZnMoO₄ – синтезу з солей методом співосадження та синтезу з оксидів ультразвуковим методом.

1. Традиційний синтез (співосадження) є найбільш широкоживим. Наважки солей (NH₄)₆Mo₇O₂₄·4H₂O (2.354 г) та Zn(NO₃)₂·6H₂O (3.959 г), взяті в еквімолярному співвідношенні Mo-Zn, розчинили у воді, а одержані розчини змішали. Додали розчин аміаку – до випадіння осаду, а потім розчин азотної кислоти до нейтрального середовища. Для видалення домішок осад протягом декількох днів відмивали дистильованою водою (п'ятикратне додавання по 200 мл) і сушили при 100 °С. РФА одержаного зразка показав наявність фази складу Zn₅Mo₂O₁₁·5H₂O (JCPDS 00-030-14-86), а після її прогріву до 300 °С, на рентгенограмі спостерігається фаза α -ZnMoO₄ (JCPDS 00-035-0765) без будь-яких домішок. Методом ТГА встановлено, що за температури 260 °С дійсно відбувається виділення кристалізаційної води у кількості 10 %, що задовільно узгоджується з теоретично визначеною (11.4 %) кількістю води в Zn₅Mo₂O₁₁·5H₂O. Разом з тим, розкладання кристалогідрату має перебігати за рівнянням:



в результаті чого повинен утворитися ZnO. Тому, синтезований в такий спосіб ZnMoO₄ повинен містити домішкову фазу ZnO, яка є рентгеноаморфною і не реєструється РФА. На СЕМ фотографії зразка ZnMoO₄, отриманого методом співосадження, присутні частинки двох типів: голкоподібні структури, характерні для ZnMoO₄, та сферичні, характерні для ZnO.

2. Ультразвуковий (УЗ) синтез є альтернативний методом. До еквімолярної суміші оксидів MoO₃ (6,39 г) та ZnO (3,61 г) додавали 80 мл H₂O та поміщали у диспергатор УЗДН-А. Синтез проводили протягом 20 хв. за кімнатної температури. РФА одержаного зразка показав наявність фази ZnMoO₄·0,8H₂O (JCPDS 00-025-1025). Методом ТГА встановлено, що кристалізаційна вода видалється за температури 260 °С і утворюється фаза α -ZnMoO₄ без будь яких домішок згідно з РФА. Втрата маси складає 6 %, що відповідає теоретично розрахованому вмісту кристалізаційної води у ZnMoO₄·0,8H₂O. Методом СЕМ встановлено наявність голкоподібних частинок, характерних для α -ZnMoO₄, а методом ЕДС доведено еквімолярне співвідношення металів (Zn-Mo) в об'ємі синтезованого зразка.

Отже, на відміну від методу спів осадження солей, УЗ обробка оксидів дозволяє отримати чистий α -ZnMoO₄ без будь-яких домішок і значно скорочує час проведення синтезу. Ще одним недоліком методу співосадження є необхідність використання великої кількості води (в 100 разів більше), яка в процесі відмивання забруднюється токсичними сполуками.

СИНТЕЗ ПАРАВОЛЬФРАМАТУ Б-КАДМІЮ

Дремлюга А. В., Дуванова Е. С., Кордиш О. М., Радіо С. В., Розанцев Г. М.
Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна
dremluha.a@donnu.edu.ua

Ізополівольфрамат *d*-металів синтезують або за обмінною реакцією з відповідних ізополіаніонів, або в результаті самозборки в підкислених до потрібної величини кислотності ($Z = C(H^+) / C(WO_4^{2-})$) водних розчинах. Останній спосіб синтезу є більш простим, недовготривалим, мінімально енерговитратним і не потребує попередньої кристалізації солі лужного металу або амонію з ізополіаніоном. Якщо врахувати той факт, що області існування ізополіаніонів досить протяжні, то синтези можна проводити в широкому інтервалі рН розчину, який задається різною величиною кислотності *Z*.

Відомо, що паравольфрамат-аніони з різним ступенем протонування $[H_nW_{12}O_{40}(OH)_2]^{(10-n)-}$ утворюються в розчинах з кислотністю від 1,00 до 1,40 у випадку $n \leq 3$: $Z = 1,17$ $n = 0$; $Z = 1,25$ $n = 1$; $Z = 1,33$ $n = 2$; $Z = 1,42$ $n = 3$. Таку стехіометрію вихідних речовин реакції $12WO_4^{2-} + (14+n)H^+$ і солі що в ній утворюється вже досліджено для $Z \geq 1,17$, тоді як питання про інтервал $1,0 \leq Z \leq 1,17$ ще залишається не з'ясованим.

Методом рН-потенціометричного титрування із наступним моделюванням за допомогою програми CLINP 2.1 показано, що в розчині, в якому крім ортовольфрамат-аніонів присутні катіони кадмію у мольному співвідношенні $C(Cd^{2+}) : C(WO_4^{2-}) = 1 : 6$, зберігаються протоновані паравольфрамат-аніони, тоді як очікувані аніони будови Андерсона не були зафіксовані. Крім того показано, що в розчині присутні йонні пари типу $Cd^{2+}(CdOH^+)$, $[H_nW_{12}O_{40}(OH)_2]^{(10-n)-}$.

Для підтвердження результатів моделювання проведено синтез за кімнатної температури, для цього водний розчин натрію вольфрамату підкисляли оцтовою кислотою ($Z = 1,00$) та додавали розчин кадмію (II) нітрату при інтенсивному перемішуванні: $C(Na_2WO_4) = C(CH_3COOH) = 0,1$ (моль/л); $C(Cd(NO_3)_2) = 1,6667 \cdot 10^{-2}$ (моль/л). В результаті через 12 годин було помічено утворення безбарвної солі, голчастого габітусу. Осад витримували за кімнатної температури ще протягом трьох днів для укрупнення. Хімічним аналізом було показано, що їй відповідає молекулярна формула $Na_2[Cd_4W_{12}O_{40}(OH)_2] \cdot 10,5H_2O$. Паравольфрамат Б-аніон в складі солі ідентифіковано методом ІЧ-спектроскопії.

**ВИВЧЕННЯ ПРОЦЕСІВ ФАЗОУТВОРЕННЯ В ТВЕРДИХ РОЗЧИНАХ
НА ОСНОВІ $ZnAl_2O_4$ ІЗ СТРУКТУРОЮ ШПІНЕЛІ***Іванов О. В., Фесич І. В., Неділько С. А.*Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, Україна
snedilko@ukr.net

Алюмінат цинку ($ZnAl_2O_4$) є типовим широкозонним напівпровідником (оптична ширина зони 3,8 еВ, що вказує на те, що він прозорий для світла, що має довжини хвиль ~ 320 нм). $ZnAl_2O_4$ привернув значну увагу завдяки цінним функціональним властивостям, таким як висока механічна стійкість і термостійкість, високі квантові виходи та низька кислотність поверхні.

Нанопорошки $ZnAl_2O_4$ з частковим заміщенням іонів Al^{3+} на Fe^{3+} синтезовано методом золь-гель автогоріння. Як вихідні компоненти було використано водні розчини нітратів цинку, алюмінію та заліза, як гелеутворювач – лимонну кислоту. Мольне співвідношення нітратів металів та лимонної кислоти становило 1:1. рН отриманого прозорого розчину доводили до 7 додаванням 25 % розчину аміаку, оскільки вище рН = 6 лимонна кислота існує переважно у формі іонів $HCit^{2-}$ і Cit^{3-} , що сприяє кращому комплексоутворенню іонів металів. Гомогенний розчин світло-жовтого кольору нагрівали при 70...80 °С з постійним перемішуванням впродовж 2 годин і випаровували. Потім температуру підвищували до 120...150 °С, ініціюючи самозаймання висушеного в'язкого гелю. Після завершення процесу горіння сірий аморфний порошок поміщали в алундовий тигель та прожарювали при температурі 500 °С впродовж 2 годин зі швидкістю нагрівання 5 °С/хв для отримання серії зразків $ZnAl_{2-x}Fe_xO_4$. У процесі автогоріння гелю окрім цільового алюмінату цинку відбувається виділення газоподібних продуктів CO_2 , H_2O та N_2 , що забезпечує додаткове розпушування кінцевого продукту та формування розвинутої поверхні.

На дифрактограмах досліджуваних зразків при кімнатній температурі зафіксовано два синглетні піки з кратними індексами: рефлекс I з індексами Міллера (220) при $2\theta_I = 31.310^\circ$ та рефлекс II з індексами Міллера (440) при $2\theta_{II} = 65.325^\circ$.

Відомо, що відношення напівширини рентгенівських ліній β_{II}/β_I , які являють собою два різних порядки відбиття від однієї кристалографічної площини, наприклад, (220) та (440) – для кубічної шпінельної комірки, знаходиться між співвідношеннями $\cos\theta_I/\cos\theta_{II} < \beta_{II}/\beta_I < \text{tg}\theta_{II}/\text{tg}\theta_I$. На підставі виконання рівності $\beta_{II}/\beta_I \approx \text{tg}\theta_{II}/\text{tg}\theta_I$ або $\beta_{II}/\beta_I \approx \cos\theta_I/\cos\theta_{II}$ роблять висновок про причини уширення рефлексів – мікродеформації гратки або розмірний ефект кристалітів. Згідно з проведеними розрахунками, значення співвідношення β_{II}/β_I для всіх складів знаходиться між співвідношенням косинусів та тангенсів відповідних кутів відбиття, що свідчить про вплив на ширину рентгенівських ліній як розмірів розсіюючих кристалітів, так і мікродеформацій.

За результатами проведеного фазового аналізу знайдено, що вже при 500 °С відбувається утворення однофазної кубічної шпінелі (пр. гр. $Fd3m$) з параметром елементарної комірки $a = 8.0741(1)$ Å. Розмір областей когерентного розсіювання, розрахований за формулою Дебая-Шеррера, не перевищує 50 нм.

Встановлено, що процес горіння нітрат-цитратного гелю можна розглядати як термічно індуковану окисно-відновну реакцію, при якій цитрат-іони діють як відновник, а нітрат-іони – виступають як окисник. Завдяки присутності іонів NO_3^- , які забезпечують розкладання органічних компонентів, швидкість реакції окиснення значно зростає. В результаті цього виділяється достатня кількість енергії для формування фази шпінелі при досить низьких температурах (500 °С).

**THERMAL BEHAVIOUR OF COBALT(II) DIHYDROGENPHOSPHATE
TETRAHYDRATE***Korechko S. A.*, Anraptseva N. M.National University of Life and Environmental Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine
aspirant_nubipu@ukr.net

Heat treatment of crystal hydrates is one way to obtain anhydrous salts. This process in many respects is defined by extent of hydration of crystalline hydrate. The thermal transformation of cobalt(II) dihydrogenphosphate dihydrate $\text{Co}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ have been determined. Thermal properties of a tetrahydrate – $\text{Co}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ – are studied insufficiently.

The aim of this work was to study thermal behaviour of the $\text{Co}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, to determine the sequence of thermal and structural transformations and how the extent of hydration affects these transformations.

Thermal transformations were studied on a Q-1500D derivatograph.

According to results of the differential and thermal analysis, $\text{Mn}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ resistant when heating on air with a rate of 2.5 K/min to 60 °C. Further temperature increase is followed by loss of weight. It on curve TG is registered four accurate steps.

Interpreting the results of the complex characterization of the products of partial and complete dehydration of $\text{Co}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, we found the following: heat treatment of $\text{Co}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ in the range of 60–120 °C is followed by removal of two molecules of water on the molecular mechanism and formation of $\text{Co}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. At the same time partly the process of disproportionation of anion will be realized with formation of $\text{CoHPO}_4 \cdot 1.5\text{H}_2\text{O}$ and H_3PO_4 .

The second stage of dehydration comes to an end with formation in the range of 120–165 °C mixes of two crystal phases: $\text{Co}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2$ and $\text{Co}_5(\text{HPO}_4)_2(\text{PO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$. The quantity of free H_3PO_4 in the thermolysis products of $\text{Co}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ increases and at 165 °C makes 2.10 wt % (based on P_2O_5). Process of anion condensation begins on the third stage thermolysis of $\text{Co}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$.

At 185 °C losses of weight correspond to removal of 4.57 mol of H_2O . In composition of a salt component are formed condensed phosphate with $n = 2 \div 5$, in composition of acid – polyphosphoric acids of the general formula $\text{H}_{n+2}\text{P}_n\text{O}_{3n+1}$ ($n = 2 \div 4$).

Most difficult is composition of products heating of $\text{Co}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ to 280 °C. He is presented mixture condensed phosphates and polyphosphoric acids with $2 \leq n \leq 7$. The condensed phosphates with $n = 3–8$ are X-ray amorphous.

At heating of $\text{Co}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ to 310 °C anionic composition of products of thermolysis is simplified. The finish products of dehydration appears. He is identified as cyclotetraphosphate with composition of $\text{Co}_2\text{P}_4\text{O}_{12}$. Crystallization of him closes at 345 °C.

Thus, the sequence of thermal solidphase transformations accompanying thermolysis of $\text{Co}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ was established. The composition of products of his partial and full dehydration is identified; the temperature intervals of their formation and thermal stability are concretized.

It is shown, that formation the final product of the thermolysis of the composition $\text{Co}_2\text{P}_4\text{O}_{12}$ (monoclinic system, sp. gr. $C2/c$, $Z = 4$; $a = 1.2080$, $b = 0.8473$, $c = 1.0176$ nm; $\beta = 119.27^\circ$) is realized on two directions. The first direction provides thermal dehydration of the protonated condensed phosphates (up to 65 %). According to the second direction, up to 35 % of $\text{Co}_2\text{P}_4\text{O}_{12}$ is formed as a result solidphase interactions of intermediate products of thermolysis. The general scheme of thermal solidphase transformations of $\text{Co}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ was proposed.

ELECTROCHEMICAL HYDROGENATION OF THE Tb₂Ni₁₅LiMg PHASE

Kordan V. M., Nytko V. V., Tarasiuk I. I., Pavlyuk V. V.

Department of Inorganic Chemistry, Ivan Franko National University of Lviv,

6 Kyryla i Mefodiya St., 79005 Lviv, Ukraine

vasyl.kordan@lnu.edu.ua

Systematic studies of the solid solution Tb₂Ni_{17-x-y}Li_xMg_y ($0 < x \leq 1$; $0 < y \leq 1$) showed that the maximum solubility of these doping components ($x + y$) does not exceed 2 atoms per formula unit ($r_{\text{Li}} = 1.53 \text{ \AA}$, $r_{\text{Mg}} = 1.60 \text{ \AA}$) [1–3]; hydrogen sorption ability and corrosion stability increase for the electrode with the larger amount of doping components. Also, the specific resistance value $\rho_0 = 35.7 \text{ \mu}\Omega\cdot\text{cm}$ is lower than for other phases on the basis of 2:17 and 1:5 stoichiometry [4]. Low value of this parameter is required for creation of new electrode materials.

A sample with the nominal composition Tb₂Ni₁₅LiMg was synthesized by arc melting of a pressed pellet containing a mixture of pure metals (5 wt. % excess of Li and Mg), remelted two times for better homogenization. X-ray phase analysis (DRON-2.0M, Fe K α -radiation) showed that the alloy consisted of an expected phase with Tb₂Ni₁₇-type structure (space group *P6₃/mmc*, $a = 8.3352(2) \text{ \AA}$, $c = 8.0624(3) \text{ \AA}$, $V = 485.09(2) \text{ \AA}^3$) and a trace amount of Ni. Energy dispersive X-ray spectroscopy confirmed the formation of these phases. Composition of the main phase is Tb_{11.5(5)}Ni_{81.1(7)}Mg_{7.4(9)} (Li was not determined), composition of the solid solution based on Ni is Tb_{2.2(7)}Ni_{95.9(8)}Mg_{1.9(9)} (Fig., *a*). Electrochemical hydrogenation of the investigated alloy was carried out in 2-electrode Swagelok-type cell. The battery prototype consisted of a negative electrode (studied alloy) and a positive electrode containing a mixture of dried Ni(OH)₂ with graphite. Chronopotentiograms of the Ni-MH battery prototype were obtained in galvanostatic mode over 50 cycles (Fig., *b*). The amount of deintercalated H-atoms of the investigated electrode was determined using Faraday's formula. It reached 3.45 H/f.u. and it is a good value taking into consideration the low content of the rare earth element (Tb) and the high content of nickel.

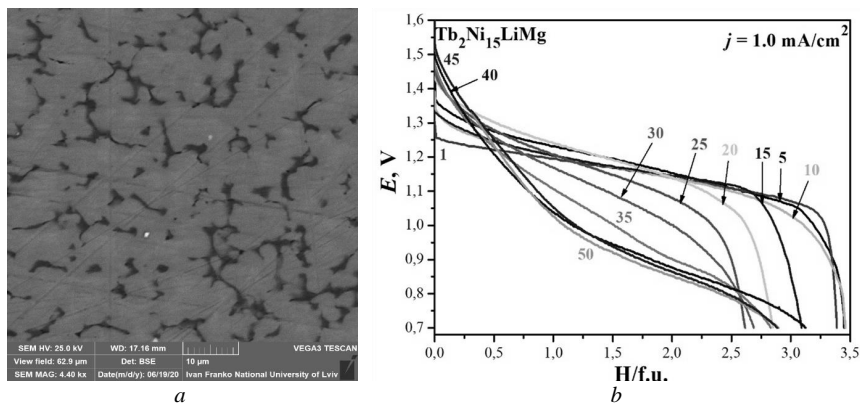


Fig. SEM-image (BSE-mode) of the Tb_{10.5}Ni_{79.5}Li₅Mg₅ alloy (*a*) and selected discharge curves for the battery prototype with the Tb_{10.5}Ni_{79.5}Li₅Mg₅-based electrode (*b*)

[1] V. Kordan, O. Zelinska, V. Pavlyuk, V. Nytko, R. Serkiz. *Chem. Met. Alloys*, 2016, 9(3/4), 153–157.

[2] V. Kordan, V. Nytko, G. Kovalczyk, A. Balinska, O. Zelinska, R. Serkiz, V. Pavlyuk. *Chem. Met. Alloys*, 2017, 10(1/2), 61–68.

[3] V. M. Kordan, V. V. Nytko, I. I. Tarasiuk, O. Ya. Zelinska, V. V. Pavlyuk. *Abs. III Int. (XIII Ukr.) Sci. Conf. Stud. Young Scient. "Current Chemistry Problems"*, Vinnytsia, 2020, 51.

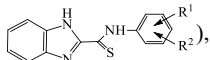
[4] V. Kordan, V. Nytko, I. Stetskiy, I. Tarasiuk, O. Zelinska, V. Pavlyuk, H. Müller, E. Bauer. *Abs. XXII Int. Sem. Phys. Chem. Solid. (eISPCS'20)*, Lviv, 2020, 55–56.

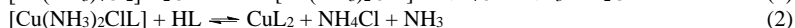
СИНТЕЗ ЗМІШАНОЛІГАНДНИХ КООРДИНАЦІЙНИХ СПОЛУК КУПРУМУ(II) ІЗ ЗАМІЩЕНИМИ ГЕТЕРОЦИКЛІЧНИМИ ТІОАМІДАМИ

Гордієнко О. А.¹, Діденко Н. О.², Тітов Т. С.¹, Коріненко Б. В.¹, Хутько М. В.¹

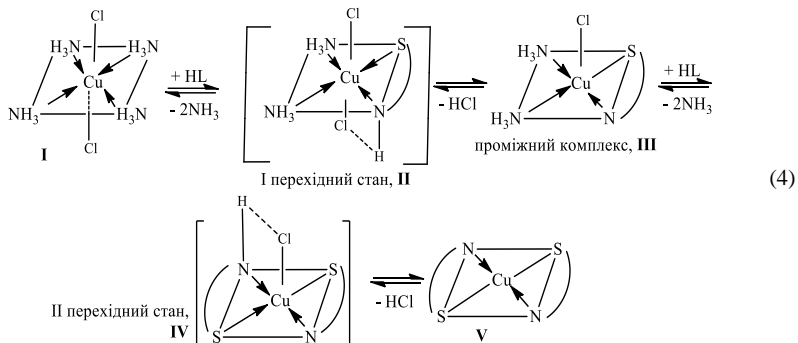
¹Вінницький національний технічний університет, Вінниця, Україна

²Вінницький національний медичний університет ім. М. І. Пирогова, Вінниця, Україна
b.korinenko.b@gmail.com

Раніше нами було досліджено закономірності синтезу координаційних сполук купруму(II) з гетероциклическими тіоамідами (CuL₂) залежно від природи тіоамідного ліганда (L = , органічного розчинника (ROH або ROH+H₂O), вихідної солі CuX₂ (X – кислотний залишок сильної або слабкої кислоти) та умов проведення реакції (рН середовища, температура, час). В даній роботі нами розроблено новий спосіб синтезу координаційних сполук CuL₂ за схемою:



З врахуванням сумарного рівняння (3) можна стверджувати, що реакція проходить у дві стадії за механізмом S_N¹ нуклеофільного заміщення аміакатних лігандів (NH₃ згідно з теорією ЖМКО Пірсона – «жорстка» основа) на тіоамідний ліганд L (за шкалою ЖМКО – основа середньої сили). Крім того, катіон Cu²⁺ є кислотою середньої сили, а в результаті реакції утворюються хелати CuL₂ з транс-координаційним вузлом CuN₂S₂, тому такий варіант реакції заміщення за механізмом S_N¹ можна було б розглядати безальтернативним. Однак, детальний аналіз отриманих результатів (реакції (1) – (3)) вказує на більш складний характер досліджених хімічних перетворень:



Реакції (схема (4)) проходять за дисоціативним механізмом послідовного нуклеофільного заміщення/елімування S_N¹/E₁ через утворення проміжного [Cu(NH₃)₂CIL] **III** та кінцевого CuL₂ **V** комплексів, яким передують утворення, відповідно, інтермедіатів **II** та **IV**. Внутрішньокмлексне дегідрохлорування (β-елімування) в інтермедіатах **II** і **IV** проходить швидко. Амоніак, який перед цим виділяється, зв'язує хлороводень за реакцією 2HCl + 2NH₃ → 2NH₄Cl, зміщуючи рівновагу **II** ⇌ **III** та **IV** ⇌ **V** в бік кінцевого комплексу **V**.

Склад та будову синтезованих комплексних сполук досліджували методом елементного аналізу, ІЧ-спектроскопією та рентгенофазовим аналізом. Було також досліджено можливе практичне використання синтезованих сполук як протизношувальних та антифрикційних додатків до індустріальних олив.

ЕЛЕКТРОЛІТ ДЛЯ ЕЛЕКТРООСАДЖЕННЯ Ni-P ПОКРИТТІВ

Корольнчук Д. Г., Коломієць О. В., Овчаренко В. І.ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет», Дніпро, Україна
markiz.kotik99@gmail.com

Електролітичні осадки нікелю та сплавів на його основі за розмаїттям сфер застосування посідають провідне місце у сучасній гальванотехніці, що обумовлено поєднанням їх унікальних фізико-механічних властивостей з доступністю солей цих металів і відносно нескладними технологіями електроосадження покриттів. Нарівні із захисно-декоративними гальванопокриттями поширеними є зносостійкі покриття, тонкі магнітні плівки, товсті малонапружені осадки в електроформуванні тощо. Вимоги до експлуатаційних характеристик покриттів є визначальними у виборі електроліту та умов електроосадження нікелю і його сплавів.

Метою даної роботи є одержання Ni-P покриттів з високою відбивною здатністю, твердістю та мінімальними внутрішніми напруженнями.

Отримували електроліт наступним чином: в дистильовану воду кімнатної температури вводили необхідну кількість сульфамату нікелю, потім додавали хлорид нікелю, ортофосфорну кислоту, борну кислоту та сахарин, після чого розчин витримували протягом десяти годин до розчинення осаду. Потім додавали необхідну кількість гіпофосфіту натрію. Співвідношення компонентів, г/л: сульфамат нікелю 250–300, хлорид нікелю 25–30, борна кислота 20–30, ортофосфорна кислота 40–55, гіпофосфіт натрію 5–10, сахарин 0,5–1,5. Електроосадження відбувалось за температури 60–80 °С, катодна густина струму знаходилась в межах 2,5–20 А/дм². Швидкість осаження при густині струму 5 А/дм² дорівнює 0,029 мм/год. Вихід за струмом близько 65–70 %. Досліди по нанесенню покриттів проводились впродовж 30 днів. Пасивації аноду не спостерігалось, розчин залишався прозорим, якість покриттів – стабільна. Властивості електроліту наведено в табл. 1.

Таблиця 1. Властивості електроліту для електроосадження Ni-P покриттів

	Густина струму, А/дм ²	
	3	7
Мікротвердість, кг/мм ²	710	930
Відбивна здатність, %	87	90

Розроблений електроліт можна застосовувати для поліпшення декоративних властивостей поверхонь, а також для створення твердих шарів при відновленні вироблених поверхонь тертя.

SYNTHESIS OF THE PRACTICALLY IMPORTANT ZEOLITE – PHILLIPSITE
ON A NATURAL BASISMamedova G. A.Nakhchivan Department of the Azerbaijan National Academy of Sciences
Institute of natural resources, Nakhchivan, Azerbaijan
gunelmamadova@mail.ru

For the first time, on the basis of the natural mineral of Nakhchivan, hydrothermal synthesis of a potential practical importance zeolite of phillipsite type was carried out.

The natural sample was taken from the zeolite horizon in the north-west of the Kyukyuchai river, where zeolite content varies in the range of 75–80 %. Zeolite tuffs of Nakhchivan were used as samples, 78.5 % of which is the main mineral – mordenite ($\text{Ca}_2\text{Na}_2\text{K}_{2.8}\text{Al}_{8.8}\text{Si}_{39.2}\text{O}_{96}\cdot 34\text{H}_2\text{O}$), 19.5 % quartz (SiO_2) and 2.00 % anorthite ($\text{Ca}_{0.86}\text{Na}_{0.14}\text{Al}_{1.94}\text{Si}_{2.06}\text{O}_{8.01}$). The sample has thoroughly been washed with distilled water and dried at a temperature of 100 °C for three days.

Hydrothermal synthesis was carried out in Morey autoclaves made of 45 MNFT stainless steel with a volume of 18 cm³, and the filling coefficient of $F = 0.8$.

Experiments on hydrothermal crystallization were carried out without creating a temperature gradient and without stirring of the reaction mass. The ratio of solid to liquid is 1:10. Experiments on the hydrothermal synthesis of phillipsite were carried out for 50–100 hours at a temperature of 100–200 °C. The concentration of the thermal solution $\text{Ca}(\text{OH})_2$ is 15–20 %. The above conditions are the region of existence of a phase-pure phillipsite zeolite with 100 % crystallinity. After crystallization was completed, the final material was separated from the initial solution, washed with distilled water from excess alkali, and dried at 80 °C. For each experiment, 2 g of natural zeolite was used.

The identification of the zeolite phase was carried out by X-ray phase and derivatographic analysis. In the experiments, we used the installation of an X-ray analyzer 2D PHASER "Bruker" (CuK_α -radiation, $2\theta = 20\text{--}80^\circ$). Derivatographic studies were carried out in the "Derivatograph-Q 1500-D" of the Hungarian company MOM in a dynamic mode in the temperature range of 20–1000 °C.

According to the X-ray phase analysis established that phillipsite crystallizes in monoclinic crystal system with unit cell parameters $a = 9.87 \text{ \AA}$, $b = 14.30 \text{ \AA}$, $c = 8.67 \text{ \AA}$. The phillipsite diffractogram is shown in the figure.

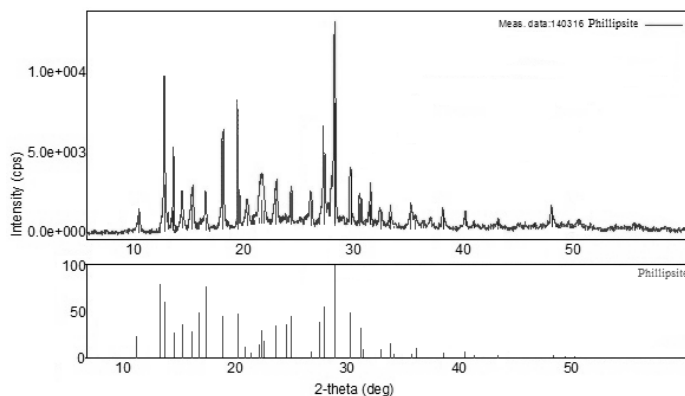


Fig. Diffractogram of phillipsite

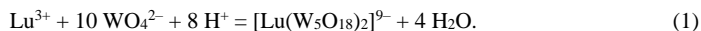
NEW Lu(III)-CONTAINING HETEROPOLY SALT WITH PEACOCK–WEAKLEY TYPE ANION $\text{Na}_9[\text{Lu}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 42\text{H}_2\text{O}$: SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE

Mariichak O. Yu., Rozantsev G. M., Radio S. V.

Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

o.mariichak@donnu.edu.ua

New neutral sodium salt with Peacock-Weakley type anion $\text{Na}_9[\text{Lu}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 42\text{H}_2\text{O}$ and Lu(III) as heteroatom was synthesized using procedure, elaborated in (Mariichak O. Yu., *et al.* Patent of Ukraine No. 121322, 2017). The crystalline compound was obtained from the aqueous solution acidified up to $Z=0.80$ ($Z=v(\text{H}^+)/v(\text{WO}_4^{2-})$) from $\text{Lu}(\text{NO}_3)_3\text{--Na}_2\text{WO}_4\text{--HNO}_3\text{--H}_2\text{O}$ system. The formation of the salt is going according to the reaction (1):



The synthesized salt was characterized by single-crystal X-ray diffraction (fig. 1), elemental analysis, FT-IR spectroscopy, and scanning electron microscopy.

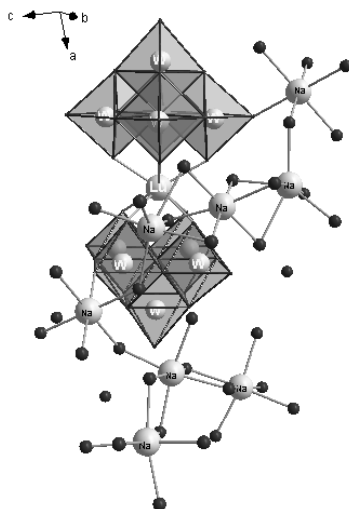


Fig. 1. Crystal structure of $\text{Na}_9[\text{Lu}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 42\text{H}_2\text{O}$

The $\text{Na}_9[\text{Lu}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 42\text{H}_2\text{O}$ consists of decatungstolanthanidate(III) anion, nine octahedrally coordinated Na^+ cations, and 42 H_2O molecules. The anion of $[\text{Lu}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2]^{9-}$ is comprised of two $[\text{W}_5\text{O}_{18}]^{6-}$ lacunary units, which coordinate to a central Lu^{3+} cation in the form of square antiprism. The main crystallographic data for $\text{Na}_9[\text{Lu}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 42\text{H}_2\text{O}$ are: monoclinic, $C2/c$, $a = 16.225(5) \text{ \AA}$, $b = 19.939(5) \text{ \AA}$, $c = 22.329(6) \text{ \AA}$, $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta = 99.89(3)^\circ$, $V = 7116(3) \text{ \AA}^3$, $Z = 4$. Microscopic analysis showed that the surface of grains of Lu(III)-containing salt has fuzzy blurred edges. Uniform surface contrast in BEC mode and characteristic X-ray emission clearly indicates the formation of single-phase sample.

The study was carried out within the Fundamental Research Programme funded by the Ministry of Education and Science of Ukraine (grants ID 0119U100025, 0120U102059).

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА $\text{CeSm}_{0,75}\text{Er}_{0,25}\text{PbSi}_2\text{S}_8$

Marchuk O. B., Смітюх О. В.

Волинський національний університет імені Лесі Українки

факультет хімії, фармації та технологій, Україна

Marchuk.Oleg@vnu.edu.ua

Хімічний дизайн складних халькогенідів набуває важливого значення на фоні зростаючого попиту на нові матеріали. Особливий розвиток енергозберігаючих технологій ставить перед ученими не лише питання здешевлення матеріальної бази, а й покращення існуючих характеристик відомих матеріалів. Як один із методів вирішення цієї задачі можна застосовувати заповнення однієї кристалографічної позиції (ПСТ) близькими, за своєю природою, атомами. Відомо, що Ce, Sm і Er є представниками однієї родини рідкісноземельних металів, а отже цілком відповідають вище зазначеному критерію.

Кристалічна структура вперше синтезованої сульфідної фази $\text{CeSm}_{0,75}\text{Er}_{0,25}\text{PbSi}_2\text{S}_8$ проіндексована в тригональній сингонії (ПГ $R\bar{3}c$, символ Пірсона $hR78$). Всі розрахунки, що пов'язані з розшифруванням і уточненням структури були виконані за допомогою пакету програм WinCSD. У таблиці 1 наведено координати атомів та їх ізотропні параметри у структурі $\text{CeSm}_{0,75}\text{Er}_{0,25}\text{PbSi}_2\text{S}_8$.

Таблиця 1. Координати та теплові параметри атомів у структурі $\text{CeSm}_{0,75}\text{Er}_{0,25}\text{PbSi}_2\text{S}_8$

Атом	ПСТ	x	y	z	$B_{\text{ізо}} \times 10^{-2}$ (нм ²)
M	18e	0,3199	0,3199	0,2500	2,52
Si	12c	0,3333	0,6667	0,3255	2,52
S1	12c	0,3333	0,6667	0,2454	2,52
S2	36f	0,0353	0,2414	0,1856	2,52

M (0,33 Ce + 0,25 Sm + 0,09 Er + 0,33 Pb)

На рисунку 1 представлено теоретичний, експериментальний та різницевий профілі дифрактограми сульфіду $\text{CeSm}_{0,75}\text{Er}_{0,25}\text{PbSi}_2\text{S}_8$. У структурі $\text{CeSm}_{0,75}\text{Er}_{0,25}\text{PbSi}_2\text{S}_8$ статистична суміш атомів M (0,33 Ce + 0,25 Sm + 0,09 Er + 0,33 Pb) локалізована в правильній системі точок (ПСТ) 18e і координує навколо себе вісім атомів Сульфуру, а атоми Si (ПСТ 12c) мають тетраедричне оточення атомами Сульфуру.

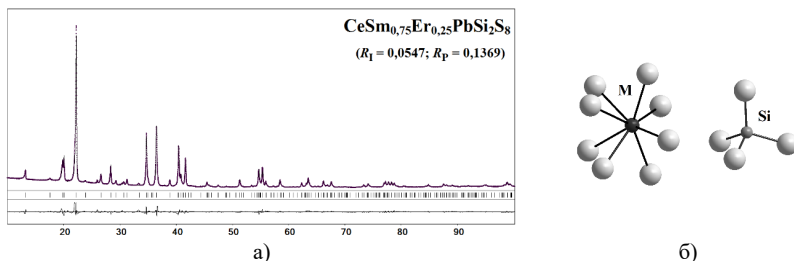


Рис. 1. а) Теоретичний, експериментальний та різницевий профілі дифрактограми сульфіду $\text{CeSm}_{0,75}\text{Er}_{0,25}\text{PbSi}_2\text{S}_8$ (Cu $K\alpha_1$ проміння, $\lambda = 0,154056$ нм); б) координаційне оточення атомів статистичної суміші M та атомів Si

ОСОБЛИВОСТІ СПІЛЬНОГО ОСАДЖЕННЯ КАТІОНІВ МАГНІЮ І ЦИНКУ ДИФОСФАТ-ЙОНОМ

Обломей С. О., Антрапцева Н. М., Ключвант А. А.

Національний університет біоресурсів і природокористування України, Київ, Україна
aspirant_nubiru@ukr.net

Аналіз літературних даних свідчить про те, що під час спільного осадження з водних розчинів катіонів двовалентних металів моно- або дифосфат-йонном можуть утворюватися кристалогідрати різні за складом і хімічною природою. Спільне осадження катіонів магнію і цинку дифосфат-йонном досліджене недостатньо.

Мета цієї роботи – визначити умови спільного осадження катіонів магнію і цинку дифосфат-йонном, встановити склад та хімічну природу кристалогідратів, що утворюються.

В якості вихідних реагентів використовували водні розчини сульфатів магнію $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ (16,38 % MgO), цинку $\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ (28,31 % ZnO) і калій дифосфат кваліфікації “ч.д.а.”. Для спільного осадження катіонів Mg^{2+} і Zn^{2+} у вигляді дифосфатів обрані такі умови: співвідношення у складі вихідних розчинів $n = \text{P}_2\text{O}_7^{4-} / \Sigma \text{Mg}^{2+}, \text{Zn}^{2+} = 0,4$, $K = \text{Mg}/\text{Zn} = 0,11 \div 19,00$; концентрація розчинів – $C = 0,1$ моль/л; тривалість взаємодії – за досягнення рівноваги; температура – кімнатна. Досягнення стану рівноваги фіксували за встановленням постійного значення рН маточних розчинів при кожному конкретному значенні $K = \text{Mg}^{2+}/\text{Zn}^{2+}$ з інтервалу, що вивчався (0,11÷19,00).

Хімічний аналіз твердої фази, що осаджується при всіх значеннях K , свідчить про те, що відношення $\text{P}/\Sigma\text{M}$ (Mg, Zn) відповідає відомому для дифосфатів (1,00). Склад дифосфату, що утворюється у разі відсутності у вихідних розчинах Zn^{2+} , відповідає розрахунковому для $\text{Mg}_2\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$. Хімічний склад дифосфату, одержаного у разі відсутності Mg^{2+} , узгоджується із розрахунковим для $\text{Zn}_2\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$. Вміст Mg , Zn , P , H_2O у складі дифосфатів, що утворюються при значеннях $0,11 \leq K \leq 19,00$, закономірно змінюється в залежності від складу вихідних розчинів.

Рентгенограма дифосфату, одержаного за умов $9,00 < K \leq 19,00$ подібна до отриманої для $\text{Mg}_2\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$. За результатами хімічного аналізу цей дифосфат крім магнію (12,50 % мас.) містить до 2,03 % мас. цинку, що свідчить про утворення твердого розчину на основі структури $\text{Mg}_2\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$. Склад насиченого твердого розчину відповідає дифосфату $\text{Mg}_{1,89}\text{Zn}_{0,11}\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$, загальна формула має вигляд $\text{Mg}_{2-x}\text{Zn}_x\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ ($0 \leq x \leq 0,11$).

Гідратовані дифосфати, одержані за умов $0,11 \leq K \leq 0,33$, поряд із цинком містять до 4,01 % мас. магнію. Вони ідентифіковані як обмежений твердий розчин із загальною формулою $\text{Zn}_{2-y}\text{Mg}_y\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ із структурою $\text{Zn}_2\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$. Визначені за результатами хімічного аналізу області гомогенності твердого розчину становлять $0 \leq y \leq 0,61$. Насиченим твердим розчином є дифосфат складу $\text{Zn}_{1,39}\text{Mg}_{0,61}\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$.

Спільне осадження катіонів Mg^{2+} і Zn^{2+} за значень K в межах $0,43 \leq K \leq 9,00$ призводить до утворення механічної суміші двох кристалічних фаз різних структур – $\text{Zn}_2\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ і $\text{Mg}_2\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$.

Отже, у разі спільного осадження катіонів магнію і цинку дифосфат-йонном залежно від складу вихідних розчинів утворюються два обмежених твердих розчини заміщення з принципово відмінними структурами. Один з них, із загальною формулою $\text{Mg}_{2-x}\text{Zn}_x\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ ($0 < x \leq 0,11$), утворюється на основі структури дифосфату-матриці $\text{Mg}_2\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ (при $9,00 < K \leq 19,00$), другий – складу $\text{Zn}_{2-y}\text{Mg}_y\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ ($0 < y \leq 0,61$) – на основі структури дифосфату-матриці $\text{Zn}_2\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (при $0,11 \leq K \leq 0,33$).

**КРИТЕРИИ ОЦЕНКИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ГАЛЬВАНИЧЕСКОГО ШЛАМА
В СТРОИТЕЛЬНОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ**Даценко В. В., *Олексюк А. Г.*Харьковский национальный автомобильно-дорожный университет, Харьков, Украина
chemistry@khadi.kharkov.ua

В настоящее время утилизация гальваношламов (ГШ), образующихся при очистке сточных вод гальванических производств, относится к приоритетному направлению развития, науки, технологий и техники, технологии мониторинга и прогнозирования состояния природной окружающей среды, предотвращение и ликвидация её загрязнения. ГШ содержат значительное количество ценных компонентов, поэтому как вторичное сырьё могут быть одним из основных ресурсов в производстве материалов.

Поскольку одним из путей утилизации ГШ является их использование в производстве строительных материалов, где происходят высокотемпературные процессы, то необходимо выяснить, какова динамика изменения массы образцов, какие при этом образуются химические соединения, имеется ли вероятность улетучивания токсичных элементов. Модельный ГШ, экспериментально получен путем нейтрализации 1 М сульфатного медно-цинкового раствора гашеной известью. Анализируемые пробы (10 г) подвергали термической обработке в сушильном шкафу и муфельной печи при температурах, °С: 100, 200, 300, 400, 500, 600, 700, 800, 900, 1000.

Вначале были проведены исследования по изучению изменения массы ГШ в зависимости от температуры. Анализ полученных результатов показал, что потери массы ГШ при термообработке, начинаются при температуре ниже 100 °С, и завершаются при 700 °С, дальнейшее нагревание при которой не приводит к потере массы. Потеря массы происходит за счет удаления гигроскопической влаги и влаги, связанной в химических соединениях и разложения сульфатов. После термообработки шлам приобрел тёмно-серую окраску, обусловленную оксидами металлов.

Для установления оптимального времени термообработки ГШ была изучена кинетика этого процесса. Три пробы параллельно нагревались до температуры 700 °С в течение 0,5, 1, 2, 3, 4, 5 и 6 часов. При этом фиксировалось изменение массы проб. Полученные результаты свидетельствуют, что стабильное состояние образца ГШ в результате термообработки достигается в течении первого часа термообработки.

С помощью рентгенофазового анализа образцы термообработанного ГШ идентифицированы как механическая смесь фаз ангидрита Na_2SO_4 , оксосульфатов $\text{Zn}_3\text{O}(\text{SO}_4)_2$, Cu_2OSO_4 , $\text{Zn}(\text{SO}_4)(\text{H}_2\text{O})_6$, CuO , и $\text{Zn}_{3.2}\text{Cu}_{0.8}(\text{SO}_4)(\text{OH})_6(\text{H}_2\text{O})_4$, последняя присутствует в следовых количествах. Элементный состав образца осадка согласно электронно-зондовому микроанализу составляет, %: Cu – 28,28; Zn – 19,11; Ca – 8,62; O – 32,48; S – 11,52. Электронно-зондовый микроанализ ГШ после прокаливания показал некоторое улетучивание из него ионов меди (10 %) и цинка (6 %).

Для определения особенностей поверхности образца ГШ после термообработки были проведены электромикроскопические исследования на РЭМ-100У. Морфология поверхности ГШ после термообработки рыхлая, имеет выступы. ГШ после термообработки представляет собой дисперсную кристаллическую структуру, в которой отчетливо видны отдельные конгломераты, имеющими округлые формы с множеством шероховатостей, выступов, впадин и других дефектов поверхности, что свидетельствует о наличии высокоразвитой поверхности. Отжиг ГШ приводит к формированию неоднородной, гетерогенной структуры. Поверхность термообработанного ГШ имеет более крупные кристаллы, которые увеличивают общую площадь поверхности.

ХАРАКТЕРИСТИКА КИСЛОТНО-ОСНОВНИХ ЦЕНТРІВ ПОВЕРХНІ НАНОРОЗМІРНОГО МАГНЕТИТУ

Перехристюк М. М., Кусяк Н. В., Кусяк А. П., Ільчук О. Р.

Житомирський державний університет імені Івана Франка, Житомир, Україна
pmm3162-134@nvmk.org.ua

Сучасні дослідження впливу електронних та катіонних вакансій на різні типи геометрії поверхневих структур магнетиту виявляють хімічну природу поверхневих процесів. Для розуміння природи адсорбційної та іммобілізаційної активності поверхні наночастинок для біологічно активних речовин, ліків, катіонів важких металів важливо знати протолітичні властивості поверхні магнетиту та композитів на його основі, якісні та кількісні характеристики активних центрів. З точки зору точності, швидкості та відтворюваності для кількісної та якісної оцінки активних центрів поверхні, перевага надається методам рН-метрії.

Метою нашого дослідження стало потенціометричне визначення кислотно-основних характеристик наночастинок магнетиту та аналіз кислотно-основних властивостей поверхні Fe_3O_4 у середовищі фізіологічного розчину та визначення залежності величини рН ізоадсорбційного стану поверхні. Синтез магнетиту здійснювали шляхом хімічної конденсації з водних розчинів солей дво- та тривалентного феруму у лужному середовищі за реакцією $\text{Fe}^{2+} + 2\text{Fe}^{3+} + 8\text{NH}_4\text{OH} \rightarrow \text{Fe}_3\text{O}_4 + 4\text{H}_2\text{O} + 8\text{NH}_4^+$. Підтвердження кристалічної структури утвореного магнетиту проведено рентгенофазним аналізом. Середній діаметр наночастинок, розрахований при аналізі рентгенографічних дифрактограм за формулою Шеррера, становив 10,5 нм, питома площа поверхні, виміряна методом десорбції азоту, $S_{\text{sp}} = 110 \pm 1 \text{ \% м}^2/\text{г}$, що відповідає вимогам до наночастинок медико-біологічного призначення. Кислотно-основні властивості поверхні зразків досліджені методом рН-метрії методом окремих наважок в розчинах різної іонної сили (0,015 та 0,15 М розчини NaCl), що дозволяє оцінити інтегральну кислотність поверхні при дослідженні зміни величини рН водної суспензії досліджуваних зразків.

Аналіз даних свідчить, що на поверхні магнетиту наявні групи з різними кислотно-основними характеристиками. Форма кривих гідролітичної адсорбції вказує на підвищену активність в середовищі 0,15 М розчину NaCl. Значення $\text{pH}_{\text{тнз}}$ практично не залежить від іонної сили розчину, яка в більшій мірі впливає на активність поверхневих центрів. Розрахована за експериментальними даними загальна концентрація поверхневих гідроксильних груп активних в даному діапазоні значень рН – 1,561 ммоль/г, що задовільно узгоджується з результатами термогравіметричних досліджень (1,8 ммоль/г) наночастинок Fe_3O_4 .

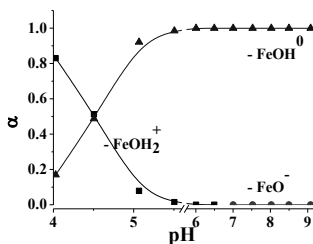


Рис. 1. Залежність часток поверхневих гідроксильних груп поверхні наночастинок Fe_3O_4 від рН середовища (середовище 0,15 М рочин NaCl)

ВЗАЄМОДІЯ В РОЗЧИНІ $\text{Cu}^{2+} - \text{WO}_4^{2-}$ ($Z = 1,17$) – $\text{H}^+ / \text{OH}^- - \text{H}_2\text{O}$,(C_w = 0,01 моль/л)

Печаліна Є. І., Дуванова Е. С., Радіо С. В., Розанцев Г. М.

Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна

pechalina.i@donnu.edu.ua

Синтез, характеристика будови та властивостей поліоксометалатів в тому числі ізополівольфраматів купруму викликають велику цікавість із огляду перспектив їх практичного застосування в багатьох галузях науки, техніки та медицини, включаючи створення препаратів для противірусної хімотерапії ВІЛ-СНІДу та раку.

З метою розробки оптимальної методики синтезу таких сполук, попередньо було досліджено процеси, що протікають у водних розчинах, які містять йони WO_4^{2-} , H^+ і Cu^{2+} при $Z = C(\text{H}^+) / C(\text{WO}_4^{2-}) = 1,17$. Оскільки реакцією $12\text{WO}_4^{2-} + (14+n)\text{H}^+$ вивчено в достатній мірі, то відомо, що в розчинах з рН близьким до нейтрального в основному утворюються рівноваги між протонованими формами паравольфрамат-аніона $[\text{H}_n\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]^{(10-n)-}$, $n \leq 3$: $Z = 1,17$, $n = 0$; $Z = 1,25$, $n = 1$; $Z = 1,33$, $n = 2$; $Z = 1,42$, $n = 3$. Тому було досліджено вплив катіонів Cu^{2+} на таку стехіометрію вихідних ізополіаніонів.

З цією метою вивчені взаємодії у водному розчині системи $\text{Cu}^{2+} - \text{WO}_4^{2-} - \text{H}^+$ ($Z = 1,17$) – H_2O методом рН-потенціометричного титрування. Для цього готували вихідний розчин $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ (C_{Cu} = 0,00417 моль/л), Na_2WO_4 (C_w = 0,02500 моль/л), HNO_3 (C_H = 0,02925 моль/л) за кислотності $Z = 1,17$, з якого відбирали аликвоту для титрування. Йонні сили $\mu = 0,05$; 0,10; 0,15; 0,20; 0,25 (моль/л) в розчині створювали безпосередньо перед титруванням шляхом додавання необхідної кількості 2 моль/л розчину NaNO_3 (ч.д.а.). Вихідний розчин титрували з кроком $\Delta Z = 0,02$ кислотою або лугом в інтервалах кислотності $Z = 1,17 - 1,65$ і $Z = 1,17 - 1,05$ відповідно.

З числа апробованих моделей у якості адекватної експерименту була обрана модель, до якої входили йонні пари $[\text{Cu}^{2+}, \text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]^{8-}$, $[\text{Cu}^{2+}, \text{HW}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]^{7-}$, $[\text{Cu}^{2+}, \text{H}_2\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]^{6-}$, $[\text{Cu}^{2+}, \text{H}_3\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]^{6-}$.

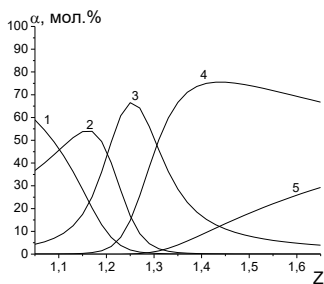


Рис. 1. Діаграма розподілу йонів при

 $\mu = 0,10$ (моль/л), 1 – WO_4^{2-} ,2 – $[\text{Cu}^{2+}, \text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]^{8-}$,3 – $[\text{Cu}^{2+}, \text{HW}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]^{7-}$,4 – $[\text{Cu}^{2+}, \text{H}_2\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]^{6-}$,5 – $[\text{Cu}^{2+}, \text{H}_3\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]^{6-}$

Модель має низьке значення критеріальної функції (Criterion function) $\text{CF} = 40,90$, непоганий глобальний критерій адекватності $\chi^2_{\text{експ.}} = 19,57 \ll \chi^2_{f, \alpha=0.05} = 53,38$, і не є надлишковою. В результаті моделювання за програмою CLINP 2.1 визначено концентраційні константи утворення, розраховано рівноважні концентрації, та побудовано діаграми розподілу ізополіаніонів у вигляді залежності мольної частки аніону від кислотності розчину (рис. 1), які можуть бути корисні синтетикам, що займаються добуванням купруму поліоксовольфраматів. Встановлено, що зміна йонної сили не впливає на якісний склад розчину.

ЕФЕКТИВНІСТЬ ТЕПЛОВОГО УДАРУ ПРИ ЛУЖНІЙ КОНВЕРСІЇ ВУГІЛЛЯ В НАНОПОРИСТІ МАТЕРІАЛИ

Сабєрова В. О.

Інститут фізико-органічної хімії та вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України,

Київ, Україна

Saberova@nas.gov.ua

Мета роботи – оцінка ефективності теплового удару при лужній активації вугілля різного ступеня метаморфізму (СМ) порівнянням виходів, питомої поверхні та об'ємів адсорбуючих пор активованого вугілля (АВ), яке формується в умовах активації з тепловим ударом (АТУ) та термопрограмованої (ТП) активації.

Вихідні зразки – буре вугілля (БВ), кам'яне вугілля марок Д, Г, К, ОС, Т і антрацит (А₅) охоплюють весь ряд метаморфізму (таблиця). Умови активації: співвідношення КОН/вугілля – 1.0 г/г, термопрограмоване (4 град/хв) нагрівання або тепловий удар в аргоні (800 °С), ізотермічна витримка 1 год, охолодження, відмивання АВ від луку, сушіння (120 °С), визначення виходу (Y, %). На підставі ізотерм адсорбції-десорбції азоту (77 К, Micromeritics ASAP 2020, метод розрахунку – 2D NLDFT) визначено загальний об'єм (V_t) і питому поверхню (S) пор.

Таблиця. Характеристики поруватої структури АВ з викопного вугілля

Параметр	Викопне вугілля									
	БВ	Д	Г ₁	Г ₂	Ж	К ₁	ОС ₁	Т	А ₅	
C ^{daf} , %	70,4	80,0	81,0	83,5	85,0	86,4	89,4	91,2	95,2	
Y, %	ТП	29,5	49,8	49,5	54,6	55,1	60,2	65,5	74,4	82,8
	АТУ	22,7	43,4	41,5	44,5	46,0	54,2	60,6	61,5	77,2
S, м ² /г	ТП	1142	1547	1488	1345	1486	1354	1195	1083	322
	АТУ	2012	1950	1955	1728	1749	1548	1304	1237	818
V _t , см ³ /г	ТП	0,487	0,593	0,566	0,520	0,564	0,519	0,484	0,393	0,229
	АТУ	1,088	0,772	0,779	0,717	0,696	0,600	0,524	0,454	0,269

Вихід АВ при ТП-активації збільшується зі зростанням СМ і описується лінійною кореляційною залежністю $Y_{ТП} = 2.05 \cdot C^{daf} - 116.3$ ($R^2=0.973$). Вихід АВ в АТУ-процесі менше для всіх зразків вугілля, але також лінійно зростає $Y_{ТУ} = 2.03 \cdot C^{daf} - 121.8$ ($R^2=0.962$). Відносне зменшення виходу АВ при введенні теплового удару виявляє тенденцію знижуватися в ряду від бурого вугілля (23.1 %) до антрациту (6.8 %).

Величина питомої поверхні S змінюється більш складним чином. При ТП-активації спостерігається екстремальна залежність S від C^{daf}: поверхня збільшується зі зростанням C^{daf} від 70 % до 80 %, а для АВ з кам'яного вугілля і антрацитів (діапазон C^{daf} = 80–96 %) зменшується в 4.8 раз. Для серії АВ_{ТУ} залежність S від C^{daf} інша: максимальну величину S = 2012 м²/г має АВ з БВ і дуже близькі значення S = 1950–1955 м²/г має АВ з вугілля Д і Г₁ (C^{daf} = 80–81 %). В ряду інших зразків АВ_{ТУ} значення S зменшуються в 2.4 рази, тобто більш плавно в порівнянні з серією АВ_{ТП}. Загальний об'єм (V_t) адсорбуючих пор зразків АВ_{ТУ} знижується в ряду метаморфізму вихідного вугілля практично лінійно. Найбільший вплив на формування загальної пористості АВ тепловий удар надає при активації бурого вугілля (збільшення V_t в 2.23 рази), істотно менший вплив (збільшення V_t в 1.23–1.38 рази) спостерігається для вугілля з C^{daf} = 80–85 %, а для вугілля високого СМ та антрацитів ефект виражений слабо.

Введення теплового удару замість термопрограмованого нагрівання при термолізі вугілля з КОН (800 °С) призводить до отримання АВ зі збільшеними питомою поверхнею (≤ 2.5 раз) і загальним об'ємом пор (≤ 2.2 раз), але з меншими виходами (в 1.07–1.30 рази).

**SYNTHESIS OF NEW IRON(II) BIS- α -DIOXIMATE OF CHUGAEV'S TYPE
AND OF ITS MACROCYCLIC DERIVATIVE AS THE REACTIVE PRECURSOR
OF POLYAROMATIC CLATHROCHELATES**

Chernii S. V.^{1,2}, *Selin R. O.*^{1,3}, Chernii V. Y.¹, Voloshin Y. Z.^{4,5}

¹Vernadsky Institute of General and Inorganic Chemistry NAS, 32/34 Palladina prosp., Kyiv, 03142 Ukraine

²Institute of Molecular Biology and Genetics, NASU, 150 Zabolotnogo St., 03143 Kyiv, Ukraine

³PBMR Labs Ukraine, 1 Murmanskaya st, Kyiv, 02094, Ukraine

⁴Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds RAS, 28 Vavilova st., Moscow 119991, Russia

⁵Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry RAS, 31 Leninsky prosp., 119991 Moscow, Russia

selin.roman.oleksandrovich@gmail.com

Iron(II) clathrochelates are promising type of macrocyclic complexes. In recent years they are proposed as prospective agents in medicinal chemistry and biochemistry: clathrochelates can inhibit the transcription of T7 RNA polymerase, possess anti-amyloidogenic activity and suggest as ICD-reporters for globular proteins. Clathrochelates of two types have been earlier used for these purposes: the triribbed-functionalized cage complexes with equivalent chelate fragments and their non-equivalent monoribbed-functionalized bis- α -benzylidioximate analogs. Now, we obtained, for the first time, the phenanthrene-based non- and macrocyclic iron(II) bis- α -dioximates. Such a minor modification of the macrocyclic framework could lead to significant biological activity changes of further clathrochelate complexes.

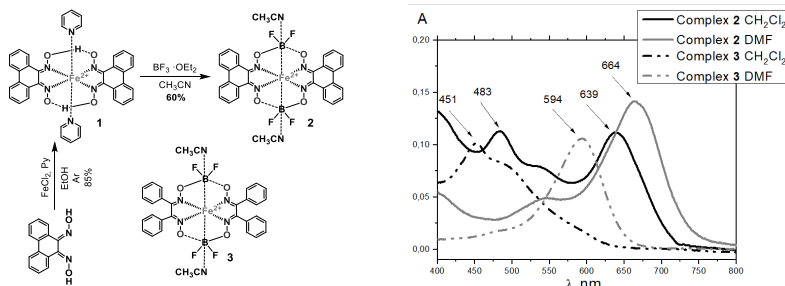


Fig. 1. Synthetic pathway to the macrocyclic complex 2 and its UV-vis spectra

Complex 2 was obtained in a moderate total yield (in Fig.1); it was characterized using HR APPI (pos) mass spectra (m/z calculated for $\text{C}_{32}\text{H}_{22}\text{B}_2\text{F}_4\text{FeN}_6\text{O}_4$: 708.12; found: 709.1258 [$\text{M} + \text{H}^+$] $^+$). The UV-Vis spectra of compounds 2 and 3 in DMF and dichloromethane are affected by the nature of a solvent used (Fig. 1).

This work was financially supported by the EU Research and Innovation Staff Exchange (H2020-MSCA-RISE-2017, Project 778245 'CLATHROPROBES'). V.Y.Z. also thanks the support of RFBR (grant 18-29-23007).

SYNTHESIS AND ELECTROCHEMICAL HYDROGENATION OF THE $\text{Tb}_2\text{Co}_{16}\text{Mg}_{0.5}\text{Al}_{0.5}$ PHASE

Stetskiv I. A., Kordan V. M., Tarasiuk I. I., Pavlyuk V. V.

Department of Inorganic Chemistry, Ivan Franko National University of Lviv, Lviv, Ukraine
ira.stetskiv95@gmail.com

Hexagonal structure type $\text{Th}_2\text{Ni}_{17}$ ($hP38$, $P6_3/mmc$) is a derived type of the CaCu_5 ($hP6$, $P6/mmm$) structure, which is formed by tripling of the cell with the replacement of one large rare-earth metal atom by two smaller transition metal atoms. Successful electrochemical hydrogenation of compounds based on terbium and 3d-transition metals belonging to $\text{Th}_2\text{Ni}_{17}$ structure type has been previously reported. Partial replacement of cobalt with other elements leads to improved hydrogen adsorption properties.

The sample with nominal composition $\text{Tb}_2\text{Co}_{16}\text{Mg}_{0.5}\text{Al}_{0.5}$ was synthesized by arc melting of pressed pellet containing a mixture of pure metals (5 wt. % excess of Mg) on a water-cooled copper hearth in purified argon atmosphere and was remelted several times to reach better homogenization. X-ray diffraction (XRD) powder pattern (DRON-2.0M, Fe $K\alpha$ -radiation) showed the existence of two hexagonal phases with similar crystal structures. Lattice parameters for the main phase $\text{Tb}_2\text{Co}_{17-x-y}\text{Mg}_x\text{Al}_y$ are $a = 8.404(2)$ Å, $c = 8.121(2)$ Å, $V = 496.7(2)$ Å³. Lattice parameters for the second phase $\text{TbCo}_{05-x-y}\text{Mg}_x\text{Al}_y$ are $a = 4.9454(4)$ Å, $c = 3.9891(5)$ Å, $V = 84.49(1)$ Å³. The composition of the solid solution was confirmed by X-ray fluorescent spectroscopy (ElvaX Pro analyzer). The results of energy-dispersive X-ray spectroscopy (Tescan Vega3 LMU scanning electron microscope, Oxford Instruments AZtec ONE system) are fully consistent with the results of XRD and are as follows: integral composition: $\text{Tb}_{12.8}\text{Co}_{80.5}\text{Mg}_{3.8}\text{Al}_{2.9}$; main phase: $\text{Tb}_{11.1}\text{Co}_{80.8}\text{Mg}_{4.3}\text{Al}_{3.8}$; light spots (second phase): $\text{Tb}_{17.5}\text{Co}_{77.6}\text{Mg}_{2.8}\text{Al}_{2.1}$; dark spots: oxides $\sim\text{Tb}_2\text{O}_3 + \text{Co}$.

The electrochemical studies were carried out in Swagelok-type two-electrode cell using MTech G410-2 galvanostat. The charge and discharge processes were performed in galvanostatic mode at 1.0 mA/cm^2 . The investigated phase demonstrates the corrosion stability in the electrolyte solution (6 M KOH). Coulomb efficiency at 10-th discharge cycle reaches 95 %.

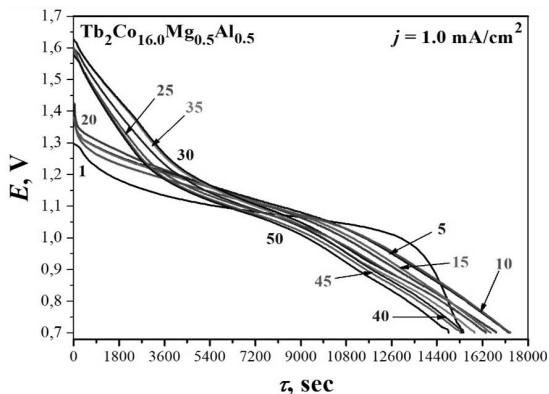
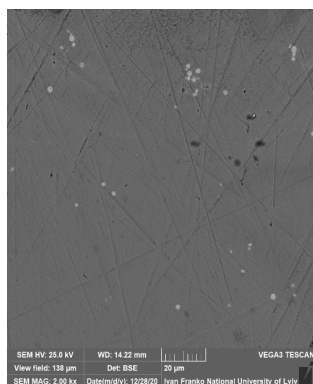


Fig. SEM-image (BSE-mode) of the $\text{Tb}_2\text{Co}_{16}\text{Mg}_{0.5}\text{Al}_{0.5}$ alloy (left) and selected discharge curves for the Ni-MH battery prototype with the $\text{Tb}_2\text{Co}_{16}\text{Mg}_{0.5}\text{Al}_{0.5}$ -based electrode (right)

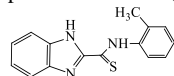
**XRD STUDIES OF THE COMPLEX COMPOUND OF COPPER(II)
WITH SUBSTITUTED HETEROCYCLIC THIOAMIDES**

Gordienko O., Sydoruk T., Titov T., Korinenko B., Khutko M.

Vinnitsia National Technical University, Ukraine

tarastitov88@gmail.com

The crystalline structure of compound (Fig. 1) is a salt of a complex cation and perchlorate anion (1:2 ratio). The complex cation consists of copper(II) cation, thioamide ligand



and isopropyl alcohol (1:2:1 ratio). The hydrogen atom of the hydroxyl

group in isopropyl alcohol is objectively observed, which suggests that the copper atom is neutrally coordinated with the isopropyl alcohol molecule. The copper atom is the five-coordinated atom (coordination polyhedron – distorted square pyramid). The atoms of sulfur and nitrogen forming the basis of the pyramid do not lie in the same plane (the angle between the lines N(1)...S(1) and N(2)...S(2) is 26°), which is probably due to repulsion between sulfur atoms and atoms of bicyclic fragments (shortened intramolecular bonds S(1)...H(17) 2.88 Å (the sum of van der Waals radii 3.00 Å [1], S(2)...C(2) 3.33 Å (3.55 Å), S(2)...H(2) 2.75 Å (3.00 Å)). Bicyclic fragments of the ligands are flat with an accuracy of 0.01 Å. The five-member metal cycle Cu(1), S(1), C(8), C(7), N(1) is in the envelope conformation. The deviation of the S(1) atom from the mean square of other atoms is 0.1 Å. Metal cycle Cu(1), S(2), C(23), C(22), N(4) is flat with an accuracy of 0.01 Å. The thionic group S(1)=C(8) is somewhat turned relative to the bicyclic fragment (torsion angle S(1)–C(8)–C(7)–N(1) 8.9(6)°, whereas the thionic group S(2)=C(23) lies in the benzimidazole plane (torsion angle S(2)–C(23)–C(22)–N(4) 2.4(5)°). The atoms N(3) and N(6) have a trigonal-planar configuration, despite the shortened intramolecular bonds H(3N)...H(2N) 1.88 Å (2.32 Å), H(3N)...N(2) 2.43 Å (2.66 Å), H(6N)...H(5N) 1.78 Å (2.32 Å), H(6N)...N(5) 2.29 Å (2.32 Å).

Due to rotation around the bond Cl(1)–O(5) perchlorate anion [ClO₄]⁻ in the copper(II) complex exists in two conformations with the contributions of 82 and 18%, respectively.

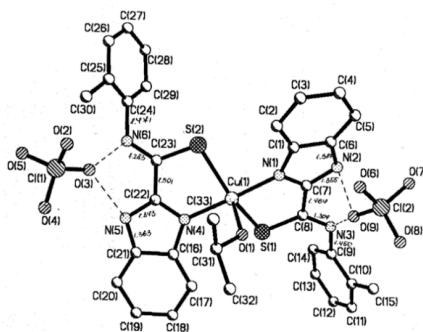


Fig. 1. Molecular structure of copper(II) complex

The most important bond lengths, Å: Cu(1)–S(1) 2.398(5), Cu(1)–N(1) 1.968(5), Cu(1)–S(2) 2.356(4), Cu(1)–N(4) 1.945(5), S(1)–C(8) 1.691(6), N(1)–C(7) 1.317(9), C(7)–C(8) 1.464(9), N(1)–C(9) 1.388(4), N(2)–C(7) 1.355(8), N(3)–C(8) 1.305(8), S(2)–C(23) 1.687(7), N(4)–C(22) 1.305(8), C(22)–C(23) 1.501(6) N(6)–C(23) 1.284(8), N(4)–C(16) 1.424(9), N(5)–C(22) 1.344(7). Valence angles, grad: N(1)–Cu(1)–S(1) 84.6(5), N(1)–Cu(1)–S(2) 93.5(5), N(4)–Cu(1)–S(2) 84.2(4), N(4)–Cu(1)–S(1) 96.9(6), S(2)–Cu(1)–S(1) 145.8(7), N(4)–Cu(1)–N(1) 177.6(2), N(4)–Cu(1)–O(1) 91.0(2), N(1)–Cu(1)–O(1) 90.5(2), N(4)–Cu(1)–S(2) 84.2(4), O(1)–Cu(1)–S(2) 115.4(7)

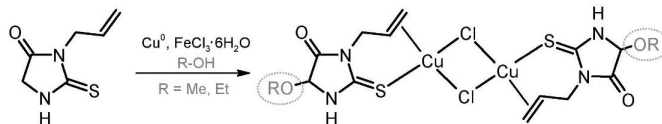
**UNEXPECTED OXIDATIVE C-H ALCOHOL FUNCTIONALIZATION OF
2-THIOHYDANTOINE DERIVATIVE DURING ELECTROCHEMICALLY
ASSISTED CuCl π -COMPLEX FORMATION WITH
Fe(III)/Cu(0) SOURCE OF Cu(I)**

*Fedorchuk A. A.*¹, Slyvka Yu. I.², Mys'kiv M. M.²

¹Institute of Nuclear Physics Polish Academy of Sciences, PL-31342 Krakow, Poland

²Department of Inorganic Chemistry, Ivan Franko National University of Lviv,
Kyryla i Mefodiya Str., 6, 79005, Lviv, Ukraine
andrii.fedorchuk@ifj.edu.pl

In the present work, we present a synthesis and crystal structures of two new CuCl π -complexes [Cu₂(me-ath)₂Cl₂] (**1**), [Cu₂(et-ath)₂Cl₂] (**2**) with 5-alkoxy-3-allyl-2-thiohydantoin, which were formed *in situ* from 3-allyl-2-thiohydantoin during electrochemically assisted synthesis in corresponding alcohol solutions (Scheme 1). As far as authors are concerned, similar reactions have not been previously submitted for this class of compounds and as a result, mechanism of this reaction is currently unstudied. Nevertheless, it is reasonable to suggest, that a crucial role in it is caused by the Fe ions used in a Fe(III)/Cu(0) source of Cu(I) ions, since, in similar systems with Cu(II)/Cu(0) source, such reaction hasn't been observed.



Scheme 1. Scheme of the π -complexes formation

Both complexes crystallize in the centrosymmetric $P2_1/c$ space group in a form of dimeric [Cu₂L₂Cl₂] fragments in which both *R*- and *S*- isomers of the new-formed ligand are presented. In these compounds, Cu(I) atoms have a trigonal-pyramidal coordination environment formed with two bridge Cl atoms (one in basal and one in apical position) and two coordination sites of ligand molecules – namely – thiogroup S atom and C=C double bond of the allyl group. The main difference between these two compounds is in the Cu–Cl_{apical} distance, which is equal to 2.7454(8) Å in **1** and 3.057(2) Å in **2**, which can be explained by the larger sterical hindrances for crystal packing in the case of ethoxy derivative compared to the methoxy one.

Table 1. Table 1. Selected crystal data of **1** & **2**

	Composition	V, Å ³	Cu–Cl _{apical} distance, Å	C7=C8 distance, Å
1	[Cu ₂ (me-ath) ₂ Cl ₂]	1051.03(9)	2.7454(8)	1.365(4)
2	[Cu ₂ (et-ath) ₂ Cl ₂]	1127.38(14)	3.057(2)	1.361(4)

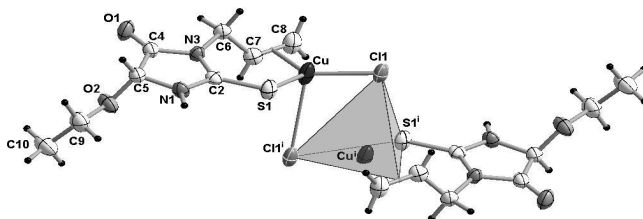


Fig. 1. Fragment of crystal structure **2**. Symmetry code: (i) 1-x 1-y, -z

СИНТЕЗ ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ ГІДРАТОВАНИХ КОБАЛЬТ(II) І МАНГАН (II) ФОСФАТІВ

Філіпова П. О., Антрапцева Н. М., Козачук Т. В.

Національний університет біоресурсів і природокористування України, Київ, Україна
aspirant_nubiru@ukr.net

Можливість керовано змінювати склад цільового продукту, а відповідно і його експлуатаційні характеристики, варіюючи для цього під час синтезу складом вихідних реагентів – актуальна задача сучасної хімічної промисловості.

Мета даної роботи – встановити умови керованого синтезу твердого розчину гідратованих кобальт(II) і манган(II) фосфатів.

Синтез здійснювали за умов, що забезпечують спільне осадження катіонів Co^{2+} і Mn^{2+} у вигляді середніх фосфатів. Для цього методом залишкових концентрацій досліджували взаємодію між розчинами відповідних сульфатів і осаджувача. Конкретні умови осадження фосфатів та особливості утворення твердого розчину заданого складу встановлювали за результатами визначення в окремих серіях дослідів залежності складу твердої фази від рН середовища. Його змінювали, використовуючи в якості осаджувача водні розчини Na_2HPO_4 , Na_3PO_4 або їх суміш. Співвідношення в складі вихідних розчинів $n = \text{P}/\sum\text{Co}^{2+}, \text{Mn}^{2+}$ підтримували рівним 0,67; $K = \text{Co}^{2+}/\text{Mn}^{2+}$ варіювали в межах від 25.0 до 1.5 мол. %. Концентрацію вихідних розчинів змінювали в інтервалі 0.05–0.25 моль/л. Температуру осадження фіксували в межах 50–75 °С.

Ідентифікацію твердої фази та її дослідження виконували, використовуючи хімічний, рентгенофазовий та ІЧ-спектроскопічний методи аналізу.

Відповідно до результатів комплексного аналізу твердої фази, що утворюється у разі використання осаджувачів різного складу (Na_2HPO_4 , $\text{Na}_2\text{HPO}_4:\text{Na}_3\text{PO}_4=2:1$ та $\text{Na}_2\text{HPO}_4:\text{Na}_3\text{PO}_4=1:1$), встановлено, що найбільший ступінь заміщення кобальту манганом досягається за використання водного розчину складу $\text{Na}_2\text{HPO}_4:\text{Na}_3\text{PO}_4=1:1$. Область гомогенності твердого розчину $\text{Co}_{3-x}\text{Mn}_x(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$, одержаного за цих умов становить $0 < x \leq 1.00$. У разі використання в якості осаджувача водного розчину Na_2HPO_4 вона значно вужче і становить $0 < x \leq 0.54$, а $\text{Na}_2\text{HPO}_4:\text{Na}_3\text{PO}_4 = 2:1 - 0 < x \leq 0.70$.

Варіюючи під час синтезу склад вихідних реагентів (співвідношення $K = \text{Co}^{2+}/\text{Mg}^{2+}$) було встановлено, що вміст кобальту і магнію в складі фосфатів октагідратів можна змінювати в широких межах (таб.).

Таблиця. Залежність складу фосфатів $\text{Co}_{3-x}\text{Mn}_x(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$, $0 < x \leq 1.00$, від співвідношення $K = \text{Co}/\text{Mn}$ у складі вихідних реагентів (осаджувач $\text{Na}_2\text{HPO}_4:\text{Na}_3\text{PO}_4=1:1$)

K = Co/Mn, мольне	Склад твердої фази				Хімічний
	Мас. %				
	Co	Mn	P	H ₂ O	
25.0	41.77	0.54	13.62	15.86	$\text{Co}_{2.9}\text{Mn}_{0.1}(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$
9.0	40.15	1.35	13.50	15.92	$\text{Co}_{2.75}\text{Mn}_{0.25}(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$
4.0	37.48	2.74	14.22	16.23	$\text{Co}_{2.51}\text{Mn}_{0.49}(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$
2.5	34.70	4.13	14.31	16.33	$\text{Co}_{2.27}\text{Mn}_{0.73}(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$
1.6	31.36	5.83	14.87	16.36	$\text{Co}_{2.0}\text{Mn}_{1.0}(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$
1.5	28.49	9.36	15.79	16.02	$\text{Co}_{2.0}\text{Mn}(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O} + \text{Mn}_{3.0}(\text{PO}_4)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$

Насичений твердий розчин, що утворюється за цих умов, має склад $\text{Co}_{2.0}\text{Mn}_{1.0}(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$. Спроби отримати кобальт(II)-манган(II) фосфат октагідрат із вмістом мангану(II) більшим за 5.83 мас. % ($K = \text{Co}^{2+}/\text{Mn}^{2+} < 1.6$) призводить до осадження механічної суміші двох кристалічних фаз.

**SOLUBILITY OF MANGANESE IN THE BINARY
La–Zn AND Gd–Zn INTERMETALLICS**

Chorna N. O., Kordan V. M., Zelinska O. Ya., Zelinskyy A. V., Pavlyuk V. V.

Department of Inorganic Chemistry, Ivan Franko National University of Lviv, Lviv, Ukraine
chorna.nata15@gmail.com

Intermetallic compounds remain the basis of promising materials for different fields of modern technics and industry. The accumulation of experimental data on phase diagrams of the metallic systems, stability ranges of new phases, their crystal structure, physical and chemical properties promotes the purposeful synthesis of the functional materials with the desired properties.

Previous research showed that binary phases containing rare earth and 3d-transition metal and having the composition AB, AB₂, AB₃, AB₅ or A₂B₁₇ can reversibly accumulate hydrogen. The sorption ability and electrochemical properties of the accumulators constructed on their basis can be improved by doping the binary compounds with other elements.

Here we report the solubility of Mn in La–Zn and Gd–Zn binary compounds as a part of systematic study of {La,Gd}–Mn–Zn systems and investigation of the influence of the third element on the effectiveness of the electrochemical hydrogenation of the binary phases.

The alloys were synthesized by arc melting of pure metals (> 99.9 wt. %, commercial) under a purified argon atmosphere with further annealing at 500 °C for two month. X-ray phase analysis of the samples was carried out using the XRD powder diffraction data collected on the diffractometer DRON-2.0M (Fe K α -radiation). The quantitative composition of the alloys was studied by X-ray fluorescent (ElvaX Pro analyser) and energy dispersive X-ray spectroscopy (scanning electron microscope Tescan Vega3 LMU, Oxford Instruments Aztec ONE system).

{La,Gd}–Zn systems are characterized by the formation of binary phases with stoichiometry 1:1, 1:2, 1:5, 2:17 (for both systems) at 500 °C [1–2]. The phases with stoichiometry 1:4, 1:5, 1:11 and 1:13 are typical for La–Zn system, while for the Gd–Zn system the phases GdZn₃, Gd₃Zn₁₁, Gd₁₃Zn₅₈, Gd₃Zn₂₂ and GdZn₁₂ are formed. Atomic radii of rare-earth element ($r_{La} = 1.86 \text{ \AA}$, $r_{Gd} = 1.79 \text{ \AA}$) influences on the type of formed compounds. X-ray analysis of the ternary alloys showed the formation solid solutions of substitution with Mn. A small difference between the atomic radii of Mn and Zn ($r_{Mn} = 1.28 \text{ \AA}$, $r_{Zn} = 1.34 \text{ \AA}$) promotes substitution however different physical and chemical characteristics causes the formation limited solid solutions.

The homogeneity ranges of the solid solutions were determined based on the changes of lattice parameters with the increasing Mn-concentration obtained from X-ray data. For the zinc-rich alloys the solubility of Mn in the binary compounds was confirmed by energy dispersive X-ray analysis. At the experimental conditions, the largest homogeneity ranges have the solutions based on the phases LaZn (4,4 at.% Mn), LaZn₅ (6 at.% Mn), La₂Zn₁₇ (3,9 at.% Mn) and LaZn₁₁ (2,9 at.% Mn) in the system La– Mn–Zn, and based on the phases GdZn (4,5 at.%), GdZn₂ (4,6 at.% Mn), Gd₃Zn₁₁ (3,7 at.% Mn) and Gd₂Zn₁₇ (3,5 at.% Mn). The solubility of Mn in other binary compounds does not exceed 2 at. %.

[1] Dychko N., Andrash V., Kordan V., Zelinska O., Zelinskiy A., Pavlyuk V. Crystal structure and electrochemical hydrogenation of LaZn_{5-x}Mn_x solid solution. Visn. Lviv Univer. Ser. Chem. 2018, Iss. 59(1). P. 107-114 (in Ukrainian).

[2] Dychko N.O., Andrash V.V., Porodko O.Yu., Zelinska O.Ya., Pavlyuk V.V. Phase equilibria in the {La,Gd}–Mn–Zn ternary systems at 0-70 at.% Zn. XIII Int. Conf. Cryst. Chem. Int. Compd. (September 25-29, 2016). Lviv, Ukraine. 2016. P. 66.

**ORGANIC CHEMISTRY /
ОРГАНІЧНА ХІМІЯ**

КАТАЛІТИЧНИЙ СИНТЕЗ ЗМІШАНИХ АНГІДРИДІВ БЕНЗОЇНОЇ
ТА АЛІФАТИЧНИХ КИСЛОТ*Аніщенко В. М., Редько А. М., Рибаченко В. І., Аніщенко Г. В.*Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України,
Київ, Україна
anishchvic@gmail.com

Останнім часом особлива увага приділяється розробці методів отримання хімічних продуктів, які задовольняють принципам «зеленої хімії». Одним з таких методів, який дозволяє здійснити ряд хімічних перетворень з високою швидкістю, селективністю і виходом кінцевого продукту є інверсійний трансфазний каталіз (ІТК). Функція каталізатора в цьому методі, на відміну від класичного трансфазного каталіза, полягає в транспортуванні ліпофільного субстрату з органічної фази в водну.

Так нами було синтезовано декілька змішаних ангідридів бензоїної та аліфатичних кислот. Було проаналізовано вплив складу реакційної суміші, структури каталізатору, природи розчинника та температури на перебіг каталітичного процесу за допомогою методу обернено-фазової вискоєфективної рідинної хроматографії (ОБ-ВЕРХ), а також ІЧ- та ЯМР-спектроскопії.

Найбільша константа швидкості і найбільший вихід спостерігаються при використанні як каталізатору 4-метоксипіридин N-оксиду. А основніші 4-морфоліно- та 4-диметиламіно- пиридин N-оксиди показали меншу ефективність як каталізатори в досліджуваній реакції. Цей факт можна пояснити зменшенням реакційної здатності іонного інтермедіату з підвищенням основності каталізатора, що призводить до зміни лімітуючої стадії, тобто $k_2 < k_1$ при каталізі 4-морфоліно- та 4-диметиламіно-піридин N-оксидом.

В умовах 5-ти кратного надлишку карбоксилат іону аліфатичної кислоти проведено синтез відповідних змішаних ангідридів карбонових кислот шляхом бензоїлювання ацетату, пропіонату, ізовалеріату та стеарату натрію. Отримання стеарат-бензоїного ангідриду проводили за початкової концентрації стеарата натрію 0,120 М. Більша концентрація стеарата перешкоджає розшаруванню двофазної системи, що унеможливило відокремлення органічної фази. Вихід ангідридів склав понад 95 %.

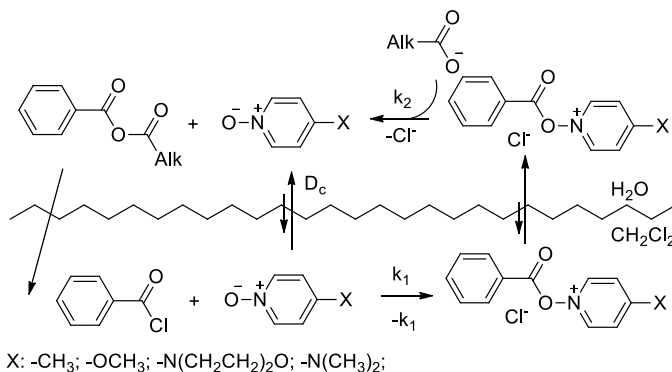


Рис. 1. Схема ІТК процесу утворення змішаного ангідриду в двофазній системі вода-дихлорметан

ДОСЛІДЖЕННЯ РЕАКЦІЇ ЙОДАРИЛЮВАННЯ МЕТИЛПРОПАРГІЛСУЛЬФОНУ ТА ПРОПАРГІЛОВОГО СПИРТУ

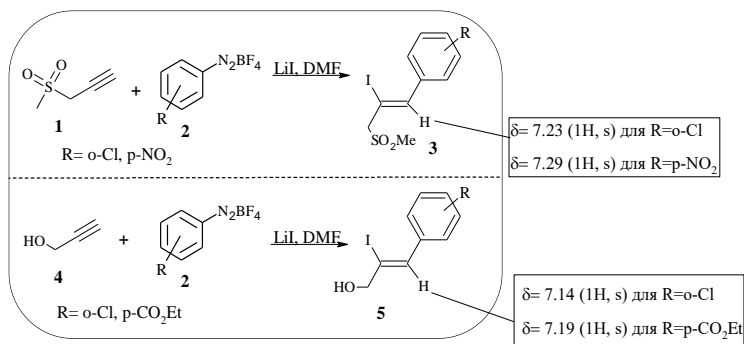
Бутенко С.¹, Роговик М.², Максимович І.², Солудчик О.², Піткович Х.¹, Походило Н.¹,
Литвин Р.¹, Обушак М.¹

¹Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Кирила і Мефодія, 6,
79005 Львів, Україна

²НДЕКЦ при Головному управлінні МВС України у Львівській області,
вул. Коношинна, 24, 79040 Львів, Україна
serhii.butenko@lnu.edu.ua

Функціоналізовані похідні йодакенив мають важливе значення для сучасного органічного синтезу. Реакції крос-сполучення, що каталізуються перехідними металами, є одними з найважливіших методів створення C–C зв'язку. У таких перетворення переважно використовують винільодиди як вихідні реагенти, тому розробка методів синтезу ненасичених сполук, що містять атом йоду при подвійному зв'язку є актуальною задачею органічного синтезу. У літературі описані різні синтетичні підходи до отримання винілгалогенідів, але далеко не всі з них можна реалізувати, використовуючи відносно доступні реагенти.

Ми розробили одностадійний метод синтезу деяких функціоналізованих β-йодстиренів **3** та **5**, що виключає необхідність застосування дорогих реагентів та важких металів, який полягає у трикомпонентній взаємодії арендіазоній тетрафторборатів **2** з функціоналізованими алкінами **1,4** та йодидом літію у середовищі диметилформаміду.



Згідно даних GC-MS, отриманих аналізом реакційних сумішей після закінчення реакції, основними продуктами є арилйоди, які утворюються при безпосередній взаємодії арендіазоній тетрафторборатів **2** з літій йодидом, та β-йодстирени **3,5**. Слід зауважити, що сполуки **3** та **5** утворюються у вигляді суміші E- та Z-ізомерів зі значним переважанням продукту *цис*-приєднання арильного радикалу та йоду (для сполук **3** співвідношення E/Z ~ 1:8; для сполук **5**-E/Z ~ 1:10). За допомогою колонкової хроматографії вдається виділити β-*цис*-йодстирени в індивідуальному вигляді з практичними виходами 40–70% та належно їх охарактеризувати. Винільні протони сполук **3** і **5** у спектрах ЯМР ¹H дають чіткі синглети у межах 7.14–7.29 м.ч., що вказує на *цис*-розміщення арилу та йоду відносно подвійного зв'язку і добре корелює з літературними даними для структурно подібних сполук [1].

Робота виконана за підтримки Національного фонду досліджень України
(проект № 2020_1/0166).

[1] *Angew. Chem. Int. Ed.* 2011, **50**, 8316–8319.

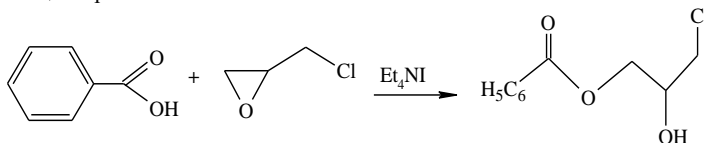
ВПЛИВ ТЕТРАЕТИЛАМОНІЙ ЙОДИДУ НА РЕАКЦІЮ БЕНЗОЙНОЇ КИСЛОТИ З ЕПІХЛОРГІДРИНОМ В ТЕТРАГІДРОФУРАНІ*Гембарук В. В.¹, Бахалова С. А.¹, Швед О. М.¹, Янова К. В.²*

¹Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна
²ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет», Дніпро, Україна
hembaruk.v@donnu.edu.ua

Реакції між карбоновими кислотами і оксиранами викликають значний інтерес через отримання ряду технологічно важливих продуктів: оптично прозорих матеріалів, епоксидних смол, модифікованих компонентів покриттів і клеїв, різних пластифікаторів. Дослідження четвертинних амонієвих солей як каталізаторів реакції є широко використовуваними в органічному синтезі. В попередніх дослідженнях було показано, що саме четвертинні амонієві солі є ефективними каталізаторами ацидолізу епіхлоргідрину. Тому подальше вивчення впливу їх на швидкість реакції ацидолізу епіхлоргідрину є актуальною задачею.

Метою даної роботи є дослідження впливу природи та концентрації каталізатору – тетраетиламоній йодид – на реакційну здатність бензойної кислоти в каталітичній реакції з епіхлоргідрином в присутності тетрагідрофурану.

Реакція перебігає за схемою:



Об'єктами дослідження обрано бензойну кислоту (0,300 моль/л) та епіхлоргідрин, який виступає в якості субстрата та розчинника одночасно. В якості каталізатора реакції обрано тетраетиламоній йодид, концентрація якого варіюється в межах 0,00125÷0,0050 моль/л. Експериментальні дослідження проводилися при температурі 60 °С у бінарному розчиннику епіхлоргідрин:тетрагідрофуран (1:1, об.%). Хід реакцій відстежували шляхом вимірювання концентрації карбонової кислоти шляхом потенціометричного титрування кислотно-лужної речовини.

В результаті роботи встановлено нульовий порядок реакції за бензойною кислотою та перший за тетраетиламоній йодидом. Знайдено константи швидкості некаталітичної та каталітичної стадій. Доведено ефективність тетрабутиламоній йодиду як каталізатора реакції. Отримані дані порівняно з відповідними даними для четвертинних амонієвих солей.

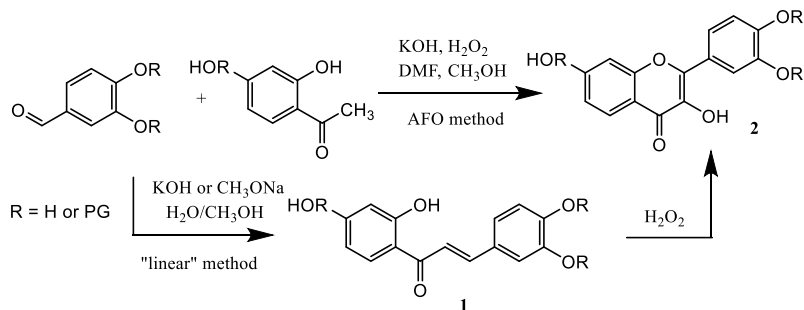
СИНТЕЗ НОВИХ ПОХІДНИХ ХРОМОНУ ТА ВИВЧЕННЯ ЇХ КОМПЛЕКСОУТВОРЕННЯ

Демидов О. О., Манвелян А. А., Гладков С. С.

Харківський національний університет ім. В. Н. Каразіна, НДІ хімії та хімічний факультет, Хірків, Україна
eugenekladkov@gmail.com

Похідні хроному – флавоноли що мають широке розповсюдження у природі. Багато похідних цього класу сполук мають різноманітні види біологічної активності, тому їх широко використовують як фізіологічно активні сполуки – антиоксиданти та вітаміни. Як і інші поліфеноли, похідні хроному є перспективними лігандами що можуть використовуватися в аналітичній хімії, наприклад в якості металофлуорохромними індикаторами для детектування та кількісного визначення іонів деяких металів.

У синтезі флавонолів та гетероциклічних похідних хроному може бути використана як традиційна лінійна стратегія синтезу через стадію утворення ненасичених кетонів (1), так і багатокомпонентна одно-реакторна стратегія (2) в обох випадках з використанням реакції Альгара-Фліна-Оямади (AFO) [1]. Використання одnoreакторної реакції AFO дозволяє у деяких випадках покращити вихід та підвищити доступність цільових продуктів – флавонолів та гетероарилхроمونів.



В процесі синтезу флавонолів нами було використано захист гідроксильних груп (PG) вихідних реагентів бензильними фрагментами (Вп-захист). Видалення захисних Вп-груп на останній стадії синтезу здійснювали відновленням бензилзаміщених флавонолів воднем.

Дослідження спектральних властивостей кінцевого флавонолу, а також його бензильованого попередника в присутності іонів металів другої групи в ацетонітрильних та метанольних розчинах показали, що утворення комплексів з іонами Mg²⁺ і Zn²⁺ приводить до гіпсхромного зсуву смуги випромінювання, тобто зелена флуоресценція досліджуваного ліганду змінюється на синю флуоресценцію комплексу. Присутність інших іонів металів не впливала на спектральні властивості флавонолів. Обидва ліганди мали однакові положення та зсуви смуг випромінювання, що говорить про утворення комплексів тільки одним центром, що складається з 3-гідрокси- та карбонільної груп.

[1] Serdiuk I. E., Roshal A. D., RSC Adv, 2015, 5, P. 102091-102203.

ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕРМІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ПЛІВОК, УТВОРЕНИХ НА ОСНОВІ КОМПОЗИЦІЙ УРОНАНТНИХ ПОЛІСАХАРИДІВ МЕТОДОМ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНОЇ СКАНУЮЧОЇ КАЛОРИМЕТРІЇ

Діль К. В., Оковитий С. І.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара,

Дніпро, Україна

katerina.vlodimirovna@ukr.net

Вступ. Одним з методів для дослідження термічних властивостей плівок, які були зроблені на основі композицій уронантних полісахаридів є диференційна скануюча калориметрія (ДСК). Даний метод полягає у визначенні за допомогою калориметра основних теплофізичних характеристик досліджуваних об'єктів.

Метою роботи було дослідити вміст зовнішньої та внутрішньої зв'язаної вологи у складі плівок харчових, утворених на основі композицій уронових полісахаридів, зшитих іонами кальцію, та визначення діапазону температур, за якого об'єкти дослідження є стійкими до термічних процесів.

Результати та обговорення. Термограми були отримані в діапазоні температур від 25 °С до 250 °С при постійній швидкості нагріву 5 °С/хв на калориметрії «Derivatograph» STA 6000. Візуалізацію процесу було відтворено у програмі Pyris. Точність визначення температури становила ± 10 °С, теплового ефекту – ± 3 %. За основу розробки технології було покладено хімічну активність іонів кальцію, яка виникає у момент його потрапляння до високомолекулярного розчину суміші полісахаридів уронатної природи.

Були створені системи: зразок 1 (*гіалуронова кислота високомолекулярна : гіалуронова кислота низькомолекулярна : Ca²⁺*); зразок 2 (*гіалуронова кислота низькомолекулярна : ксантан : Ca²⁺*); зразок 3 (*ксантан : пектин : Ca²⁺*).

Виходячи з даних, що динаміка втрати маси досліджуваного зразка за температур значно вища, ніж температура розриву самих міжмолекулярних зв'язків з водою у полімерній матриці гелю, свідчить про деструкцію полімерів. Після того як відбувається видалення вологи починається руйнація зв'язків.

Таблиця 1. Результати термодеструкції досліджуваних зразків

Зразок	$\Delta m_1, \%$	Відповідає відриву	$\Delta m_2, \%$	Відповідає відриву
1	58–108 °С		207–228 °С	
	8	H ₂ O вільн.	8.8	H ₂ O зв'язув.
	$\Delta m_3, (\text{заг.}) = 16.8 \%$			
2	94–106 °С		202–213 °С	
	22	H ₂ O вільн.	18	H ₂ O зв'язув.
	$\Delta m_3, (\text{заг.}) = 40 \%$			
3	87–112 °С		202–222 °С	
	3.3	H ₂ O вільн.	9.5	H ₂ O зв'язув.
	$\Delta m_3, (\text{заг.}) = 12.8 \%$			

Висновки

1. Різниця температур сканування свідчить про активну втрату вологи з меншою концентрацією полісахаридів, тому, що точок утримання вологи у даних системах менше.

2. Загальна втрата вологи для досліджуваних зразків склала 16.8 % (зразок 1), 40 % (зразок 2), 12.8 % (зразок 3) відповідно.

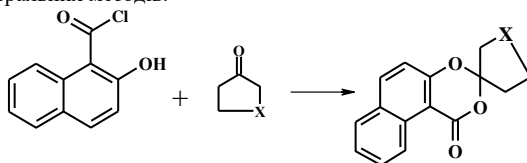
ПЕРЕГРУПУВАННЯ СПИРОПОХІДНИХ 1,3-НАФТОДОКСИН-1-ОНІВ
ПІД ДІЄЮ РЕАГЕНТУ ВІЛЬСМАЙЄРА-ХААКА

Ковтун А. В., Варениченко С. А., Фарат О. К., Марков В. І.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет», Дніпро, Україна
kovtunchem@gmail.com

Перегрупування гемінально розташованих гетероатомів в гетероциклічних системах під дією реагенту Вільсмайєра-Хаака – перспективний напрямок синтезу поліфункціональних сполук. Дією цього реагенту на гемінальні азини та 1,3-бензоксазини з високими виходами було отримано похідні акридину та форміліпохідні ксантену, які можна використовувати в якості білдинг-блоків для подальших синтезів [1-2]. На кафедрі Ф та ТОР ДВНЗ УДХТУ відкрито нове перегрупування гемінальних бензодіоксинів до хлорохідних ксантенів під дією реагенту Вільсмайєра-Хаака. Було вирішено розширити число прикладів даного перегрупування на нових модельних сполуках – 1,3-нафтодіоксин-1-онах.

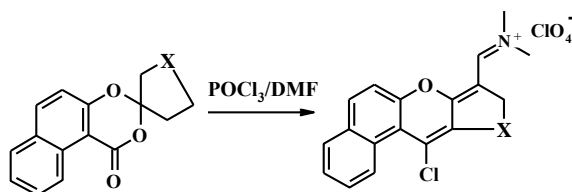
Сполуки **1a-d** отримано конденсацією хлорангідриду 2-гідрокси-1-нафтоїної кислоти з відповідними циклічними кетонами впродовж 5 годин при підвищеній температурі. Структуру продуктів конденсації **1a-d** підтверджено даними аналізу комплексу спектральних методів.



1a-d

a – X = -CH₂-; *b* – X = -(CH₂)₂-; *c* – X = -(CH₂)₃-; *d* – X = -CH₂-CH(CH₃)-

Взаємодія 1,3-нафтодіоксин-1-онів **1a-d** з трьох кратним надлишком формілюючого реагенту протягом 5 годин за температури 110 °С приводить до прогнозованого перегрупування з утворенням нових хлорохідних ксантенів **2a-d** з помірними виходами. Будову отриманих продуктів підтверджено даними ЯМР ¹H, ¹³C-спектроскопії та мас-спектрометрії. Наявність в структурі сполук **2a-d** двох реакційних центрів робить їх перспективними вихідними сполуками для подальших хімічних перетворень.



1a-d

2a-d

a – X = -CH₂-; *b* – X = -(CH₂)₂-; *c* – X = -(CH₂)₃-; *d* – X = -CH₂-CH(CH₃)-

[1] Markov V. I.; Farat O. K.; Varenichenko S. A.; Velikaya E. V. *Mendeleev Commun.* 2012, 22, 101.

[2] Farat O. K.; Ananyev I. V.; Varenichenko S. A.; Zaliznaya E. V.; Markov V. I. *Chem. Heterocycl. Compd.* 2019, 55, 38.

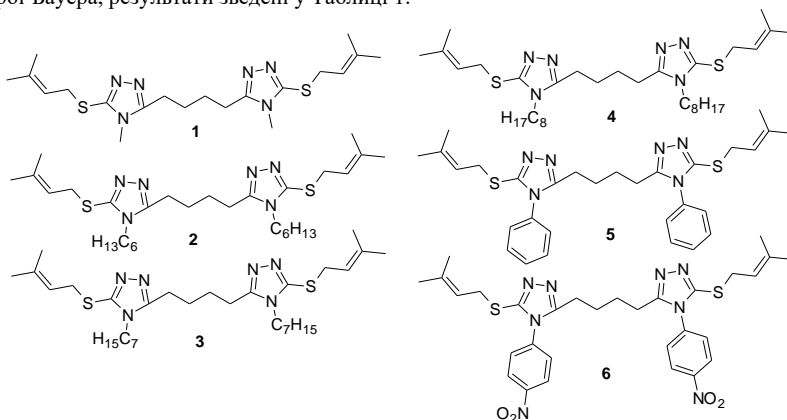
БІОАКТИВНІСТЬ ПРЕНІЛ-АЛКІЛЬОВАНИХ БІС-ТРИАЗОЛІВ

Король Н. І.¹, Головка-Камошенкова О. М.¹, Паллаг О. В.², Сливка М. В.¹¹ДВНЗ «УжНУ», хімічний факультет, Ужгород, Україна²ДВНЗ «УжНУ», науково-дослідний і навчальний центр молекулярної мікробіології та імунології слизових оболонок, Ужгород, Україна

nataliya.korol@uzhnu.edu.ua

В останні роки хімія триазолів та їх конденсованих гетероциклічних похідних привернули значну увагу завдяки їх синтетичному та біологічному значенню. Велика кількість представників 1,2,4-триазоловмісної циклічної системи була введена у широкий спектр терапевтичних препаратів, які включають протизапальні, заспокійливі, протимікробні та протигрибкові засоби.

Метою даного наукового дослідження було вивчення біологічної активності преніл-алкільованих біс-триазолів **1-6** (Рис. 1), яке було виконано дифузійним методом Кірбі-Бауера, результати зведені у Таблиці 1.

Рис 1. Досліджувані біс-триазоли **1-6**Таблиця 1. Порівняння мінімальної інгібуючої концентрації МІК (мг/мл) сполук **1-6** проти грампозитивних та грамнегативних бактерій

	<i>Pseudomonas aeruginosa</i>	<i>Staphylococcus aureus</i>	<i>Escherichia coli</i>	<i>Proteus mirabilis</i>	<i>Enterococcus faecalis</i>	<i>Salmonella enterica</i>	<i>Enterobacter cloacae</i>	<i>Klebsiella pneumoniae</i>	<i>Candida albicans</i>	<i>Saccharomyces cerevisiae</i>
1	128	256	ND	64	64	128	ND	ND	32	16
2	64	64	128	256	ND	64	64	256	64	ND
3	ND	ND	ND	64	128	128	ND	16	16	32
4	256	256	64	128	128	128	32	ND	ND	16
5	16	ND	16	32	128	64	32	32	256	64
6	64	64	128	256	ND	ND	16	256	32	32
CLT	ND	ND		ND		ND		ND	0.25	2
PCN	0.25	4	8	0.25	16	4	4	16	ND	ND
CFZ	2	4	16	2	16	32	8	8	ND	64

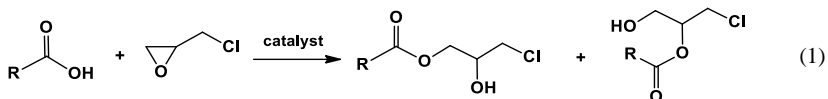
Примітка: CLT–клотримазол, PCN–пеніцилін, CFZ–цефазолін, ND–активності не виявлено при 256 µg/mL.

**СУМІСНИЙ ВПЛИВ ТЕМПЕРАТУРИ І ПОЛЯРНOSTІ РОЗЧИННИКА
НА РЕАКЦІЙНУ СИСТЕМУ «ЕПІХЛОРГІДРИН – ПРОПІОНОВА КИСЛОТА –
ТЕТРА-*n*-БУТИЛАМОНІЙ ЙОДИД»**

Кравчук А. В., Ютілова К. С., Швед О. М.

Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна
kravchuk_a@donnu.edu.ua

Реакція карбонових кислот з епіхлоргідрином (ЕХГ) лежить в основі синтезу гліцидилкарбонових естерів (1), які є перспективними мономерами для отримання полімерних матеріалів і композицій з різноманітними властивостями та широким спектром використання.



Реакція каталітичного ацидолізу ЕХГ є модельною для вивчення механізму нуклеофільного розкриття оксиранового циклу карбоновими кислотами.

Особливості перебігу реакції (1) залежать від умов реакції, співвідношення реагентів. Проведення ацидолізу оксиранів в умовах надлишку останнього забезпечує зниження кількості бічних реакцій та утворення ізомерних гліцидилових естерів – 1-хлор-3-ацилокси-пропанолу-2 (головний продукт) та 1-хлор-2-ацилоксипропанолу-1 (мінорний продукт). Швидкість утворення естерів та їх співвідношення визначаються природою каталізатора. Ефективними каталізаторами реакції є галогеніди тетраалкіламонія.

Метою роботи є дослідження впливу температури і полярності розчинника на ацидоліз епіхлоргідрину пропіоновою кислотою в присутності – тетра-*n*-бутиламоній йодиду. Об'єктами дослідження є пропіонова кислота, епіхлоргідрин, тетра-*n*-бутиламоній йодид ($n\text{-C}_4\text{H}_9$)₄NI. Дослідження проведені у надлишку ЕХГ в розчинниках: епіхлоргідрин, бінарні суміші епіхлоргідрин : тетрагідрофуран (ТГФ, 50 % об.) та епіхлоргідрин : нітробензол (НБ, 50 % об.). Експеримент здійснювали для концентрації кислоти 0,2 моль/л, каталізатора 0,00125; 0,00375; 0,00250; 0,00500 моль/л в температурному інтервалі 40 ÷ 80 °С. Контроль за перебігом реакції здійснювався методом кислотно-основного рН-потенціометричного титрування розчином лугу. Чистоту вихідних речовин оцінювали хроматографічно, за даними ІЧ-спектроскопії.

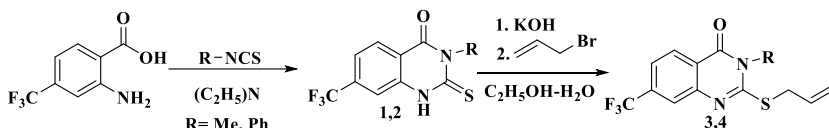
За результатами роботи визначено, що ($n\text{-C}_4\text{H}_9$)₄NI є ефективним каталізатором реакції (1) у розчинниках різної полярності, встановлено порядки реакції за кислотою нульовий і перший – за каталізатором у розчинниках різної полярності. Розраховано спостережувані, некаталітичні та каталітичні константи швидкості. Встановлено лінійну залежність швидкості реакції пропіонової кислоти з ЕХГ від температури у координатах рівняння Арреніуса у розчинниках ЕХГ, ЕХГ : ТГФ, ЕХГ : НБ. Обчислено активаційні параметри процесу, значення яких є характерними для реакцій, що перебігають за S_N2-механізмом. Показано, що полярність реакційного середовища впливає на швидкість реакції ацидолізу ЕХГ: зі зниженням полярності розчинника, тобто при переході від ЕХГ : НБ до ЕХГ і ЕХГ : ТГФ, швидкість реакції розкриття циклу ЕХГ пропіоновою кислотою збільшується. Методами кореляційного аналізу здійснено оцінку сумісного впливу температури і полярності на реакційну здатність пропіонової кислоти у реакції (1). Отримані результати надають можливість оптимізації умов проведення реакції, зокрема у синтезі полімерних матеріалів на основі епоксидних сполук.

СИНТЕЗ ТА ЕЛЕКТРОФІЛЬНА ЦИКЛІЗАЦІЯ 2-АЛІЛТІО-3-МЕТИЛ(ФЕНІЛ)-7-ТРИФЛУОРОМЕТИЛХІНАЗОЛІН-4(3H)-ОНІВ

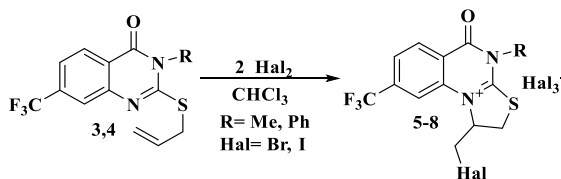
Кум Д. Ж., Кут М. М., Онисько М. Ю., Балог І. М., Лендел В. Г.
ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород, Україна
dianabereksazi@gmail.com

Заміщені хіназоліни та їхні конденсовані аналоги є перспективними об'єктами для раціонального дизайну біологічно активних сполук як прототипів інноваційних лікарських засобів. Це зумовлено тим, що хіназоліновий фрагмент є структурним елементом багатьох природних алкалоїдів. Перспективним методом синтезу конденсованих похідних хіназоліну є електрофільна внутрішньомолекулярна гетероциклізація, потенціал якої на сьогоднішній день повністю не розкритий. Дана робота присвячена дослідженню процесу електрофільної циклізації алільних тіоетерів 7- CF_3 -заміщеного хіназолін-4-ону такими електрофільними реагентами як галогени (бром, йод).

В якості модельних об'єктів використано 2-алілтїо-3-метил(феніл)-7-трифлуорометилхіназолін-4(3H)-они **3,4**, які одержані алкілуванням алїлбромідом тіонів **1,2** в лужно-спиртовому середовищі.



Модельні алільні тіоетери **3,4** мають декілька нуклеофільних центрів для атаки електрофільних реагентів, а саме, кратний зв'язок та ендосиклічний атом нітрогену в першому положенні хіназолінового циклу. Для дослідження регіохімії процесу електрофільної внутрішньомолекулярної циклізації 2-алілтїо-3-метил(феніл)-7-трифлуорометилхіназолін-4(3H)-они **3,4** обробили двократним надлишком галогенів (бром, йод) в середовищі хлороформу. Встановлено, що в результаті такої взаємодії відбувається регіоселективне анелювання тіазолінового циклу до остову хіназолінового циклу з утворенням трициклічних ангулярних структур у вигляді тригалогенонієвих солей 1-галогенометил-4-метил(феніл)-5-оксо-8-трифлуорометил-1,2,4,5-тетрагідротіазоло[3,2-*a*]хіназоліну **5-8**.



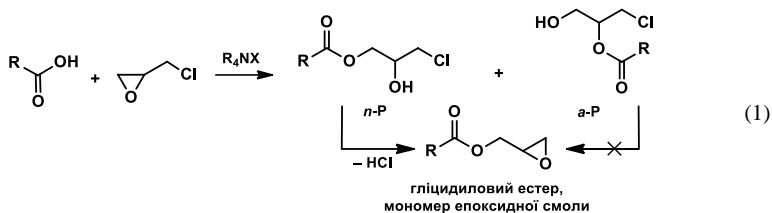
Будову всіх отриманих сполук підтверджено спектрами ЯМР (^1H та ^{13}C), ІЧ-спектрами та елементним аналізом.

Таким чином, в результаті даної роботи одержано раніше неописані тіони та алільні тіоетери 7- CF_3 -заміщеного хіназолін-4-ону, досліджено регіохімію галогенування 2-алілтїо-3-метил(феніл)-7-трифлуорометилхіназолін-4(3H)-онів та отримано потенційно біологічно активні галогеновмісні солі тіазолохіназоліну ангулярної будови – тригалогеніди 1-галогенометил-4-метил(феніл)-5-оксо-8-трифлуорометил-1,2,4,5-тетрагідротіазоло[3,2-*a*]хіназоліну.

КАТАЛІЗ РЕАКЦІЇ АЦЕТОЛІЗУ 2-(ХЛОРМЕТИЛ)ОКСИРАНУ СОЛЯМИ ТЕТРААЛКІЛАМОНІЮ

*Марценюк Н. С., Ютілова К. С., Швед О. М.*Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна
martseniuk.n@donnu.edu.ua

2-(Хлорметил)оксиран (епіхлоргідрин, ЕХГ) знаходить широке застосування у виробництві синтетичних поліолів, епоксидних полімерів, стабілізаторів хлорпохідних, іонообмінників смол для хімічного аналізу та інших галузях хімічної промисловості. Завдяки просторовій напруженості оксиранового циклу ЕХГ легко вступає у реакції нуклеофільного розкриття протоновмісними реагентами, такими як карбонові кислоти, з утворенням хлоргідринових естерів (1).



Згідно з правилом Красуського, естер *n-P* є продуктом «нормального» розкриття, естер *a-P* – «аномального» розкриття циклу. Лише продукт «нормальної» будови здатний до подальшої циклізації і перетворення на гліцидиловий естер, що використовується у синтезі епоксидних полімерів і композицій (1). Швидкість і регіоселективність реакції значною мірою залежить від властивостей каталізатора. Ефективними каталізаторами розкриття циклу оксирану є солі тетраалкіламонію R_4NX . Тому актуальною задачею є визначення оптимальних умов розкриття оксиранового циклу в залежності від температури, структури каталізатора, природи розчинника.

Метою роботи є дослідження впливу природи каталізатора на швидкість і регіоселективність реакції розкриття оксиранового циклу епіхлоргідрину оцтовою кислотою у присутності солей тетраалкіламонію у бінарному розчиннику епіхлоргідрин:тетрагідрофуран.

Об'єкти дослідження є оцтова кислота, епіхлоргідрин, тетраетиламоній бромід $(C_2H_5)_4NBBr$, тетраетиламоній йодид $(C_2H_5)_4NI$, тетраетиламоній ацетат $(C_2H_5)_4NOAc$, тетрабутиламоній ацетат $(C_4H_9)_4NOAc$. Концентрація каталізаторів варіювалася в діапазоні $0,00125 \div 0,00500$ моль/л, концентрація кислоти становила 0,2 моль/л. Кінетичні дослідження проводились методом кислотно-основного рН-потенціометричного титрування кислотного реагента у температурному інтервалі $40 \div 80$ °C у бінарному розчиннику ЕХГ:тетрагідрофуран (ТГФ) з об'ємним співвідношенням компонентів 1:1. Будову і співвідношення продуктів реакції підтверджували методом 1H ЯМР-спектроскопії.

За результатами дослідження встановлено нульовий порядок реакції (1) за кислотним реагентом, перший – за каталізатором для всієї дослідженої серії. Показано, що галогеніди і ацетати тетраалкіламонію є ефективними і регіоселективними каталізаторами ацетолізу ЕХГ. Експериментально доведено, що переважним продуктом реакції (1) в присутності галогенідів тетраалкіламонію у бінарному розчиннику ЕХГ:ТГФ є хлоргідриновий естер *n-P*. Розраховано активаційні параметри ацетолізу хлорметилоксирану солями тетраалкіламонію. Одержані дані дають можливість прогнозувати каталітичну активність галогенідів і ацетатів тетраалкіламонію у реакціях нуклеофільного розкриття оксиранового циклу у бінарному розчиннику ЕХГ:ТГФ.

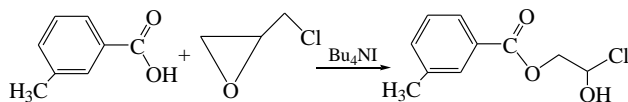
АЦИДОЛІЗ ХЛОРМЕТИЛОКСИРАНУ 3-МЕТИЛБЕНЗОЙНОЮ КИСЛОТОЮ В ПРИСУТНОСТІ ТЕТРАБУТИЛАМОНІЙ ЙОДИДУ

Марчук Л. С., Міщенко А. О., Бахалова Є. А., Швед О. М.

Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна
marchuk.l@donnu.edu.ua

Реакція карбонових кислот з заміщеними оксиранами, зокрема епіхлоргідрином (ЕХГ) лежить в основі синтезу гліцидилкарбонових естерів, які є перспективними мономерами епоксидних смол, що призначені для герметиків, клеїв, компонентів фарб, антикорозійних покриттів, цементних модифікаторів тощо. Каталітичний ацидоліз ЕХГ, крім практичного значення, використовується як модельна реакція для вивчення біохімічних процесів детоксикації речовин екзогенного характеру. Для прогнозування реакційної здатності карбонових кислот в реакції з епоксидними сполуками важливим є дослідження механізму реакції. Реакція бензойної кислоти з хлорметилоксираном є однією з найбільш практично значущих реакцій, що використовується у синтезу сполук з високою термостійкістю. Проте при варіюванні замісників у бензойній кислоті властивості реакції змінюються. Тому актуальним є здійснення систематичних дослідів щодо впливу будови карбонових кислот на закономірності розкриття оксиранового циклу.

Метою даної роботи є дослідження впливу температури, природи та концентрації каталізатора – тетрабутиламоній йодиду – на реакційну здатність 3-метилбензойної кислоти в реакції з 2-хлорметилоксираном:



Об'єктами дослідження обрано 3-метилбензойну кислоту, хлорметилоксиран, який взято у надлишку та каталізатор реакції – тетрабутиламоній йодид. Концентрація бензойної кислоти становить 0,3 моль/л, четвертинної амонієвої солі – варіювалась в межах 0,00125–0,0050 моль/л. Кінетичні дослідження проводилися в температурному інтервалі 40–60 °С. У якості розчинника обрано суміш ЕХГ з тетрагідрофураном (ТГФ) у об'ємному співвідношенні 1:1. Вихідні речовини очищали за опрацьованими методиками. Контроль за перебігом реакції здійснювали потенціометричним кислотно-основним титруванням. Обробка експериментальних даних проводилась із застосуванням методу кореляційного аналізу.

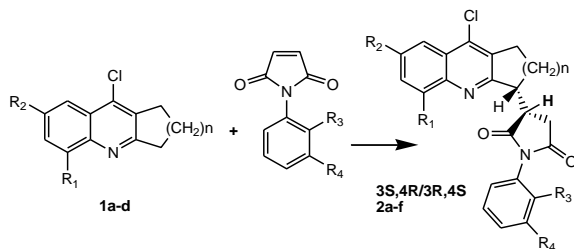
За одержаними результатами встановлено нульовий порядок реакції за 3-метилбензойною кислотою та перший за каталізатором – тетрабутиламоній йодидом, що є основою для подальшого аналізу механізму реакції. Знайдено спостережувані константи швидкості реакції, співставлення яких з концентрацією каталізатора дозволило розрахувати константи швидкості некаталітичної та каталітичної стадій процесу. Визначено, що у відсутності каталізатора реакція на декілька порядків більш повільніша, ніж при наявності каталізатора, що доводить ефективність тетрабутиламоній йодиду як каталізатора реакції. Дослідження реакційних серій при різних температурах дозволив встановити активіційні параметри (енергія, ентальпія та ентропія активації) реакції, які відповідають процесам, що здійснюються за бімолекулярним нуклеофільним заміщенням. Отримані закономірності перебігу реакції є важливим внеском у дослідження реакційної здатності оксиранових сполук та механізму його розкриття і надають змогу для удосконалення методик синтезу мономерів епоксидних смол.

МОЛЕКУЛЯРНИЙ ДОКІНГ БІОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ ПОХІДНИХ ГІДРОАКРИДИНІВ (ХІНОЛІНІВ)

Сметанін М. В., Токарева С. В., Варениченко С. А., Фарат О. К., Марков В. І.
ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет», Дніпро, Україна
smetanin.nikolay13@gmail.com

Протягом останніх років метою хіміків-органіків є не лише синтез нових сполук, але й пошук нових методів синтезу речовин з необхідними біологічними властивостями. Цю задачу допомагає виконати метод молекулярного докінгу.

Раніше авторами роботи було розроблено новий метод функціоналізації гідроакридинів N-арилмалеїмідами. У результаті чого було отримано нові похідні сукцинімідів [1]. Враховуючи практичне значення гідроакридинів нами було розширено кількість прикладів ефективної функціоналізації і синтезовано продукти **2 a-f** [2].



1: **a)** n=2, R₁=H, R₂=Br; **b)** n=2, R₁=H, R₂=CH₃; **c)** n=2, R₁=CH₃, R₂=H; **d)** n=3, R₁=H, R₂=H. **2:** **a)** n=2, R₁=H, R₂=Br, R₃=NO₂, R₄=H; **b)** n=2, R₁=H, R₂=Br, R₃=H, R₄=NO₂; **c)** n=2, R₁=H, R₂=CH₃, R₃=NO₂, R₄=H; **d)** n=2, R₁=CH₃, R₂=H, R₃=NO₂, R₄=H; **e)** n=3, R₁=H, R₂=H, R₃=NO₂, R₄=H; **f)** n=3, R₁=H, R₂=H, R₃=H, R₄=NO₂

Всі синтезовані сполуки були нами перевірені за допомогою рецепторно-орієнтованого гнучкого докінгу та молекулярного моделювання у якості інгібіторів ацетилхолінестерази та бутилхолінестерази, та як протизапальні і протисудомні агенти.

У ході досліджень були виявлені сполуки із найменшою вільною енергією зв'язування за даними скоринг-функції і наявністю водневих зв'язків із відповідними амінокислотними залишками, що дозволяє рекомендувати їх для подальших біохімічних досліджень.

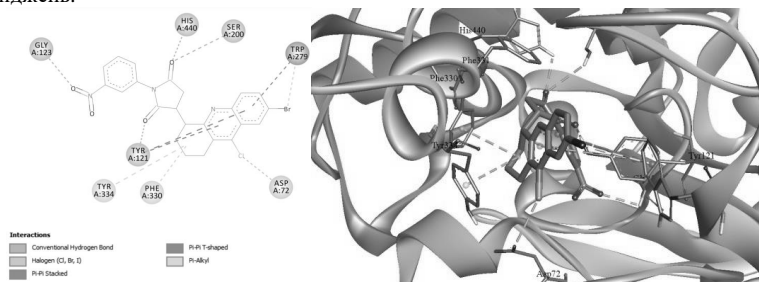


Рис. 1. Будова моделі сполуки **2b** для найкращої стикованої пози в активному місці AChE

[1] Zalznaya, E.V.; Farat, O. K.; Varenichenko, S. A.; Mazepa, A.V.; Markov, V. I. *Tetrahedron Lett.* 2016, 57, 3485–3487.

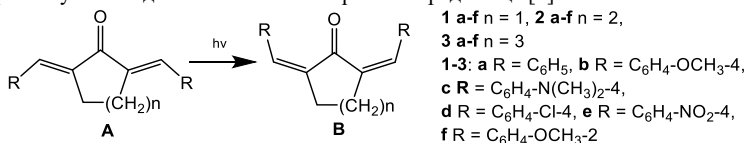
[2] Smetanin N.V., Varenichenko S.A., Zalznaya E.V., Mazepa A.V., Farat O.K., Markov V.I. *Voprosy Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii.* 2020, 6, 165-170.

СИНТЕЗ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ФОТОІЗОМЕРИЗАЦІЇ ДІАРИЛІДЕНЦИКЛОАЛКАНОНІВ

Сніжко А. Д., Стоянова В. С., Гладков Є. С., Чепелева Л. В.

Харківський національний університет ім. В. Н. Каразіна, НДІ хімії та хімічний факультет, Харків, Україна
arseniysnigko@ukr.net

Крос-супряжені дієнони містять екзоциклічні подвійні зв'язки, що обумовлює їх здатність до фотохімічної *E,Z*-ізомеризації. Флуоресценція у даних сполук відсутня. При наявності аміногруп в пара-положеннях бензиліденових фрагментів у дієнонів з'являється малоінтенсивна флуоресценція, і ці сполуки можуть бути віднесені до класу кетонаціанінових барвників. Вони мають сольватохромні властивості, що дозволяє використовувати їх для визначення полярності середовища [1].



Вихідні симетричні та несиметричні діариліденциклоалканоли було отримано відомим методом – конденсацією відповідного циклоалканона або моноариліденциклоалканона з ароматичними альдегідами [2].

Нижній збуджений синглетний стан досліджуваних сполук має *ππ*-природу (*S*^{*}_{ππ}). Він майже повністю дезактивується за рахунок інтеркомбінаційної конверсії в триплетний стан *T*^{*}_{ππ}. Це підтверджується змінами в спектрах поглинання під час опромінення, які є характерними для протікання фотоізомеризації, а також відсутністю флуоресценції. У діалкіламінопохідних відбувається інверсія енергетичних рівнів, тобто нижнім збудженим синглетним рівнем стає рівень *S*^{*}_{ππ}, який дезактивується шляхом флуоресценції. Дійсно, для сполук (1с, 2с) спостерігається малоінтенсивна флуоресценція. Проте взаємне розташування енергетичних рівнів залежить від природи та полярності розчинника. Так, при опроміненні розчинів сполук (1с, 2с) в етанолі не відбувається змін в спектрах поглинання та флуоресценції, тобто в даному випадку фотоізомеризація не протікає. При опроміненні розчину сполуки (1с) в ацетонітрілі спостерігається симбатне зменшення інтенсивності флуоресценції та оптичної густини.

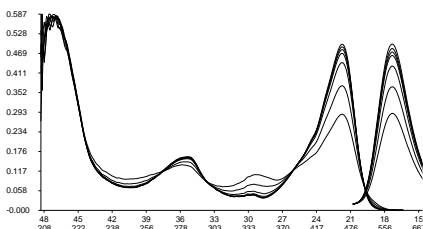


Рис. Електронні спектри поглинання і спектри флуоресценції розчину сполуки (1с) в ацетонітрілі при опроміненні на $\lambda^* = 436$ нм (довжина хвилі збудження флуоресценції $\lambda^* = 470$ нм)

Таким чином, інтенсивність флуоресценції досліджуваних сполук в певних розчинниках залежить від дози ультрафіолетового опромінення, що робить ці сполуки перспективними для використання в якості сенсорів.

[1] Doroshenko A.O., Bilokin M.D., Pivovarenko V.G. J. Photochem. Photobiol., A: Chemistry, 2004, 163, P. 95-102.

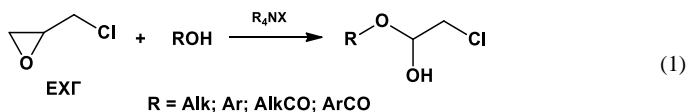
[2] Din, Zia Ud; Trapp, Marilia Almeida et. al., Euro. J. Med. Chem., 2018, 155, P. 596-608.

СИНТЕЗ КОМПЛЕКСНИХ СПОЛУК НА ОСНОВІ САЛЕНОВИХ ЛІГАНДІВ ЯК ПЕРСПЕКТИВНИХ КАТАЛІЗАТОРІВ РЕАКЦІЇ НУКЛЕОФІЛЬНОГО РОЗКРИТТЯ ОКСИРАНОВОГО ЦИКЛУ

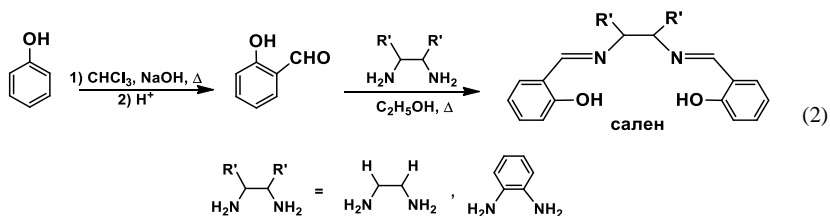
Соколовський Д. А., Ютілова К. С., Швед О. М.

Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна
sokolovskyi.d@donnu.edu.ua

Реакція розкриття оксиранового циклу протонівмісними нуклеофілами (1) знаходить широке використання у промисловості для одержання епоксидних полімерних матеріалів і компаундів. Особливий практичний інтерес мають каталітичні реакції асиметричних оксиранів, таких як епіхлоргідрин (ЕХГ), з фенолами / бісфенолами. Одним з потребуваних каталізаторів є солі четвертинного амонію (R_4NX), які мають ряд недоліків. По-перше, полімери, що отримують в присутності солей тетраалкіламонію, мають досить низьку молекулярну масу і широкий молекулярно-масовий розподіл. По-друге, постає проблема виведення залишків каталізатору з отвердненої полімерної маси та їх утилізації, оскільки галогеніди тетраалкіламонію є забруднювачами стічних вод.



Перспективними каталізаторами розкриття оксиранового циклу є металокомплексні сполуки, що містять хелатні ліганди саленового ряду. Нещодавні дослідження показують, що завдяки об'ємній структурі такі каталізатори дають змогу істотно підвищити молекулярну масу полімеру і зменшити діапазон молекулярних мас у полімерній суміші, а також є екологічно безпечними. Сален уявляє собою основу Шиффа, яку синтезують з діамінів та саліцилового альдегіду або його похідних (2).



Метою даної роботи є синтез саленових лігандів і металокомплексів на їх основі для каталізу реакції нуклеофільного розкриття оксиранового циклу. Саліциловий альдегід був синтезований за реакцією Реймера-Тімана з фенолу і хлороформу у лужному середовищі (2). Для одержаного альдегіду здійснювали взаємодію з етилендіаміном і фенілендіаміном у спиртовому розчині при кип'ятінні зі зворотним холодильником. Синтезовані ліганди – сален і салофен, відповідно – вводили у реакцію комплексоутворення із солями металічних *d*-елементів.

У результаті роботи синтезовано металокомплексні сполуки з лігандами саленового ряду, охарактеризовано їх властивості. Встановлено, що хелатні комплекси на основі саленів є ефективними каталізаторами розкриття оксиранового циклу карбоновими кислотами.

**Cu-CATALYZED FORMATION OF PYRIDINES FROM PROPARGYLAMINE
AND CYCLOALKANONES**

Sotnik S. O.^{1,2,3}, Subota A. I.^{1,4}, Lytvynenko A. S.², Kolotilov S. V.^{2,3}, Ryabukhin S. V.^{1,3},
Volochnyuk D. M.^{1,3,4}

¹Enamine Ltd, Kyiv, Ukraine

²L.V. Pisarzhevskii Institute of Physical Chemistry of the National Academy of Sciences of
Ukraine, Kyiv, Ukraine

³National Taras Shevchenko University of Kyiv, Kyiv, Ukraine

⁴Institute of Organic Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine
sotniksvitlana@ukr.net

Aromatic heterocycles fused with saturated cyclic hydrocarbon ring are important building blocks for medical chemistry due to their potential biological activity [1]. Such compounds can be obtained in the reactions of propargylamine and cycloalkanones catalyzed by Au(I) salts [2]. The development of noble-metal-free and reliable methods for synthesis of multi-gram amounts of the such aromatic heterocycles is important task of modern organic chemistry and catalysis. The aim of this study was to find optimal conditions for Cu-catalyzed formation of pyridines by cyclization reaction from propargylamine and cycloalkanones.

Several copper sources such as Cu(II) triflate, nitrate, chloride, pivalate and acetate were tested and anhydrous CuCl₂ was found to be the most efficient catalyst. The influence of the CuCl₂ amount in the reaction mixture on the product yield was investigated; it was found that 5 mol % was optimal content of CuCl₂. The porous coordination polymer HKUST-1 (copper(II) 1,3,5-benzenetricarboxylate) [3] was also tested as catalyst and yield of the product was 44 % after 24 h under reflux in ethanol. Notably, HKUST-1 completely dissolved in the reaction mixture thus it could not be considered as heterogeneous catalyst for the reaction. A set of solvents were tested in reflux conditions. Among ethanol, isopropanol, *tert*-butanol, isoamyl alcohol, 1,4-dioxane, hexafluoro-2-propanol the product yield was the highest in the case of isopropanol. The product yield reached the highest value after 2 h and further heating of the reaction mixture did not lead to its significant increase. Finally, ethyl-5,6,7,8-tetrahydroquinoline-6-carboxylate could be obtained in 63 % yield (Fig. 1). A series of other ketones was tested in the optimized reaction conditions.

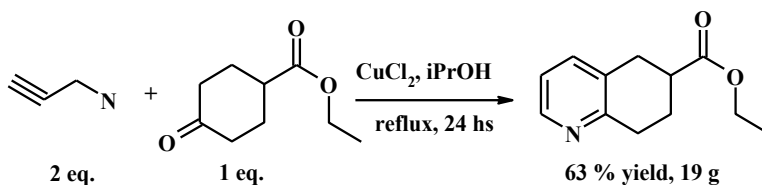


Fig. 1. The reaction of propargylamine and 4-(ethoxycarbonyl)cyclohexanone at presence of CuCl₂ as catalyst

The proposed procedure could be successfully scaled up to isolation of 19 g of ethyl-5,6,7,8-tetrahydroquinoline-6-carboxylate in one synthetic run.

1. A. J. Carrasquillo, G. L. Bruland, A. A. MacKay, D. Vasudevan, Environ. Sci. Technol. **2008**, 42, 20, 7634–7642.

2. G. Abbiati, A. Arcadi, G. Bianchi, S. Di Giuseppe, F. Marinelli, E. Rossi, J. Org. Chem. **2003**, 68, 18, 6959–6966.

3. S. S.-Y. Chui, S. M.-F. Lo, J. P. H. Charmant, A. G. Orpen, I. D. Williams, Science, **1999**, 283, 5405, 1148–1150.

ПРОПЛОКСИ-ДИБЕНЗОЇЛОКСИ-КАЛІКС[4]АРЕН ЯК ПРЕКУРСОР
ДЛЯ ДИЗАЙНУ ВНУТРІШНЬОХІРАЛЬНИХ КАЛІКСАРЕНІВ

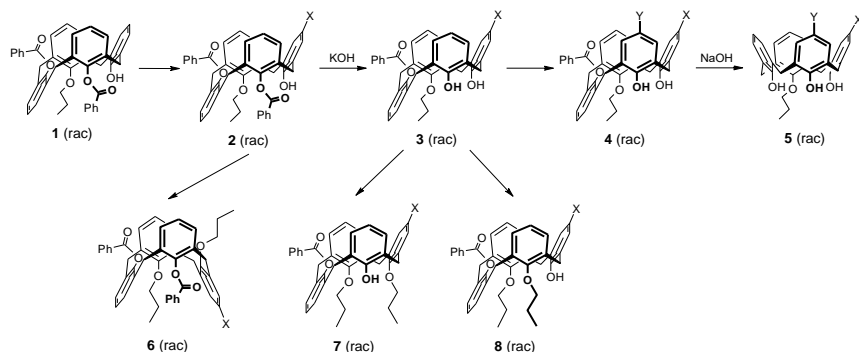
Трибрат О. О., Єсіпенко О. А., Кальченко В. І.

Інститут органічної хімії НАН України, Київ, Україна

trybratoleksandr@gmail.com

Внутрішньохіральні каліксарени можуть використовуватися як ліганди для металокомплексних каталізаторів та органокаталізатори асиметричного синтезу, енантіоселективні сенсори та сорбенти, хіральні зсуваючі реагенти для ЯМР досліджень, тощо. Але синтез таких сполук складний та багатостадійний. Особливо, у випадку функціоналізації верхнього вінця, коли для заміщення кожного гідрогену в *para*-положенні необхідно провести по 3-4 стадії. В попередній роботі [1] на прикладі одержання *para*-бромпохідних калікс[4]арену був продемонстрований новий оригінальний підхід до побудови хірального фрагменту на верхньому вінці макроциклу шляхом послідовного регіоселективного дебензоїлювання внутрішньохірального пропілокси-дибензоїлокси-калікс[4]арену **1**.

В даній роботі нами розширено ряд функціональних груп (X, Y, Z = -Br, -NO₂, -CH=O, -COOH, -NH₂). Була досліджена можливість введення їх в *para*-положення незаміщеного фенольного кільця. Також було вивчено алкілювання по нижньому вінцю на кожній стадії. Структура всіх одержаних сполук доведена спектральними методами та РСА.



Слід зазначити, що на всіх стадіях процесу внутрішньохіральні продукти утворюються у вигляді енантіомерних пар із співвідношенням 1:1. В роботі приведено приклади розділення таких рацематів шляхом переведення їх в діастереомерні пари.

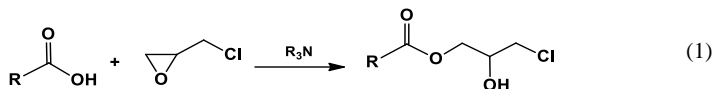
[1] О. А. Yesypenko, М. А. Klyachina, М. V. Dekhtyarenko, V. V. Pirozhenko, S. V. Shishkina, V. I. Boyko, Z. V. Voitenko, V. I. Kalchenko. *Supramolecular Chemistry* **29**, 49-58 (2017).

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНИЙ МОНІТОРИНГ СТАНУ ТРИОКТИЛАМІНУ В РЕАКЦІЇ ЕПІХЛОРГІДРИНУ З ОЦТОВОЮ КИСЛОТОЮ

Червонченко І. Д., Ютілова К. С., Швед О. М.

Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна
chervonchenko.i@donnu.edu.ua

Розкриття циклу епіхлоргідрину (ЕХГ) з протонівмісними нуклеофілами, такими як карбонові кислоти (1), широко використовується в синтезі лікарських засобів (карбазол, дикетопентадіон, триптогліцин), сучасних епоксидних матеріалів і композитів, застосовується у виробництві лаків, фарб, клейових та антикорозійних сумішей. Ефективними катализаторами реакції (1) є органічні основи, такі як третинні аміни R_3N . Літературні дані щодо механізму ацидолізу ЕХГ в присутності амінів є обмеженими і неоднозначними. Зокрема, дискусійним є питання щодо виявлення основних або нуклеофільних властивостей третинних амінів у реакції (1). Існуючі хімічні та інструментальні методики не дають змоги безпосередньо спостерігати стан третинного аміну у реакційній суміші.



Метою даної роботи є моніторинг стану катализатору у системі «оцтова кислота – епіхлоргідрин – триоктиламін» методом електронної спектроскопії.

Об'єктами дослідження є оцтова кислота, ЕХГ, бромтимоловий синій, катализатор: триоктиламін. Дослідження проводилось при температурі 60 °С у бінарному розчиннику, що складається з ЕХГ та тетрагідрофурану (ТГФ) в об'ємному співвідношенні компонентів 1:1. Для дослідження стану катализатору триоктиламіну у реакційній системі використано метод спектрофотометрії.

Існуюча методика спектрофотометричного визначення солей четвертинного амонію у водних розчинах була адаптована до неводного реакційного середовища. Адаптація полягала у введенні стадії водної екстракції четвертинної амонієвої солі з розчинника ЕХГ:ТГФ, використанні нейтрального розчину індикатору – бромтимолового синього (БТС) замість слабколужного, виключення стадії декантації і додавання спиртового розчину борної кислоти через відсутність у системі домішок, що усуваються таким способом.

За результатами роботи здійснено безпосередній експериментальний моніторинг стану триоктиламіну у реакції ЕХГ з оцтовою кислотою спектрофотометричним методом у видимій області у присутності індикатору БТС. Встановлено, що на початку реакції у системі збільшується оптична густина, що вказує на перетворення третинного аміну на четвертинний амонієвий катіон (реакція кватернізації). Показано, що максимальна концентрація катіону досягається через 5 хвилин від початку реакції. Доведено, що триоктиламін виступає у ролі нуклеофільного, а не основного катализатору ацидолізу ЕХГ. Отримані дані є ключовими для деталізації та доповнення теоретичних уявлень про механізм розкриття оксиранового циклу карбоновими кислотами у присутності третинних амінів.

**PHYSICAL CHEMISTRY /
ФІЗИЧНА ХІМІЯ**

CATALYTIC OXIDATION OF HETEROCYCLIC KETONES BY HYDROGEN PEROXIDE AT PRESENCE OF Cu(II) AND Fe(III) POROUS COORDINATION POLYMERS

*Abdullaev E. N.*¹, Kolosov M. O.², Shvets E. H.², Mishura A. M.¹, Gavrilenko K. S.^{3,4}, Kolotilov S. V.¹

¹L. V. Pisarzhevskii Institute of Physical Chemistry of the NAS of Ukraine, Kiev, Ukraine

²V. N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine

³Enamine Ltd, Kiev, Ukraine

⁴ChemBioCenter, National Taras Shevchenko University of Kyiv, Ukraine
abdullaev.emir99@gmail.com

Porous coordination polymers (PCPs) of 3d metals can be considered as promising heterogeneous catalysts for oxidation reactions, especially for fine organic synthesis. A distinctive feature of the use of such catalysts is a possibility to perform the reactions under conditions of heterogeneous catalysis (including using a flow reactor), that significantly simplifies the separation of the catalyst from the reaction mixture and the purification of the product itself. Determination of the factors which make influence on the catalytic activity of such systems is an important task of modern physical chemistry.

The aim of this work was to evaluate and to compare catalytic activity of PCP Cu₃(btc)₂ (known as HKUST-1; btc³⁻ is 1,3,5-benzenetricarboxylate) and Fe₂(OH)₃(btc) in reaction of heterocyclic ketones oxidation by hydrogen peroxide. The ketones and some oxidation products are shown on Fig. 1.

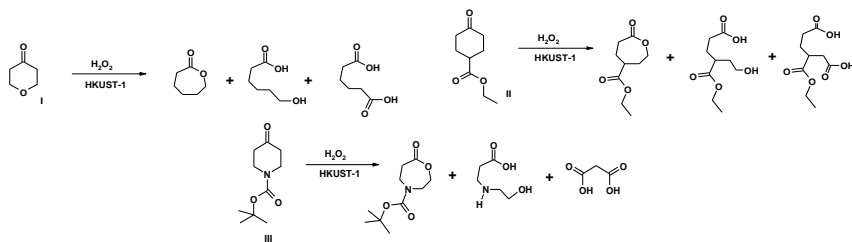


Fig. 1. Schemes of reactions studied

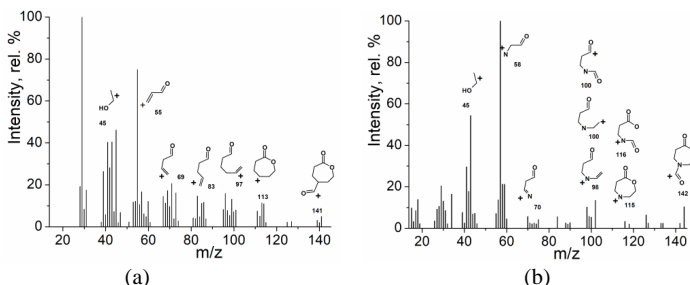


Fig. 2. Mass-spectra (EI, 70 eV) of the oxidation products of **II** (a) and **III** (b)

Reaction products were determined by NMR and HPLC, separate experiments on mass spectrometry were carried out. It was shown that in all cases the mixtures of products were obtained. These mixtures contained lactones, formed by the Bayer-Villiger mechanism, and other compounds, presumably formed as a result of the radical oxidation.

ПРО МЕХАНІЗМИ РЕАКЦІЙ *n*-АЛКАНІВ У СІРЧАНОКИСЛИХ РОЗЧИНАХ ФОРМАЛЬДЕГІДУ Й МАРГАНЦЮ(III)

*Волкова Л. К.*¹, Новохатько А. О.², Опейда Й. О.²

¹Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАНУ, Київ, Україна, volkovalk@gmail.com

²Відділення фізико-хімії горючих копалин ІнФОВ НАНУ, Львів, Україна opeida_i@yahoo.co.uk

У роботі розглянуто природу лімітуючих стадій функціоналізації насичених зв'язків С–Н, первинних (*перв.*) і вторинних (*втор.*), у ряду *n*-алканів (*n*-AlkH) в їх реакціях із формальдегідом і комплексами Mn(III)/Mn(II) у сірчанокислих розчинах із використанням кінетичних даних цих перетворень та електронних характеристик *n*-AlkH.

У таблиці наведені кількість *втор*-С–Н ($n(\text{CH})_{\text{sec}}$), потенціали іонізації (I) для *n*-алканів від етану до октану; а також субстратні селективності – відношення константи швидкості (k) для *n*-AlkH до k для *n*-пентану ($k_{\text{відн.}} = k_{n\text{-AlkH}} / k_{n\text{-C5H12}}$) – в їх реакціях у сірчанокислих розчинах марганцю(III), стабілізованого добавками марганцю(II), і формальдегіду (CH₂O).

Таблиця. Величини $n(\text{CH})_{\text{sec}}$, I (кДж/моль), а також $k_{\text{відн.}}^*$ для реакцій C₂–C₈ у розчинах Mn(III)/Mn(II) – 90 % H₂SO₄ при 90 °С і формальдегід – 93 % H₂SO₄ при 25 °С

<i>n</i> -AlkH	$n(\text{CH})_{\text{sec}}$	I	$k_{\text{відн.}}$		<i>n</i> -AlkH	$n(\text{CH})_{\text{sec}}$	I	$k_{\text{відн.}}$	
			Mn(III)	CH ₂ O				Mn(III)	CH ₂ O
C ₂ H ₆	0	1116	0,22	–	C ₅ H ₁₂	6	986	1,00	1,00
C ₃ H ₈	2	1052	–	0,08	C ₆ H ₁₄	8	978	1,21	1,71
C ₄ H ₁₀	4	1016	–	0,44	C ₇ H ₁₆	10	958	1,64	2,98
					C ₈ H ₁₈	12	946	2,14	–

*Роботи Рудакова С., Луцика О., Тищенко М.

На рис. 1 показано виконання рівнянь

$$k_{\text{відн.}} = a \cdot n(\text{CH})_{\text{sec}} + b \quad (\text{а}) \quad \text{і} \quad \lg k_{\text{відн.}} = -a_1 \cdot I + b_1 \quad (\text{б}), \quad (1)$$

які характеризують лімітуючу стадію як: (а) відрив Н-атома від зв'язку *втор*-С–Н, врахування внеску *перв*-С–Н суттєво не впливає; (б) відрив електрона від *n*-AlkH.

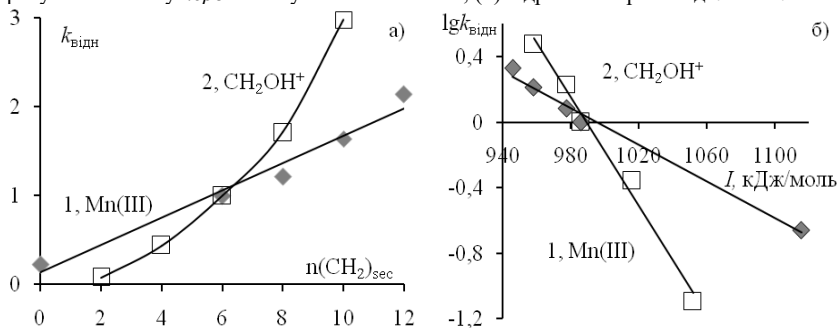


Рис. 1. Залежність субстратної селективності в реакціях *n*-алканів ряду C₂–C₈ у сірчанокислих розчинах Mn(III)/Mn(II) (лінія 1) і формальдегіду (2) від числа *втор*-С–Н (рис. 1а) і потенціалу іонізації (рис. 1б) за даними таблиці

Залежність (1б) виконується краще як для CH₂O (R² = 0,988), так і для Mn(III) (R² = 0,990), рис. 1б, лінії 1 і 2, що дозволяє зробити висновок про відрив електрона від *n*-AlkH у лімітуючій стадії цих реакцій. Для системи Mn(III)/Mn(II)–H₂SO₄ достатньо точно виконується також залежність (1а), R² = 0,970 (рис. 1а, лінія 1), що може свідчити про наявність другої конкуруючої стадії – відрив Н-атома.

ОДЕРЖАННЯ ЛЕВУЛІНОВОЇ КИСЛОТИ НА СУПЕРКИСЛОТНОМУ ЗМІШАНОМУ $ZrO_2-SiO_2-SnO_2$ КАТАЛІЗАТОРІ

Гес Н. Л., Милін А. М.

Інститут сорбції та проблем ендоекології НАН України
вул. Генерала Наумова, 13, 03164 Київ, Україна
natalya2938@gmail.com

Безперервне використання поновлювальних джерел енергії (нафти та газу) призводить до неминучих проблем, які пов'язані з вичерпанням природних ресурсів та забрудненням навколишнього середовища. Відновлювальні джерела (рослинний світ) є єдиною альтернативою для вирішення цієї глобальної проблеми. Національна лабораторія поновлюваних джерел енергії (NREL) визначила ряд хімічних речовин, які можна одержати з біомаси, наприклад, левулінова кислота, ксиліт, молочна кислота та ін. Левулінова кислота та її етери розглядаються як потенційний замітник палива, також, використовуються у фармацевтиці, органічному синтезі. Останнім часом, розробляються методи одержання левулінової кислоти гідролізом біомаси, як показано на схемі:

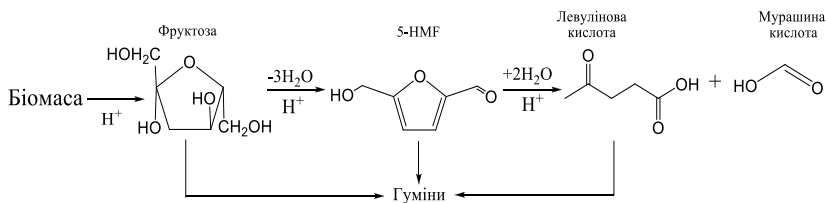


Схема 1. Одержання левулінової кислоти з біомаси

В даному повідомленні наведено результати щодо конверсії 20 % водного розчину фруктози в левулінову кислоту при 190 °С протягом 5 годин в стаціонарних умовах з застосуванням автоклавів (60 об/хв.). Як каталізатор використовували суперкислотний змішаний $ZrO_2-SiO_2-SnO_2$ оксид, який було синтезовано золь-гель методом з співвідношенням атомів $Zr:Si:Sn = 21:67:11$. Продукти аналізували методом ^{13}C ЯМР спектроскопії (BrukerAvance 400).

Одержані результати показують, що суперкислотний $ZrO_2-SiO_2-SnO_2$ змішаний оксид забезпечує 100 % конверсію фруктози з 75.5 мол% виходом левулінової кислоти та 93.0 мол% виходом мурашиної кислоти. При цьому, наявність 5-HMF не спостерігається, але присутні, як побічний продукт, гуміни з 13 мас%.

ВИЗНАЧЕННЯ ЕНЕРГІЇ АКТИВАЦІЇ РЕАКЦІЇ РОЗКЛАДАННЯ ПЕРОКСИДУ ВОДНЮ НАНОКОМПЗИТАМИ ГАЛОІЗИТНИ НАНОТРУБКИ/НАНОРОЗМІРНИЙ ОКСИД ЦЕРІУ

Гринько А. М., Бричка А. В., Бакаліньська О. М., Каргель М. Т.

Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної академії наук України,
вул. Генерала Наумова, 17, Київ, 03164, Україна
alinagrinko2@gmail.com

Нанорозмірний оксид церію є багатофункціональним матеріалом, та широко застосовується в різноманітних галузях завдяки особливостям будови та унікальним окисно-відновним властивостям. На поверхні наночастинок CeO_2 співіснують іони Ce^{3+} та Ce^{4+} , здатні оборотно змінювати ступінь окиснення, що приводить до утворення кисневих вакансій, котрі по суті є поверхневими дефектами, які визначають каталітичну активність матеріалу. Галоізитні нанотрубки (ГНТ) є біосумісними, екологічними та мають низьку вартість, що дозволяє використовувати їх в якості носія для модифікування нанорозмірним CeO_2 . Метою роботи було одержання ряду наноккомпозитів ГНТ/ CeO_2 із різним вмістом модифікатора, дослідження їхніх фізико-хімічних властивостей та визначення ефективної енергії активації реакції розкладання пероксиду водню синтезованими наноккомпозитами та вихідними галоізитними нанотрубками.

Безтемплатним методом у водному середовищі при кімнатній температурі було синтезовано ряд наноккомпозитів ГНТ/ CeO_2 . Вміст оксиду церію в синтезованих зразках склав 0,99; 3,19; 4,89; 12,17 та 19,15 мас. %. За допомогою електронної мікроскопії було встановлено, що розміри частинок CeO_2 варіюються у межах 2,6–17,5 нм. За результатами рентгенофазового аналізу, діоксид церію має кубічну структуру. ІЧ спектри в режимі відбиття отримано для визначення типу взаємодії між модифікатором і матрицею. Визначене із УФ-Вид спектрів дифузного відбиття співвідношення $I_{\text{UVS Ce}^{4+}}/I_{\text{UVS Ce}^{3+}}$ знаходиться у межах 0,249–2,552 і свідчить про зменшення дефектності зразків при збільшенні вмісту декоратора.

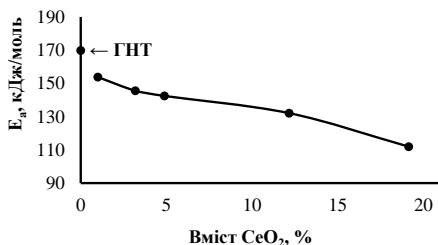


Рис. Залежність визначеної ефективної енергії активації реакції розкладання пероксиду водню наноккомпозитами ГНТ/нанорозмірний оксид церію від вмісту CeO_2

За кінетичними даними розкладання розчинів пероксиду водню різних концентрацій (1–10 %) в діапазоні рН 8,0–11,0 визначено каталітичну активність синтезованих зразків у реакції розкладання H_2O_2 . Знайдена екстремальна залежність активності від вмісту декоратора з максимумом для зразка із 3,19 % CeO_2 . Енергію активації (E_a) реакції розкладання H_2O_2 досліджуваними наноккомпозитами та вихідними ГНТ було визначено в діапазоні температур 20–40 °С при рН 10,0. З

кінетичних даних із залежності логарифму максимальної (початкової) швидкості від логарифму концентрації пероксиду водню розраховано константу швидкості реакції. Із залежності константи швидкості реакції від оберненої температури визначили енергію активації реакції. Показано, що енергія активації процесу розкладання пероксиду водню складає 170 кДж/моль для чистих ГНТ та зменшується з 154 кДж/моль для матеріалу із найменшим вмістом модифікатора до 112 кДж/моль для зразка з найбільшим вмістом CeO_2 . Попри очікування, величина енергії активації реакції розкладання пероксиду водню не зменшується із збільшенням дефектності зразків, а падає із вмістом модифікатора у наноккомпозиті ГНТ/ CeO_2 .

ВПЛИВ ЖОВЧНОЇ КИСЛОТИ НА ФОРМУВАННЯ МЕЗОПОРИСТОЇ СТРУКТУРИ МСМ-41

Роїк Н. В., Белякова Л. О., *Дзязько М. О.*

Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної академії наук України,

Київ, Україна

roik_nadya@ukr.net

Синтез нанорозмірних кремнеземних матеріалів з регульованою пористою будовою є перспективним у області гетерогенного каталізу, селективної сорбції та розділення речовин, розробки носіїв біологічно активних сполук, створення сенсорів. Кремнеземи типу МСМ-41 з гексагонально впорядкованою структурою циліндричних мезопор зазвичай одержують у результаті золь-гель конденсації структуроутворюючих силанів у рідкокристалічному середовищі міцел поверхнево-активної речовини. Оскільки формування кремнеземної матриці відбувається навколо супрамолекулярних агрегатів темплату, варіювання їх будови має вирішальний вплив на формування структури МСМ-41.

Введення органічних сполук у золь-гель синтез може супроводжуватися взаємодією з мицелами темплату та приводити до зміни критичної концентрації мицелоутворення і конфігурації. Як наслідок, слід очікувати модифікування структурних характеристик одержаного кремнеземного матеріалу. У даній роботі було досліджено вплив холевой кислоти (НСн) – монокарбонової триоксикислоти стероїдної будови з групи жовчних кислот, та її алкоксилану на структурні параметри і впорядкування мезопор амінокремнезему типу МСМ-41. Амінокремнеземі NH₂-МСМ-41_{ЦТАБ} та NH₂-МСМ-41_{ЦТАБ+НСн} було одержано в результаті основної золь-гель конденсації структуроутворюючих силанів, тетраетилортосилікату (ТЕОС) та (3-амінопропіл)триетоксисилану (АПТЕС), у мицелярному середовищі цетилтриметиламоній броміду (ЦТАБ) та його суміші з НСн відповідно. Тоді як синтез НСн-NH₂-МСМ-41_{ЦТАБ} здійснювали, додаючи ще й НСн-вмісний силан, у присутності ЦТАБ як темплату. Мезопористу будову одержаних органо кремнеземів досліджено методами низькотемпературної адсорбції-десорбції азоту та рентгенівської дифракції. Встановлено, що додавання НСн чи її алкоксилану у реакційне середовище золь-гель синтезу приводить до формування кремнеземних матеріалів з вищою питомою поверхнею та більш чітким впорядкуванням мезопористої структури (Таблиця). Одержані результати зумовлені тісною взаємодією, що виникає як між гідрофобною частиною допоміжної органічної чи кремнійорганічної сполуки та вуглеводневими ланцюгами ЦТАБ, так і між гідрофільними групами НСн чи її алкоксилану й аніонною формою олігомерів ортокремневої кислоти, що формують кремнеземний каркас.

Таблиця. Структурні параметри амінокремнеземів типу МСМ-41 за даними низькотемпературної адсорбції-десорбції азоту та рентгенівської дифракції

Кремнезем	S _{БЕТ} , м ² ·г ⁻¹	V, см ³ ·г ⁻¹	D, нм	d ₁₀₀ , нм	a, нм
NH ₂ -МСМ-41 _{ЦТАБ}	515	0.91	3.93; 5.09	3.93	4.54
NH ₂ -МСМ-41 _{ЦТАБ+НСн}	550	0.76	3.66; 5.29	4.11	4.75
НСн-NH ₂ -МСМ-41 _{ЦТАБ}	740	0.75	3.18; 5.09	3.93	4.54

Одержані результати підтверджують важливий внесок допоміжних органічних сполук у формування мезопористої кремнеземної структури в процесі темплатного золь-гель синтезу та відкривають нові перспективи одержання кремнеземних матеріалів з покращеними структурними характеристиками.

ВПЛИВ ГУМІНОВИХ КИСЛОТ НА КІНЕТИКУ ОКИСНЕННЯ КУМОЛУ В ПРИСУТНОСТІ АСКОРБІНОВОЇ КИСЛОТИ

Дикун О. М., Смирнова О. В., Єфімова І. В.

Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України,
Київ, Україна

I.V.Efimova@nas.gov.ua

Для вивчення спільної дії аскорбінової кислоти (АК) і гумінових кислот (ГК) в процесах радикально-ланцюгового окиснення було досліджено ініційоване азодіізобутіронітрилом (АІБН) рідиннофазне окиснення кумолу (ІПБ) в середовищі диметилсульфоксиду (ДМСО) в присутності АК та ГК. На рисунку 1 представлені кінетичні криві окиснення модельної системи ІПБ - ДМСО - АІБН в присутності ГК, при фіксованій концентрації 1,0 г/л (крива 2), АК, при фіксованій концентрації 0,004 моль/л (крива 3), та їх суміші (крива 4). Присутність інгібуючої суміші АК - ГК при окисненні модельної системи обумовлює наявність періоду індукції. Величина останнього дорівнює значенню, отриманому в процесі окиснення модельної системи в присутності АК у тій же концентрації (криві 3 і 4). Величина швидкості поглинання кисню після виходу з періоду індукції в процесі окиснення модельної системи у присутності АК і ГК (крива 4) відповідає величині швидкості поглинання кисню системою за участю у якості інгібітора ГК (крива 2). Експериментально показано, що в даних умовах досліджувані гумінові речовини не окиснюються. Таким чином встановлено адитивну інгібуючу дію АК - ГК на процес окиснення модельної системи.

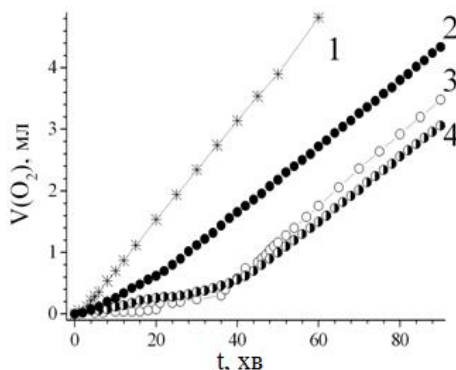


Рис. 1. Кінетичні криві поглинання кисню при окисненні системи ІПБ - ДМСО - АІБН в присутності різних інгібіторів:

1 – без інгібіторів, 2 – ГК, 3 – АК, 4 – АК і ГК;

[АІБН] = 0,02 моль/л, [ІПБ] = 3,59 моль/л, [ГК] = 1,0 г/л, [АК] = 0,004 моль/л, 75 °С

СУЛЬФОНІЛЮВАННЯ ГОСИПОЛУ ТОЗИЛХЛОРИДОМ В ПРИСУТНОСТІ 4-МЕТОКСИПІРИДИН *N*-ОКСИДУ

Дикун О. М., Аніщенко В. М., Редько А. М., Рибаченко В. І.

Інститут фізико-органічної хімії і вуглекімії імені Л. М. Литвиненка НАН України,
Київ, Україна
amdykun@gmail.com

Госипол – природний поліфенол жовтого кольору, що міститься в різних частинах бавовни і виявляє виражену біологічну активність (протівірусну, протипухлинну, антиоксидантну). Модифікація госиполу шляхом функціоналізації альдегідних та гідроксильних груп дозволяє отримувати нові біологічно активні сполуки з новими властивостями. Так, наприклад, було виявлено, що 6-метоксигосипол і 6,6'-диметоксигосипол є більш ефективними протипухлинними і антитрипаносомними агентами ніж вихідний госипол. Показано, що диглюкозиди госиполу (і тетраацетати диглюкозидів госиполу) виявляють помірну протиракову активність при меншій ніж у госиполу токсичності. Введення глікозильних фрагментів в структуру госиполу підвищує також антитрипаносому активність.

В даній роботі з метою одержання нових потенційно біологічно активних сполук, проведено поетапне сульфонування госиполу тозилхлоридом в присутності 4-метоксипіридин *N*-оксиду. Реакція супроводжується утворенням високо реакційнодатного катіону *N*-тозилоксипіридинія, який реагує з фенольними гідроксильними групами госиполу. За допомогою методів ВЕРХ, УФ, ІЧ і мас-спектроскопії встановлено послідовність тозилування гідроксильних груп госиполу і досліджено одержані продукти реакції. Дані ВЕРХ свідчать, що через 30 хв. після додавання другого еквіваленту (із розрахунку один еквівалент на одну гідроксильну групу госиполу) тозилхлориду і метоксипіридин *N*-оксиду утворюється 7,7'-дитозилат госиполу (з чистотою ~96%). В ІЧ спектрі одержаного 7,7'-дитозилата госиполу спостерігається смуга поглинання при 3550 cm^{-1} , що відповідає валентним коливанням вільної гідроксильної групи (лактольної) і смуги поглинання при 1374 cm^{-1} і 1178 cm^{-1} , що відповідають валентним асиметричним і симетричним коливанням SO_2 групи, відповідно. Слід відзначити, що в ІЧ спектрі реакційної суміші, що містить 7,7'-дитозилат госиполу, спостерігається плече при ~3500 cm^{-1} і смуга поглинання при 1636 cm^{-1} , що вказує на наявність рівноваги між лактольною і альдегідною формою. Зсув смуги поглинання валентних коливань $\text{C}(11)=\text{O}$ групи на 12 cm^{-1} у високочастотну область у результаті тозилування пов'язаний із руйнуванням водневого зв'язку $\text{C}(7)\text{O}\cdots\text{H}\cdots\text{O}=\text{C}(11)$. Це вказує на тозилування саме $\text{O}-\text{H}$ групи при $\text{C}(7)$ (рис. 1), адже у випадку тозилування $\text{C}(6)\text{O}-\text{H}$ групи водневий зв'язок зберігався би.

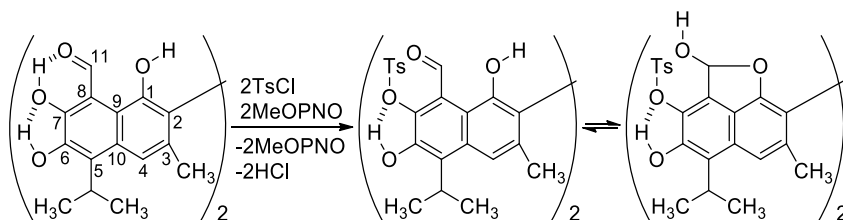


Рис. 1. Схема тозилування госиполу в присутності 4-метоксипіридин *N*-оксиду

ХІМІЧНА ІОНІЗАЦІЯ СПЛАВУ БрБ2 В РОЗЧИНАХ РІЗНИХ ЕЛЕКТРОЛІТІВ

Сгорова Л. М., Залогіна С. М.

Харківський національний автомобільно-дорожній університет, Харків, Україна
lilyaegorova@ukr.net

Створення нових видів металевих матеріалів з підвищеними механічними, експлуатаційними властивостями неодмінно має супроводжуватися оцінкою їх корозійної стійкості, так як руйнування металу під дією середовища може звести нанівець всі позитивні властивості матеріалу. Це приводить до підвищення попиту на мідно-берилієві сплави. Мобільні телефони, планшети, ноутбуки і інші сучасні мобільні пристрої містять в собі відповідальні деталі, виготовлені з берилієвої бронзи, яка володіє унікальним набором фізико-механічних властивостей. Але при механічній обробці БрБ2 необхідно добре контролювати виділення токсичного пилу і ця проблема успішно вирішується при розмірній обробці мідно-берилієвого сплаву операцією хімічного травлення.

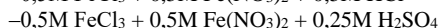
Досліджено процес хімічної іонізації сплаву БрБ2 в розчинах різного складу на основі FeCl₃. На підставі першопочаткових досліджень визначення швидкості іонізації сплаву Cu98Be в різних електролітах розчин FeCl₃ був обраний основним компонентом розчину для травлення. Вибрана серія з п'яти складів розчинів для травлення, які забезпечують високу швидкість травлення та рівномірне розчинення компонентів берилієвої бронзи (табл. 1).

Таблиця 1. Результати дослідження швидкості іонізації сплаву БрБ2 досліджуваних розчинах (час травлення сплаву БрБ2 20 хв; 25 °С)

	Склад розчину, моль/л	$V \cdot 10^{-3}$, кг/м ² ·с
1	0,5 M FeCl ₃	1,61
2	1,0 M FeCl ₃	2,99
3	0,5M FeCl ₃ + 0,5M Fe(NO ₃) ₃	2,2
4	0,5M FeCl ₃ + 0,5M Fe(NO ₃) ₃ + 0,25M H ₂ SO ₄	2,3
5	0,5M FeCl ₃ + 0,5M Fe(NO ₃) ₃ + 0,5M HCl	2,4

По мірі розчинення компонентів сплаву БрБ2 змінюється склад травильного розчину і, відповідно, швидкість розчинення компонентів сплаву. У зв'язку з цим дуже важливою є перевірка стабільності процесу травлення берилієвої бронзи в часі. Для цього було досліджено зміну швидкості розчинення сплаву БрБ2 в часі.

Згідно з експериментальними даними були обчислені кількісні показники травлення та запропоновано склад розчинів, що забезпечують високу швидкість. З метою визначення селективності хімічного розчинення БрБ2 був вивчений процес травлення в розчинах хлориду заліза протягом тривалого періоду часу. Як кількісні показники рівномірності травлення були визначені коефіцієнти селективності розчинення компонентів сплаву. Показано, що в кислому середовищі в присутності іонів-окислювачів Fe³⁺ та іонів хлору можливе рівномірне та високо ефективне хімічне розчинення берилієвої бронзи. Запропоновано оптимальні склади травильних розчинів, що забезпечують якісне травлення берилієвої бронзи за кількома критеріями – висока швидкість процесу, рівномірне розчинення компонентів сплаву, висока ємність обох компонентів берилієвої бронзи. Високошвидкісне та стабільне протягом усього циклу травлення забезпечують склади розчинів:



**ВПЛИВ ПОЛІОКСОМЕТАЛАТІВ НА ЕФЕКТИВНІСТЬ РЕАКЦІЇ ФЕНТОНА
У ДЕКОЛОРИЗАЦІЇ СИНТЕТИЧНИХ БАРВНИКІВ***Іванчук О. О.¹, Мельнікова А. М.¹, Жильцова С. В.¹,**Марійчак О. Ю.¹, Радіо С. В.¹, Опейда Й. О.²*¹Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна²Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії і вуглехімії
ім. Л. М. Литвиненка НАН України, Львів, Україна
sv.zhiltsova@donnu.edu.ua

Каталітичну активність гетерополісполук із аніоном зі структурою Пікока–Уїклі досліджено не настільки змістовно, як інших поліоксометалатів. Так, тільки в [1] вивчено тетрагідропіранілювання спиртів і фенолів, а також їх депіранілювання за присутності $(\text{NH}_4)_8[\text{Ce}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 20\text{H}_2\text{O}$. У представленій роботі досліджено кінетику деколоризації синтетичного барвника хромового темно-синього (ХТС) системою Фентона ($\text{H}_2\text{O}_2 / \text{Fe}^{2+}$) у присутності $\text{Na}_9[\text{X}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 35\text{H}_2\text{O}$ ($\text{X}^{3+} = \text{Y}^{3+}, \text{Tm}^{3+}$).

Вимірювання оксидаційної деколоризації ХТС проводилися на спектрофотометрі SPECOL 1500 (Analytik Jena, Німеччина) при довжині хвилі 530 нм у скляній кюветі з товщиною шару 1 см за температури 21 ± 2 °С. Регулювання рН системи здійснювали добавками 0,1 М розчину сульфатної кислоти до значення рН 3.0. Для проведення вимірювань було взято співвідношення $[\text{H}_2\text{O}_2]_0 / [\text{Fe}^{2+}]_0 = 1 / 2$.

Синтез солей $\text{Na}_9[\text{X}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 35\text{H}_2\text{O}$ ($\text{X}^{3+} = \text{Y}^{3+}, \text{Tm}^{3+}$) проведено відповідно до описаної в [2] методики. Склад солей і їх однофазність встановлено методами хімічного аналізу, ІЧ та КР спектроскопії, скануючої електронної мікроскопії (сканування поверхні в режимах вторинних електронів, зворотнорозсіяння електронів і характеристичного рентгенівського випромінювання).

Встановлено, що при використанні зазначених поліоксовольфраматів за умов проведення процесу спостерігається уповільнення окислювального знебарвлення розчинів субстрату. Так, для $\text{Na}_9[\text{Tm}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 35\text{H}_2\text{O}$ конверсія через 10 хв від початку процесу (S_{10}) знижується від 65 % до 20 % при переході від вихідної системи до реакційної суміші з концентрацією гетерополісполуки $3 \cdot 10^{-4}$ М, при цьому початкова швидкість реакції (V_0) зменшується втричі. У випадку $\text{Na}_9[\text{Y}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 35\text{H}_2\text{O}$ спостерігається аналогічна тенденція до зниження конверсії та V_0 : для системи з вмістом поліоксометалату $2 \cdot 10^{-4}$ М $S_{10} = 45$ %, значення початкової швидкості знизилася на 35 % і становить $1,25 \cdot 10^{-6}$ моль/(л·с). Варто зазначити, що при подальшому зростанні концентрації поліоксовольфраматів із гетероатомами Тм(III) та Y(III) до $6 \cdot 10^{-4}$ М і $4 \cdot 10^{-4}$ М відповідно (коли їх концентрації стають сумірними з початковою концентрацією Fe^{2+} у реакційній суміші) на початку реакції відбувається збільшення інтенсивності забарвлення системи.

Таким чином, було показано, що гетерополісполуки з аніоном зі структурою Пікока–Уїклі можуть бути використані для уповільнення радикально-ланцюгових процесів окислення органічних сполук. Причини й закономірності спостережуваних залежностей потребують подальших досліджень.

1. Karimian D., Yadollahi B., Mirkhani V. Ammonium Decatungstocerate(IV): An Efficient Catalyst for the Protection and Deprotection of Tetrahydropyranyl Ethers. *Inorg. Chem. Res.* 2016. Vol. 1, No 1. P. 31–39.

2. Пат. 121322. Спосіб одержання лантанної(III)-вмісних поліоксовольфраматів. Марійчак О.Ю., Розанцев Г.М., Радіо С.В. (Україна) Заявка № u2017 07269 від 10.07.2017, МПК (2017.01) C01G 41/00, C30B 29/32 (2006.01), дата публікації 27.11.2017, Бюл. № 22. 5 с.

MOLECULAR MODELING OF INTERACTION BETWEEN MACROMOLECULES OF POLYVINYL ALCOHOL AND POLYANILINE*Kachmaryk V. V., Dutka V. S., Kovalskiy Ya. P.*Ivan Franko National University of Lviv, Kyrylo&Media Str., 6, Lviv 79005, Ukraine
vitaliy.kachmaryk@lnu.edu.ua

Quantum-chemical modeling of macromolecules of polyvinyl alcohol (PVA), emeraldine salt of polyaniline (PANI) and its composite (PPC) were performed using the semi-empirical PM7 method taking into account the dielectric constant of water ($\epsilon_{PS}=78.4$) as a solvent using the MOPAC2016 program and the Winmostar graphical interface. Thermodynamic calculations of the models were performed using the key parameter THERMO (290,330,10).

An X-ray examination of the original polymers and composites with different PANI content was performed. It is shown that intermolecular hydrogen bonds of different strength are formed between PVA and PANI macromolecules, which affect the physico-chemical properties of the obtained composites.

Quantum chemical calculations indicate that PANI macromolecules can assume different conformational states. Depending on the size of the dihedral angle, the PANI molecule can form a spiral structure (folded or unfolded spiral) or a rigid rod. It should be noted that during the formation of PPC due to intermolecular interaction may change the conformation of PVA and PANI.

The calculated values of the heat of formation ($\Delta_f H^\circ$) for the composite are smaller than the sum of the corresponding values of the fragments of the studied polymers. The decrease in $\Delta_f H^\circ$ energy is associated with the formation of hydrogen bonds between the fragments of PVA and PANI. The difference between the corresponding values of $\Delta_f H^\circ$ is about 78 kJ/mol, which corresponds to the formation of 4–6 intermolecular hydrogen bonds of the fragments N-H...O and C-H...O (Figure). A further confirmation of the formation of hydrogen bonds in the composite between PVA and PANI molecules can be a decrease in the numerical values of entropy. The decrease in entropy is 382.6–388.1 J/mol·K.

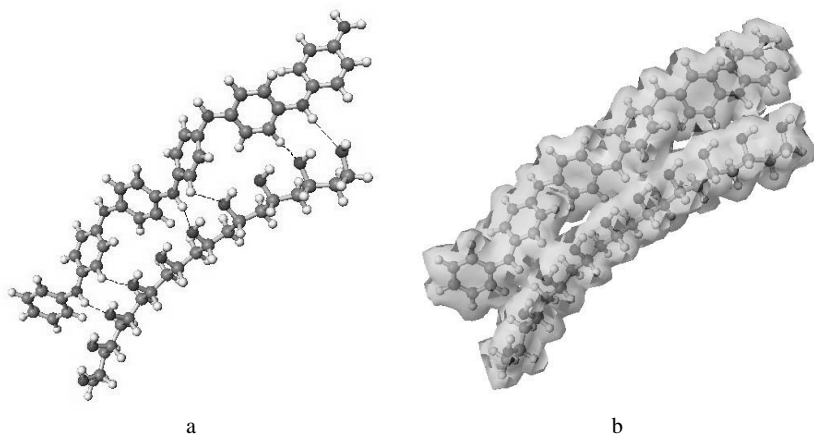


Fig. PPC model with 10 fragments of PVA and 6 fragments of PANI with H-bonds (a). The electron density surface of the PPC (b)

АНТИОКСИДАНТНИЙ ПОТЕНЦІАЛ ВОДНО-ЕТАНОЛЬНИХ ЕКСТРАКТІВ З ПОРОШКІВ ВИЩИХ ГРИБІВ

Комендра В. С., Корман Т. С., Лесишина Ю. О.

Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна
ju.lesyshyna@donnu.edu.ua

Раніше було показано, що водно-етанольні екстракти з порошків вищих грибів *Flammulina velutipes* і *Lentinus edodes* містять низькомолекулярні поліфенольні сполуки, серед яких флавоноїди і кумарини. Відомо, що флавоноїди здатні зв'язувати йони металів змінної валентності, утворюючи стабільні хелатні комплекси, що в свою чергу приводить до інгібування вільно радикальних процесів. Таким чином, завдяки хелатуючим властивостям флавоноїдів, що потрапляють до організму з їжею, здатні впливати на окислювальний статус клітин і тканин.

Мета даної роботи полягала в оцінці антиоксидантного потенціалу водно-етанольних екстрактів зазначених грибів, а саме їх здатності хелатувати йони Fe^{2+} .

Об'єкт дослідження – застосовувані як дієтичні харчові добавки тонкоподрібнені порошки висушених грибів *Flammulina velutipes* і *Lentinus edodes*, культивованих в Україні.

Для одержання екстрактів наважку порошку грибу вносили у колбу зі зворотнім холодильником, додавали екстрагент – водно-етанольний розчин з концентрацією етанолу 30 %, 40 %, 50 %, 60 %, 70 %, 80 %, 96 % (за об'ємом) у співвідношенні порошок:екстрагент – 1:10 і нагрівали протягом 2 год на водяній бані за температури кипіння екстрагенту.

Хелатуючу здатність (ХЗ) екстрактів визначали за класичною методикою, що базується на реакції інгібування утворення ферозин- Fe^{2+} комплексу, модифікованою співробітниками кафедри біофізичної хімії і нанобіотехнологій ДонНУ імені Василя Стуса. До 0,7 мл екстракту додавали 2,1 мл дистильованої води і 0,07 мл 2 мМ розчину $FeSO_4$. Через 5 хв додавали 0,14 мл 1 мМ розчину ферозину. Суміш ретельно перемішували, інкубували за температури 35 °С протягом 10 хв і вимірювали оптичну густину (А) при довжині хвилі 562 нм. Хелатуючу здатність розраховували за формулою:

$$ХЗ \% = \frac{A_{\text{контроль}} - A_{\text{екстракт}}}{A_{\text{контроль}}} \cdot 100 \%$$

Результати наведені на рисунку.

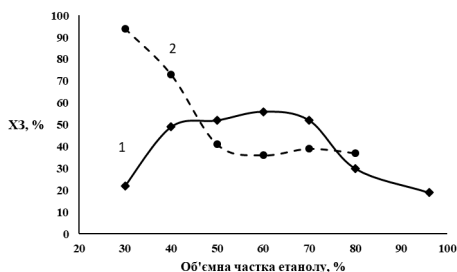


Рис. Залежність ХЗ водно-етанольних екстрактів з порошків *Flammulina velutipes* (1) і *Lentinus edodes* (2)

Як видно з рисунку, усі екстракти проявляють хелатуючу здатність по відношенню до Fe^{2+} . Найбільша ХЗ спостерігається для 30 %-вого водно-етанольного екстракту *Lentinus edodes* (ХЗ – 93 %). ХЗ водно-етанольних екстрактів *Flammulina velutipes* в діапазоні концентрацій екстрагенту 40–70 % знаходиться у межах – 50–60 %.

Результати співвідносяться з одержаними раніше даними щодо загального вмісту фенольних сполук і флавоноїдів в означених екстрактах.

ВЛИЯНИЕ СВЧ ОБРАБОТКИ НА ПОРИСТУЮ СТРУКТУРУ ЦИРКОНИЙСИЛИКАТНЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ

Кравченко Н. В., Редькина А. В., Коновалова Н. Д., Цыба Н. Н.

Институт сорбции и проблем эндоэкологии Национальной академии наук Украины,
Киев, Украина

nikolaikravchenko32@gmail.com

Цирконий силикаты, благодаря их развитой пористой структуре и сильной энергии связи между элементами, находят широкое применение как керамические материалы, высокотемпературные сорбенты и носители катализаторов. Обычным методом получения этих смешанных оксидов является их золь-гель синтез из растворов солей или алкоксидов элементов и последующая термообработка. Они обычно имеют аморфную, неупорядоченную микро-мезопористую структуру, диаметр пор которой можно регулировать длительной гидротермальной обработкой (ГТО) гидрогелей при повышенных температурах. Это требует значительных затрат энергии, снизить которые можно применением кратковременного нагрева материала с помощью СВЧ излучения.

Сферические гранулы гидрогеля ZrO_2-SiO_2 , содержащие ~ 45 % ZrO_2 получали по технологии коагуляции в капле непрерывным методом золь-гель из водных растворов $ZrOCl_2$ и K_2CO_3 , образующих комплекс $K_2 [ZrO(CO_3)_2]$, и Na_2SiO_3 . Гранулы отмывали от примесей, переводили в активную Н-форму, сушили перед измерением текстурных параметров или перед этим подвергали ГТО или СВЧ обработке в инверторной микроволновой печи при мощности излучения в 1000 Вт. Из результатов, показанных на рисунке и в таблице видно, что краткий СВЧ нагрев чистого гидрогеля несущественно меняет структуру микро-мезопористого образца, но при его пропитке солью NH_4HCO_3 уже через 15 мин формируется однородно мезопористая структура, в то время как при ГТО чистого гидрогеля этот результат достигается за несколько часов.

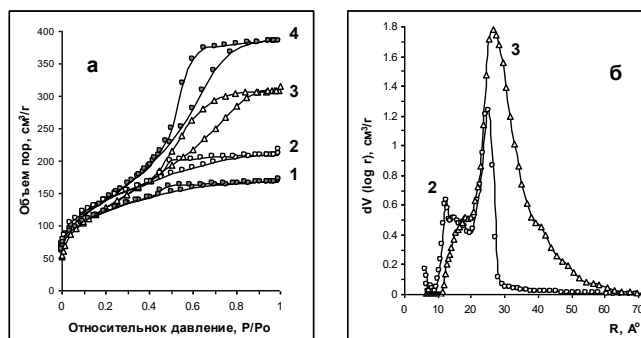


Рис. 1. Изотермы низкотемпературной адсорбции азота (а) и пример распределения пор по размерам радиусов (б) для образцов Zr-Si гидрогелей, обработанных при условиях, приведенных в таблице 1

Таблица 1. Характеристики поверхности Zr-Si гидрогелей

№	Обработка образца	Суд, м ² /г;	V пор, см ³ /г	R пор дит Å°	R пор ср Å°
1	Сушка при 120 °С	389,3	0,2546	12,37	13,08
2	СВЧ 15 мин	432,9	0,3386	12,52	13,63
3	NH ₄ HCO ₃ , СВЧ 15 мин	464,7	0,4874	26,42	20,98
4	15 ч ГТО при 270 °С.	493,6	0,5976	28,41	24,22

Cs-, Mg-, Zn-CONTAINING HIERARCHICAL ZEOLITES AS EFFECTIVE CATALYSTS FOR 2-AMINOTIOPHENES PRODUCTION BY GEWALD REACTION

Kurmach M. M., Konyshcheva K. M., Lozovytska O. I., Povalchuk S. V., Shvets O. V., L. V. Pisarzhevskii Institute of Physical Chemistry, the NAS of Ukraine, 31 Nauki prosp., Kyiv, Ukraine, 03028 mazinator3710@ukr.net

Gewald reaction is widely used for 2-aminothiophenes production from cyclic ketones, sulfur and malonodinitrile. This process proceeds by 2 stages (fig.1): the first stage between ketone and malonodinitrile (also known as Knoevenagel reaction) takes place both at the acid and basic centers, while the reaction between **2** and sulfur needs basic centers in such catalysts [1]. Basic compounds (such as triethylamine, Zn- and Ti-containing zeolites [2,3]) are widely used as catalyst for this process. Hierarchical zeolites with developed external surface is effective catalysts for transformations including bulk molecules. It is expected that doped with basic oxides and titanium oxide hierarchical zeolites have high dispersion of metal particles and high availability for bulk molecules and thus will be effective catalysts for this process. Synthesis of the hierarchical zeolite matrices was proceeded by using Gemini-surfactants as structure-directing agents (SDA). Cesium forms of hierarchical zeolites obtained by ion exchange method, while Mg-, Ti-, Zn-containing zeolites were synthesized by impregnation of metal salts followed by their decomposition. The catalytic properties of the synthesized materials were investigated in the Gewald process of converting cyclohexanone (**1**) to 2-amino-4,5,6,7-tetrahydrobenzo [b]thiophene-3-carbonitrile (**3**) (Fig. 1). High yield of the target product is achieved for Cs- and Mg-containing hierarchical zeolites of structural type BEA, whereby in the case Cs-BEA (nanosponge), quantitative conversion of the ketone into the target product is achieved (Table 1).

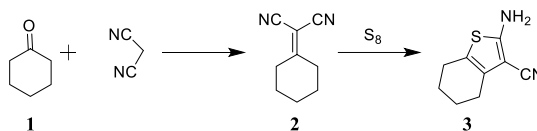


Fig 1. Scheme of Gewald process of 2-amino-4,5,6,7-tetrahydrobenzo[b]thiophene-3-carbonitrile (**3**) production

Table 1. Catalytic properties of Cs-, Mg-, Ti- та Zn-containing hierarchical BEA zeolites in process of cyclohexanone (**1**) transformation into 2-amino-4,5,6,7-tetrahydrobenzo[b]thiophene-3-carbonitrile (**3**)

Catalyst	Conversion 1 , %	Selectivity, %			Yield of 3 , %
		3	2	Other	
CsAl-BEA_nsheet	96,48	99,11	0,69	0,20	95,61
CsAl-BEA_nsponge	100,00	100,00	0,00	0,00	100
ZnO/Al-BEA_nsheet	93,35	42,93	55,11	1,97	40,07
MgO/Al-BEA_nsheet	95,59	97,91	2,02	0,07	93,58

1. Journal of heterocyclic chemistry, 1999, 36, 2, 333-345.
2. Microporous and Mesoporous Materials, 2016, 231, 100-109.
3. Applied Organometallic Chemistry, 2017, 31, 11, e3779.

**DEVELOPMENT OF COMPOSITES OF NICKEL NANOPARTICLES
WITH ANODIC NANOPOROUS ALUMINA***Kurmach M. M.*¹, Mishura A. M.¹, Lytvynenko A. S.¹, Brzózka A.², Zaraska L.²¹L. V. Piszarzhevskii Institute of Physical Chemistry of the National Academy of Sciences of Ukraine, Prospekt Nauky, 31, Kyiv, 03028, Ukraine²Faculty of Chemistry, Jagiellonian University, Gronostajowa 2, 30-387 Kraków, Poland
mazinator3710@ukr.net

Fine organic synthesis is an important field of chemical industry focusing on preparation of complicated organic substances in gram-scale amounts. A family of reactions crucial for this is catalyzed with compounds or nanostructures of palladium, *e.g.* hydrogenation or C–C cross-coupling [1]. High cost and scarcity of Pd motivates the search of cheaper alternatives. Ni is one of the most prospective substituents, active in a number of the Pd-catalyzed reactions (*e.g.*, [2]). Development of novel supports for Ni nanoparticles (NPs) is another prospective way to facilitate the target processes. It is especially attractive to develop supports that possess high specific surface and constitute a whole entity in order to avoid extra steps of separation of the reaction products from the catalyst.

The work aimed to develop methods of formation of novel nanocomposites by impregnation of nanosized Ni into anodic nanoporous alumina (AAO), elucidation of the influence of the impregnation conditions on the structure of the composites.

AAO samples were prepared following the two-step anodization procedures, reported previously by us [3]. AAO emerged as a thin (dozens of micrometers) layer on high purity Al plate. The layer possessed a system of quasi-cylindrical pores (dozens of nanometers in diameter) oriented normally to the surface and arranged in honeycomb-like structure (Fig. 1). Impregnation was achieved via treatment of AAO on Al plate with solutions of NiCl₂ in water and methanol. Treatment was performed by: (1) immersion of the plate into solution; (2) dropcasting of the solution onto AAO layer; (3) immersion into solution accompanied with ultrasonication. Then, Ni²⁺ was reduced to Ni⁰ by a solution of NaBH₄ in methanol.

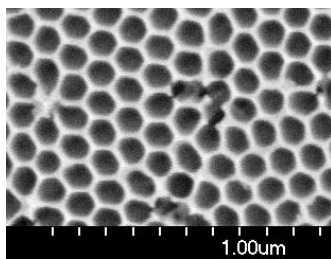


Fig. 1. SEM image of AAO sample

It was found that ultrasonic treatment in concentrated (over 0.1 mol/L) NiCl₂ solutions in methanol was crucial for ensuring even distribution of the impregnating NPs throughout the surface. Ni deposited as NPs (dozens of nanometers in diameter): (a) separated ones “plugging” the pores or (b) as aggregates on the outer surface.

The work was supported by a joint Polish-Ukrainian grant co-funded by the Ministry of Education and Science of Ukraine (contract No M/115-2020) and the Polish National Agency for Academic Exchange (contract No PPN/BUA/2019/1/00034/U/00001).

1. Chem. Rev., 2011, 111, 3, 2251–2320.
2. Inorg. Chem. Commun., 2020, 121, 108203.
3. Electrochim. Acta, 2016, 198, 259–267.

НОВІ ТЕПЛОБАР'ЄРНІ ПОКРИТТЯ НА ОСНОВІ КОМПЛЕКСНО ЛЕГОВАНОГО ZrO_2

Макудера А. О., Редько В. П., Лакиза С. М.

Інститут проблем матеріалознавства ім. Францевича НАН України, Київ, Україна
alina.makudera@gmail.com

У газотурбінних двигунах нового покоління робоча температура повинна зрости до 1500–1600 °С, що спонукає до створення нових матеріалів керамічного шару термобар'єрних покриттів (ТБП) з меншою теплопровідністю і стабільних при цих температурах. Таким вимогам можуть задовольняти матеріали на основі ZrO_2 з комплексним стабілізаторами на основі оксидів рідкоземельних елементів (РЗЕ) ітрієвої підгрупи (середньоентропійна кераміка). З точки зору мікроструктурного проектування керамічного шару представляють інтерес концентрати оксидів РЗЕ природного походження, одержані в процесі переробки апатитових руд.

Для нанесення покриття методом електронно-променевого випаровування-конденсації (атомно-молекулярного осадження парів в вакуумі (ЕВ-PVD) керамічним методом виготовлено мішень складу (мас.%) 90 M- ZrO_2 – 10 ВК, де ВК – концентрат оксидів РЗЕ ітрієвої підгрупи складу (мас.%): Y_2O_3 –13,3; Tb_4O_7 –1.22; Dy_2O_3 –33.2; Ho_2O_3 –8.9; Er_2O_3 –21.8; Tm_2O_3 –1.86; Yb_2O_3 –12.5; Lu_2O_3 –0.57; сумарний вміст інших оксидів – 6.65 (у тому числі Al_2O_3 – 3,2)

Одержано гладко-шорсткувате щільне глянцеве складно-композиційне покриття завтовшки 90–95 мкм темно-сірого кольору. За результатами рентгенофазового аналізу визначено, що фазовий склад покриття – кубічний твердий розчин типу флюориту на основі ZrO_2 (F- ZrO_2). Між керамічним і зв'язуючим металевим покриттям утворився шар складної шпінелі на основі Al_2O_3 товщиною 2–2,5 мкм. Мікроструктури ТБП на спинці та у коритці робочої лопатки представлено на Рисунок.

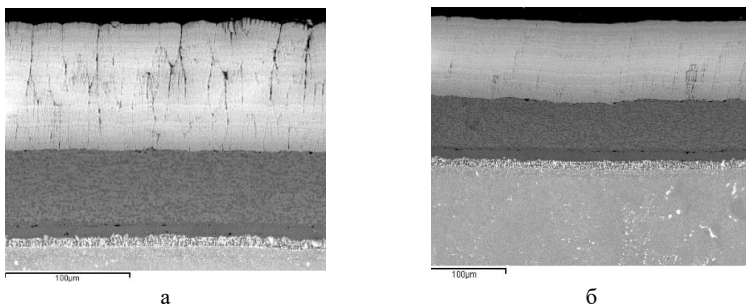


Рис. Мікроструктура складно – композиційного покриття на спинці (а) та в коритці (б) робочої лопатки

Мікроструктура керамічного шару ТБП покриття нерегулярна, вміщує широкі перисто-подібні, досить щільні утворення неправильної форми, що зростаються поміж собою. В покритті утворився внутрішній шар, що вміщує поруваті облямівки навколо перистоподібних утворень (Рисунок). Мікротвердість складно-композиційного покриття становить : на спинці – 1 381 МПа, а в коритці – 1 679 МПа. Складно-композиційне покриття витримало 161 термозміну, що вище, ніж у стандартного покриття на основі твердого розчину ZrO_2 , стабілізованого Y_2O_3 (138 термозмін). Удосконалення процесів підготовки вихідних мішеней і особливостей нанесення покриттів дозволить створити складно-композиційний керамічний шар ТБП з необхідним комплексом фізико-технічних характеристик.

SURFACE MODIFICATION EFFECT BY Fe IONS ON PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF ANATASE AND RUTILE

*Manuilov E. V.*¹, Shymanovska V. V.¹, Khalyavka T. A.², Gavrylko T. A.¹, Shcherban N. D.³

¹Institute of Physics, NAS of Ukraine, 46 Nauki Ave., Kyiv, Ukraine, 03028

²Institute for Sorption and Problems of Endoecology, NAS of Ukraine, General Naumov str., 13, Kyiv, Ukraine, 03164

³L. V. Pisarzhevskii Institute of Physical Chemistry, NAS of Ukraine, Prospekt Nauky, 31, Kyiv, Ukraine, 03028.
evm.sem18@gmail.com

Titanium dioxide (TiO₂) in the form of polydisperse rutile or anatase has been considered as one of the best material for photocatalysis, sensors and related technologies. However, the application of pure TiO₂ has inherent limitation due to the band gap in the near-UV spectrum at 3.2 eV for anatase and 3.0 eV for rutile rendering it inactive under visible light. Generally, for shifting the light absorption edge of TiO₂ into the visible range; to improve its photoactivity and facilitate the use of sunlight as an inexpensive, renewable energy source the doping is used. Selective doping of TiO₂ with transition metals ions increases the formation of Ti³⁺ ions, as more Ti³⁺ states may cause more oxygen defects, which contribute the efficient adsorption of oxygen on the titania surface.

The aim of this work is study of the effect of Fe (III) ions on structural, optical and photocatalytic properties of anatase and rutile TiO₂. The polydispersed nanocrystalline pure TiO₂ and surface-modified TiO₂ by Fe³⁺ ions were obtained. The anatase and rutile surfaces were modified by Fe (III) ions by means of the adsorption from diluted solutions of FeCl₃ salts. Pure and Fe-doped TiO₂ samples were characterized using X-ray diffraction (XRD), X-ray fluorescence (XRF), SEM-EDS and TPD analysis, FT-Raman spectroscopy.

The obtained samples have a well crystallized pure-phase structure. The particles of anatase and rutile were aggregates of nanocrystallites. It was established that the adsorption of Fe ions is subject to the Langmuir model for rutile and to Freundlich for anatase. The anatase samples showed the higher sorption capacity than rutile. The atomic percentage of the elements Ti:O:Fe for pure TiO₂ and TiO₂/Fe samples, obtained by EDS technique were 1:2:0 for pure rutile and anatase, 1:2,1:0,07 – anatase/Fe and 1:2,1:0,04 – rutile/Fe. In the process of iron adsorption, we observed a decrease in the pH of solutions, i.e. their acidification, for all studied samples. This acidification of FeCl₃ solutions is explained by the replacement of protons of surface OH groups (≡Ti-OH) by adsorbed iron cations and formation on the sorbent surface of compounds of the type (Fe^{m+}O²⁻Tiⁿ⁺).

According to the data of temperature-programmed desorption of ammonia (TPDA) the Fe-doped anatase possesses significantly higher concentration of acid sites compared to other investigated samples. Medium strength and weak acid sites revealed by TPDA can be ascribed to Lewis acid sites, whereas strong acid sites inherent to anatase-based sample obviously correspond to Brønsted acid sites found using FTIR-spectroscopy.

The effect of Fe ion adsorption on the stoichiometry of synthesized TiO₂ samples was investigated using the method of FT-Raman scattering.

Photocatalytic activity of the samples was evaluated for dye Safranin T destruction. The adsorption-desorption equilibrium for SF-photocatalyst system was achieved within 120 min for all samples. The irradiation of the dye aqueous solution without a photocatalyst showed that 29 % (after 3 h) of SF dye molecules undergo photolysis processes under UV light. Photocatalytic degradation of Safranin T increase twice in the present of photocatalysts.

**СТІЙКІСТЬ МАТЕРІАЛІВ СИСТЕМИ $ZrO_2 - Y_2O_3 - CeO_2$,
ДО ПРОЦЕСУ СТАРІННЯ***Марек І. О.*, Рубан О. К., Редько В. П., Дуднік О. В.Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України, Київ, Україна
Mega_marekirina@ukr.net

Завдяки дії ефекту трансформаційного зміцнення матеріали на основі ZrO_2 володіють унікальним комплексом фізико-механічних властивостей. Відсутність будь-яких реакцій з живим організмом дозволяє застосовувати біоінертну кераміку на основі діоксиду цирконію в якості заміни пар тертя тазостегнових суглобів. Але наявність в цих матеріалах максимально високого вмісту метастабільної фази $T-ZrO_2$, з одного боку, визначає унікальні характеристики міцності матеріалу, а, з іншого боку, матеріал схильний до низькотемпературної деградації («старіння») у присутності води. Старіння відбувається шляхом поступального фазового перетворення $T-ZrO_2 \rightarrow M-ZrO_2$, викликаного присутністю вологи, на поверхні кераміки. Це призводить до поверхневої шорсткості і мікророзтріскуванню матеріалу, що впливає на знос головок ендопротезу кульшового суглоба, оскільки поява шорсткості збільшує швидкість стирання на поверхні частин протезу. Рішенням цієї проблеми є сумісна стабілізація ZrO_2 оксидами ітрію та церію. Закономірним є інтерес до розробки матеріалів системи $ZrO_2 - Y_2O_3 - CeO_2$, так як комплексна стабілізація ZrO_2 оксидами ітрію і церію призведе до підвищення характеристик міцності і стійкості до старіння композитів на основі ZrO_2 .

Ціль роботи: визначити фізико-хімічні властивості композитів на основі ZrO_2 складу (мол. %): $92,5 ZrO_2 - 2,5 Y_2O_3 - 5 CeO_2$ ($Zr_{2,5}Y_5Ce$), який одержано методом гідротермального синтезу у лужному середовищі.

Методи дослідження: рентгенофазовий аналіз (РФА), диференціально-термічний аналіз (ДТА), електронна мікроскопія, мікроструктурний аналіз здійснено петрографічним методом, та метод теплової адсорбції азоту (БЕТ).

Визначено, що після гідротермального синтезу у порошку складу ($Zr_{2,5}Y_5Ce$) утворились термодинамічно нерівноважна система, до складу якої входить низькотемпературний метастабільний кубічний твердий розчин на основі діоксиду цирконію $F-ZrO_2$, та $T-ZrO_2$.

Визначено фізико-хімічні закономірності зміни властивостей гідротермального нанокристалічного порошку складу (мол %): $92,5ZrO_2-2,5Y_2O_3-5CeO_2$ після одержання, та термічної обробки в інтервалі 400–1300 °С. Встановлено утворення після гідротермального синтезу низькотемпературного метастабільного $F-ZrO_2$. Фазове перетворення $F-ZrO_2 \rightarrow T-ZrO_2$ у вказаному порошку проходить в інтервалі 700–850 °С. Утворення $M-ZrO_2$ зафіксовано у незначній кількості, порядку 2 %. Порошок характеризується підвищеною активністю до спікання. Питома поверхня змінюється від 1 до 150 м²/г.

Проведено дослідження стійкості до низькотемпературної деградації властивості «старіння» композитів з порошку вказаного складу, що термічно оброблений за різних умов. Встановлено збереження 98 % $T-ZrO_2$ в композитах складу (мол %): $92,5ZrO_2-2,5Y_2O_3-5CeO_2$, не залежно від температури термічної обробки вихідного порошку, що вказує на його підвищену стійкість до старіння. Визначено перспективність використання порошку складу (мол %): $92,5ZrO_2-2,5Y_2O_3-5CeO_2$ для мікроструктурного проектування біоінертних матеріалів різноманітного призначення.

СТВОРЕННЯ НОВИХ КАТАЛІЗАТОРІВ «ПАЛАДІЙ НА ВУГІЛЛІ»

*Мельничук В. М.^{1,2}, Бичко І. Б.¹*¹Інститут фізичної хімії ім. Л. В. Писаржевського НАН України, Київ, Україна²Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, Україна
vadymmelnichuk5@gmail.com

Каталізатори з нанесеними на вуглецеві носії наночастинками благородних металів широко використовуються в хімічній промисловості та тонкому органічному синтезі. Розвинена питома поверхня, змочуваність широким спектром розчинників та термічна стабільність, є основними перевагами вуглецевих матеріалів у порівнянні з оксидними носіями. Незважаючи на велику кількість комерційних паладієвих каталізаторів, існує потреба розробки більш ефективних каталізаторів для конкретних систем. Відповідно, з метою створення нового високоефективного каталізатора для застосування в тонкому синтезі в цій роботі було розроблено 3 методики отримання високодисперсних наночастинок паладію на вугіллі з вмістом металу 5 % ($\pm 0,5$ %). Висока каталітична активність нанесених каталізаторів визначається в першу чергу високою дисперсністю нанесеного металу.

Вуглецевим носієм використовували активоване вугілля з питомою поверхнею 1580 м²/г і діаметром мікропор 0,79 нм, яке окиснювали різними методами в розчині HNO₃ (65 %). Каталізатор готували з використанням вугілля з найбільшим масовим виходом, отриманого після кип'ятіння впродовж 1 год в азотній кислоті та витримування протягом 10 днів в азотній кислоті без перемішування за кімнатної температури.

Першим способом каталізатор отримували осадженням гідроксиду паладію на окиснене вугілля з розчину H₂[PdCl₄], додаванням до нього розчину Na₂CO₃. Далі відфільтроване вугілля з нанесеним гідроксидом відновлювали в атмосфері H₂ протягом 2 год за 200 °С. Другим способом розчин H₂[PdCl₄] відновили до металічного паладію додаванням розчину HCOONa. Третім способом нанесений металічний паладій отримували шляхом додаванням розчину HCOONa до розчину H₂[PdCl₄] у присутності лимонної кислоти.

Розмір частинок паладію було розраховано прямим вимірюванням з використанням просвічуючої електронної мікроскопії (ТЕМ) та визначено за рівнянням Шеррера за результатами рентгенофазового аналізу (XRD). ТЕМ-знімки отриманих зразків представлені на Рис. 1. Отримані результати показують, що найменший розмір частинок утворюється за методикою в якій паладій відновлюється воднем. Цей результат є основою для подальшої вдосконалення методики отримання високоефективного каталізатора з нанесеним паладієм на вугіллі.

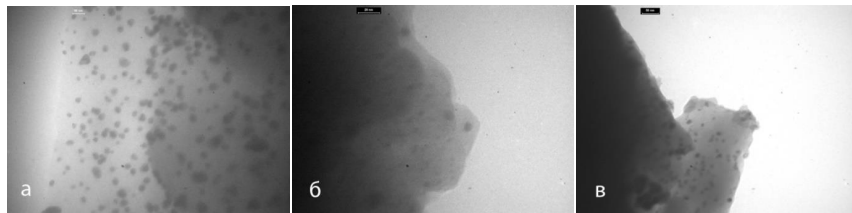


Рис. 1. ТЕМ знімки зразків с паладієм отриманим шляхом відновлення: а) воднем; б) форміатом; в) форміатом у присутності лимонної кислоти

РЕАКЦІЙНА ЗДАТНІСТЬ АРИЛЗАМІЩЕНИХ ФТАЛІМІД-*N*-ОКСИЛЬНИХ РАДИКАЛІВ У РЕАКЦІЯХ ВІДРИВУ Н-АТОМА ВІД α -С-Н ЗВ'ЯЗКІВ БЕНЗИЛОВИХ СПИРТІВ

*Мельникова А. М.*¹, Гордєєва І. О.¹, Компанець М. О.², Куц О. В.^{1,2}, Шендрик О. М.¹

¹Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна

²Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України, Київ, Україна

a.melnikova@donnu.edu.ua

Увага до *N*-гідрокси сполук обумовлена їх ефективністю в якості каталізаторів аеробного окиснення органічних субстратів. Найбільш відомим представником *N*-гідрокси імідів є *N*-гідроксифталімід (NHPI), який у процесах аеробного окиснення легко генерує *in situ* фталімід-*N*-окисльні радикали (PINO). Утворені радикали в каталітичному циклі здатні відривати атоми Гідрогену від аліфатичних зв'язків вуглеводнів, бензилових спиртів. Метою представлено дослідження є вивчення реакційної здатності PINO радикалів в реакціях відриву Н-атома від С-Н зв'язків у залежності від замісників у бензольному кільці NHPI.

У роботі спектrophотометричним методом досліджувалися арил заміщені радикали PINO, які були генеровані шляхом окиснення фенілїоддіацетатом (PhI(OAc)₂) відповідних арил заміщених NHPI (3-CH₃-NHPI і 3-Cl-NHPI) в ацетонітрилі. При додаванні окисника до розчину *N*-гідрокси сполук в УФ-спектрі спостерігається поява

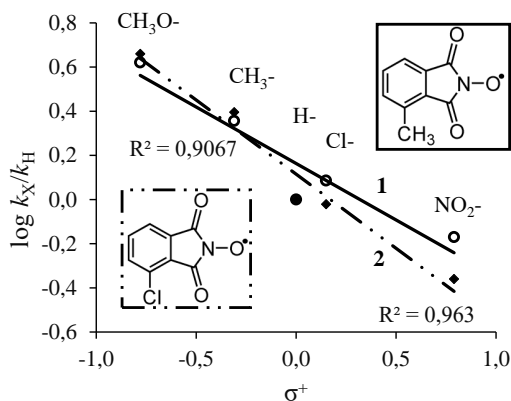


Рис. Залежність Гаммета для реакцій 3-CH₃-PINO (1) і 3-Cl-PINO (2) з *para*-заміщеними бензиловими спиртами

para-заміщених бензилових спиртів з електроно-донорними та електроно-акцепторними замісниками. Отримані дані вкладаються на пряму у координатах рівняння Гаммета з використанням σ^+ констант замісників Брауна-Окамото, що наведено на рисунку. Збільшення кута нахилу залежності для радикала 3-Cl-PINO вказує на зростання впливу полярного фактора на перебіг реакції при введенні електроно-акцепторного замісника порівняно з електроно-донорним 3-CH₃. Отримані із залежностей $\log k_x/k_H$ vs. σ^+ значення параметрів ρ складають $-0,51$ для 3-CH₃-PINO і $-0,67$ для 3-Cl-PINO, що вказує на електрофільний характер досліджуваних радикалів і вплив полярних структур у перехідному стані реакції.

нових смуг поглинання у діапазоні 350–500 нм з максимумом 386 нм для 3-CH₃-PINO і 378 нм для 3-Cl-PINO. Абсорбція смуг поглинання радикалів поступово зростає і через деякий час починає зменшуватись, що свідчить про їх розпад. Константи розпаду першого порядку (k_d) визначені за температури 30 °C для 3-CH₃-PINO і 3-Cl-PINO дорівнюють $2,4 \times 10^{-4} \text{ c}^{-1}$ і $1,0 \times 10^{-3} \text{ c}^{-1}$ відповідно.

Розраховано константи швидкості реакції відриву атому Гідрогену (k_H) досліджуваними радикалами від α -С-Н зв'язків

ЕНЕРГЕТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ АСОЦІАТІВ БАРВНИКІВ З ІОННИМИ ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНИМИ РЕЧОВИНАМИ

Шаповалов С. А., *Мошаренкова О. В.*

Харківський національний університет ім. В. Н. Каразіна, Харків, Україна
serghey.a.shapovalov@karazin.ua

Вивчення асоційованих наночастинок на основі барвників і функціоналізованих речовин набуває плідного розвитку. Інтенсивно досліджуються наносистеми «барвник + поверхнево-активна речовина (ПАР)», що цікавить провідні галузі хімії, біології, біофізики [1], у тому числі для кількісного визначення екотоксикантів (ПАР, металів) у різних середовищах або для вирішення низки практичних фізико-хімічних завдань (визначення критичної концентрації міцелоутворення) [2].

Для опису досить складних багатоатомних молекул останнім часом все більше використовуються комп'ютерні методи. У даній роботі проведено комп'ютерне моделювання взаємодій ціанінового барвника – пінаціанолу (ПНЦ) з катіонами цетилпіридиній броміду (ЦПБ) і аніонами додецилсульфату натрію (ДСН). Моделювання здійснювалося за допомогою методів: молекулярно-механічного ММ+ (оптимізація геометрії молекул) та напівемпіричних АМ1 та РМ3 (розрахунки стандартної ентальпії утворення сполуки) у програмному пакеті HyperChem 8.0. Особливості використання напівемпіричних методів полягає у тому, що розрахунки стосуються валентних електронів, використовуються не оптимізовані базисні функції електронних орбіталей та експериментально отримані параметри (параметризація). Основною відмінністю методу РМ3 є те, що його параметри отримані для більшої кількості експериментальних даних.

Сполука	Ентальпія, ккал/моль	
	АМ1	РМ3
ПНЦ	412	372
ДСН	147	98
ЦПБ	124	137
ПНЦ+ДСН	559	470
ПНЦ+ЦПБ	536	509
ПНЦ·ДСН	186	156
ПНЦ·ЦПБ	357	279

У таблиці представлені результати моделювання для катіону ПНЦ та іонів ПАР, а також для асоціатів ПНЦ·ДСН та ПНЦ·ЦПБ. Дані ПНЦ+ПАР є алгебраїчною сумою відповідних стандартних ентальпій утворення відповідних іонів.

З даних таблиці випливає, що виграш енергії, ккал/моль, становить: для асоціата ПНЦ з ДСН: $559-186 = 373$ (АМ1), $470-156 = 314$ (РМ3) а для асоціату ЦПБ: 179 (АМ1), 230 (РМ3). Таким чином, результати свідчать, по-перше, про взаємну

узгодженість розрахунків різними методами і, по-друге, про досить інтенсивну взаємодію барвника з іонними ПАР. На підставі отриманих даних, також можна зробити висновок, що утворення асоціатів барвників з іонними ПАР є більш термодинамічно вигіднішим порівняно з неіонними ПАР. Такий характер енергетики спостерігався не тільки для вище наведених систем, а і для подібних систем з іншим барвником – етилеозином [3].

1. Shapovalov S.A. Association Processes with the Participation of Dyes in Solutions: Thermodynamic and Equilibrium Characteristics of Nanosystems. – Riga : Academic Publishing of European Union, OmniScriptum Publishing group, 2020. – 114 p.

2. Shapovalov S. Interaction of Dyes with Cationic Surfactants in Solutions: Determination of Critical Micelle Concentration / S. Shapovalov, V. Ponomariov // Int. Lett. Chem., Phys. Astronomy. – 2019. – Vol. 81. – P. 27 – 34.

3. Shapovalov S., Ponomariov V. The “Xanthene Dye – Surfactant” Interactions: Energy and Structures of Nanoassociates / S. Shapovalov, V. Ponomariov // AASCIT J. Nanosci. – 2019. – Vol. 5 – P. 1 – 6.

**КАТАЛІТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НАНЕСЕНОГО ОКСИДУ ГРАФЕНУ
НА ОКСИД АЛЮМІНІЮ В РЕАКЦІЇ ГІДРУВАННЯ ЕТИЛЕНУ***Носач В. В.^{1,2}, Бичко І. Б.¹*¹Інститут фізичної хімії ім. Л. В. Писаржевського НАН України, Київ, Україна²Національний університет «Києво-Могилянська академія», Київ, Україна
victorynosach@gmail.com

На прикладі реакцій гідрування ненасичених вуглеводнів було показано, що вуглецеві наноматеріали проявляють каталітичну активність у реакціях гідрування молекулярним воднем. Враховуючи такі характеристики, як високий ступінь кристалічності та розвинену поверхню відновлений оксид графену (ВОГ) та композити на його основі викликають інтерес як новий перспективний клас каталізаторів. Дана робота присвячена встановленню каталітичних властивостей нанесеного ВОГ на оксид алюмінію у реакції гідрування етилену.

Серію зразків нанокompозитів з нанесеним ВОГ на оксид алюмінію було приготовано методом просочення Al_2O_3 колоїдом оксиду графену (ОГ) з подальшим відновленням воднем. Було отримано серію зразків з наступним вмістом ВОГ: 0,005 мг/г, 0,025 мг/г, 0,1 мг/г, 0,25 мг/г, 0,5 мг/г, 1 мг/г, 5 мг/г та 10 мг/г. ОГ було одержано окисненням графіту, за модифікованим методом Хаммерса [1].

Каталітичну активність зразків було встановлено у проточному трубчатому реакторі з хроматографічним контролем продуктів у реакції гідрування етилену. Склад реакційної суміші був наступний: 90 % H_2 та 10 % C_2H_4 , процес гідрогенізації етилену досліджували в температурному діапазоні 50–400 °С. Отримані зразки також було досліджено методами скануючої електронної мікроскопії (СЕМ) та Раманівської спектроскопії.

Аналіз отриманих зразків методом СЕМ (Рис. 1) підтвердив, що нанесений оксид графену, нашаровується у вигляді листів не покриває повністю всю площу носія, навіть при великих концентраціях. Розміри листів нанесеного оксиду графену змінюються в межах 0,5–2 мкм.

Аналіз Раманівських спектрів зразків ВОГ/ Al_2O_3 показав, що відношення інтенсивності ліній D та G (I_D/I_G), лежить у межах 1,20–1,65. Отже, зі зменшенням концентрації ВОГ, нанесеного на оксид алюмінію, дефектність зразків не змінюється.

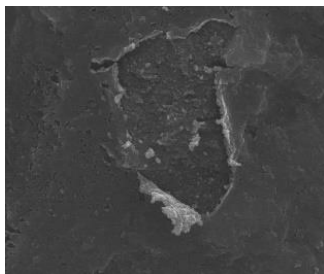


Рис. 1. СЕМ зображення
ВОГ/ Al_2O_3 10 мг/г

Каталітична активність зразків з нанесеним ВОГ зменшується зі збільшенням вмісту нанесеного ВОГ. Найбільшою каталітичною активністю характеризується зразок з концентрацією ВОГ 0,025 мг/г, а саме $5,05 \cdot 10^{-4}$ моль \cdot с⁻¹ \cdot г⁻¹, що в перерахунку на нанесений ВОГ становить $2,02$ моль \cdot с⁻¹ \cdot г⁻¹. А найменшою зразок з концентрацією ВОГ 10 мг/г – $1,35 \cdot 10^{-7}$ моль \cdot с⁻¹ \cdot г⁻¹ та $2,69 \cdot 10^{-8}$ моль \cdot с⁻¹ \cdot г⁻¹ відповідно. Виходячи з отриманих результатів можна зробити припущення відносно того, що суттєву роль в даних системах відіграє явище спіловеру водню.

1. Marcano D. Improved Synthesis of Graphene Oxide / D. Marcano, D. Kosynkin, J. Berlin. // ACS Nano. – 2010. – С. 4806–4814.

Робота виконана за підтримки Національного фонду наукових досліджень України (грант 2020.02/0050).

CATALYTIC REDUCTIVE AMINATION *p*-METHOXYBENZALDEHYDE WITH *DI-ISO*-PROPYLAMINE AT PRESENCE OF Co-CONTAINING COMPOSITEAsaula V. M.¹, Omelian L. V.¹, Gavrilenko K. S.^{2,3}, Pariiska O. O.¹, Ryabukhin S. V.^{2,3},
Volochnyuk D. M.^{2,3,4}, Kolotilov S. V.^{1,3}¹L. V. Pisarzhevskii Institute of Physical Chemistry of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine²Enamine Ltd, Kiev, Ukraine³National Taras Shevchenko University of Kyiv, Ukraine⁴Institute of Organic Chemistry of the NAS of Ukraine, Kiev, Ukraine

i_kushchenko@ukr.net

Reductive amination is important reaction widely applied for the preparation of different kinds of amines, which are important building blocks for medicinal chemistry. In such processes, carbonyl compounds react with amines at presence of a reducing agent and form corresponding amines. In particular, interaction of substituted benzaldehydes with branched aliphatic amines at presence of gaseous H₂ can lead to *N*-(*R*-benzyl)-*N*-dialkylamines. Common catalysts used for such reactions contain platinum group metals (PGM). Search of PGM-free catalysts for these transformations is important task of modern physical chemistry.

The aim of this study was to develop new PGM-free catalyst for reductive amination of *p*-methoxybenzaldehyde with *di-iso*-propylamine. The composite, containing Co metal and N-doped carboneous material, was chosen as promising candidate for this study.

The composite was prepared by pyrolysis Co(II) complex with imidazole deposited on aerosil (highly dispersed SiO₂). The composite contained only metallic Co as crystalline phase, as shown by powder XRD. It was found by transmission electronic microscopy that cobalt nanoparticles had the size of *ca.* 3–10 nm (Fig. 1a). Analysis of the Raman spectral data (Fig. 1b) allowed to conclude that the composite contained graphene-like carboneous species.

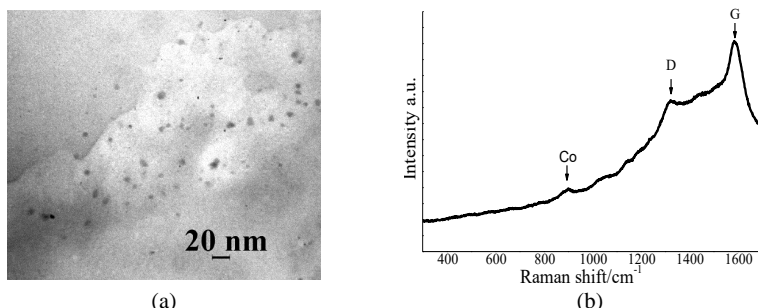


Fig. 1. TEM image of the Co/C/SiO₂ nanocomposite (a) and Raman spectra of the composites (b)

The catalytic activity of the obtained composite was tested in reaction of *p*-methoxybenzaldehyde with *di-iso*-propylamine under H₂ pressure (30 atm, 150 °C). The reaction products were analyzed by ¹H NMR and gas chromatography. It was found that the *N*-(*p*-methoxybenzyl)-*N*-*di-iso*-propylamine formed with *ca.* 88 % yield, while benzylic alcohol was the minor product.

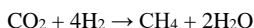
ВПЛИВ ОБРОБКИ НОСІЯ НА КАТАЛІТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ Co-Fe СИСТЕМИ КАТАЛІЗАТОРІВ, НАНЕСЕНОЇ НА УЛЬТРАДИСПЕРСНІ АЛМАЗИ, В РЕАКЦІЇ МЕТАНУВАННЯ CO₂

*Петросова Г. Р.*¹, Дяченко А. Г.¹, Гайдай С. В.¹, Ільницька Г. Д.², Зайцева І. М.²

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
01001, Київ, вул. Володимирська, 64/13, Україна

²Інститут надтвердих матеріалів ім. В. М. Бакуля НАН України, 04074, Київ,
вул. Автозаводська, 2, Україна
hannusik@yahoo.com

Останні десятиліття людство стає все більш зацікавлене у вирішенні екологічних проблем планети. У зниженні кількості вуглекислого газу, наприклад, може допомогти вивчення реакції Сабатьє.



Однак для перебігу такого процесу необхідна присутність каталізатора. Попередні дослідження показали перспективність використання Co-Fe каталізаторів у співвідношенні Co:Fe=93:7 (мас.%), нанесених на поверхню наноалмазів (вміст активної фази становив 20 % від маси носія) [1].

Метою роботи було дослідження впливу обробки вихідного синтетичного алмазу на каталітичні властивості нанесених на нього Co₉₃Fe₇ каталізаторів. Перед нанесенням активної фази нанорозмірний алмаз піддавали: *a* – хімічній обробці (сульфатна кислота + дихромат калію) та *b* – послідовно хімічній та термічній обробці.

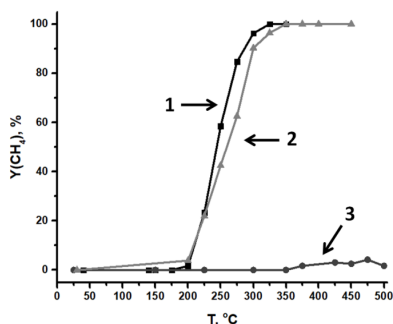


Рис. Температурна залежність виходу метану для каталізаторів:

- 1 – Co₉₃Fe₇/наноалмаз без обробки
- 2 – Co₉₃Fe₇/хімічно та термічно оброблений наноалмаз
- 3 – Co₉₃Fe₇/хімічно оброблений наноалмаз

Результати досліджень каталітичної активності для різних зразків представлені на рисунку. Каталізатор, у якому активна маса нанесена на хімічно оброблений наноалмаз, не проявляє активності у реакції метанування, вихід метану для нього становить лише кілька відсотків за високої температури (крива 3).

Каталізатори, у яких активна маса нанесена на вихідний наноалмаз (крива 1) і алмаз хімічно та термічно оброблений (крива 2) демонструють 100 % вихід метану при температурі 325 та 350 °C відповідно.

Як було раніше показано у роботі [1] масивний каталізатор демонструє 100 % конверсію CO₂ на метан при 325 °C.

Отримані результати показали перспективність використання і подальшого дослідження синтетичних наноалмазів в якості носія для Co-Fe каталізаторів в реакції метанування CO₂, оскільки дають змогу зменшити кількість активної маси каталізатора зі збереженням його ефективності.

1. M. Zhudenko, A. Dyachenko, O. Bieda, S. Gaidai, M. Filonenko and O. Ischenko // ACTA PHYSICA POLONICA A. – 2018. – №4. – Vol.133. – p. 1084-1087.

ДОСЛІДЖЕННЯ ІОННОЇ АСОЦІАЦІЇ БАРВНИКІВ З ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНИМИ РЕЧОВИНАМИ У ВОДНИХ РОЗЧИНАХ

Шаповалов С. А., Пономарьов В. К., Бутенко С. В.

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, Харків, Україна
serghey.a.shapovalov@karazin.ua

Розвиток спектрально-люмінесцентних методів ініціює систематичні дослідження явища асоціації з участю барвників у розчинах. Така асоціація інструментально фіксується при доволі низьких концентраціях частинок 10^{-7} – 10^{-5} моль/л [1, 2]. Системи «органічний барвник + ПАР» є одними з найбільш досліджуваних, оскільки практично не існує такого класу барвників, який би не «випробовувався» у контексті взаємодії з ПАР.

У даній роботі розглянуто асоціацію катіонного барвника (хінальдиновий синій, ХС) з аніонними барвниками (етилеозин, ЕЕ, родамін 200 С, Р200С), а також цих барвників з поверхнево-активними речовинами (катіонною – цетилпіридиній бромід, аніонною – додецилсульфат натрію, ДСН, неіонною – тритон X-100, ТХ). Для вирішення розрахункових завдань залучені методи комп'ютерного моделювання: молекулярно-механічні (ММ+, AMBER) та напівемпіричні квантовохімічні (AM1, PM3).

Визначені оптимальні значення RMS-градієнту (градієнт збіжності двох послідовних ітерацій, ккал/моль). При визначенні оптимальної геометрії структур для систем RMS-градієнт задавався рівним 0,005 та 0,1 у випадках водного боксу. У напівемпіричних методах RMS-градієнт дорівнював 0,1 для вакууму та 1,0 для систем з розчинником. Такі значення обумовлені тим, що при поступовому зменшенні RMS-градієнту зміни повної енергії системи (Е) стають незначними, що як приклади наведено у таблиці.

RMS	Е, ккал/моль		
	P200C (MM+)	P200C+H ₂ O (AMBER)	P200C-EE+H ₂ O (AMBER)
1	42,5	-126,1	-755,5
0,5	42,2	-158,2	-762,1
0,1	41,6	-160,3	-831,7
0,05	41,5	-160,3	-831,7
0,01	41,5	-160,3	-831,7
0,005	41,5	-160,3	-831,7

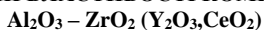
Як показують результати розрахунків і спектрофотометричних вимірювань, ПАР здатні до асоціації з барвниками при концентраціях, які значно нижче за критичну концентрацію міцелоутворення (ККМ). Методами AM1 та PM3 визначена енергетика асоціатів «барвник + ПАР» (значення стандартних ентальпій утворення) для стехіометрії 1:1, яка впливає з даних спектрофотометричних досліджень.

Енергетична вигідність взаємодій між катіоном барвника і неіонним ПАР підтверджуються доволі високими значеннями виграшу ентальпії утворення відповідного асоціату, які суттєво перебільшують статистичну похибку розрахунків, що дорівнює 6 ккал/моль. Наприклад, для асоціату ХС-ДСН цей виграш становить 373 ккал/моль (AM1) або 314 ккал/моль (PM3). Нами також встановлено, що барвник ХС може бути використаний для кількісного визначення ККМ неіонної ТХ.

1. Shapovalov S. A. Cation-anionic association of Organic Dyes in Aqueous Solutions: Structure and Properties of Associates / S. A. Shapovalov // Modern Org. Chem. Res. – 2017. – Vol. 2, № 4. – P. 195 – 203.

2. Shapovalov S. A. Processes of Self-association of Dyes in Solutions / S. A. Shapovalov. – Riga: Academic Publishing of European Union, 2018. – 122 p. - ISBN-13: 978-613-9-82294-2.

ФІЗИКО-МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КОМПЗИТИВ СИСТЕМИ



Смирнова-Замкова М. Ю., Рубан О. К., Биков О. І., Мелак І., Мосіна Т. В., Дуднік О. В.

Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України,

Київ, Україна

smirnovazamkova@ukr.net

В останні роки зростає інтерес до ZTA-композитів, з високим вмістом твердого розчину на основі ZrO_2 , спільно легованого оксидами ітрію і церію. При цьому отримують композити, у яких в жорсткій матриці на основі Al_2O_3 дисперговано частинки твердого розчину на основі ZrO_2 , що характеризуються достатньо високою в'язкістю руйнування.

Для дослідження фізико-механічних властивостей ZTA-композитів методом гідротермального синтезу у лужному середовищі одержано вихідні нанокристалічні порошки двох складів (мас. %): $90 \text{ Al}_2\text{O}_3 - 10 \text{ ZrO}_2 (\text{Y}_2\text{O}_3, \text{CeO}_2)$ (90 AZG) та $58,5 \text{ Al}_2\text{O}_3 - 41,5 \text{ ZrO}_2 (\text{Y}_2\text{O}_3, \text{CeO}_2)$ (58,5 AZG). Для проведення експериментів методом холодного одночасного пресування сформовано зразки, які спечено в повітрі при 1500°C (1,5 год). Відносна щільність зразків після спікання змінювалась від 0,95 до 0,97. У спечених зразках 90 AZG утворились фази T- ZrO_2 та $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, а у зразках 58,5 AZG крім фаз T- ZrO_2 та $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ ідентифіковано сліди M- ZrO_2 .

В композиті 90 AZG сформувалась порувата мікроструктура, яка вміщує дві фази – Al_2O_3 (темна фаза) та твердий розчин на основі ZrO_2 (світла фаза) (рис.). В матриці Al_2O_3 , з розміром зерен до 5 мкм, досить гомогенно розташовані дисперсні частинки твердого розчину на основі ZrO_2 розміром до 1–2 мкм. Однак, поодинокі зерна ZrO_2 можуть досягати розміру до 3–5 мкм (рис.). В композиті 58,5AZG також сформувалась мікроструктура, що вміщує дві фази, але розподіл їх відрізняється від композиту 90AZG. Видно (рис.), що в процесі спікання при 1500°C в композиті 58,5AZG утворились ділянки, розміром до 30 мкм, що вміщують ZrO_2 . Вказані ділянки, по межах яких розташовано скупчення зерен Al_2O_3 , мають округлу і витягнуту форму. На гомогенних ділянках композиту спостерігається певна спрямованість розташування зерен Al_2O_3 . Можна припустити, що в даному випадку певний вплив має «топохімічна пам'ять» кераміки. Композит складу 58,5 AZG відповідає складу евтектики подвійної системи $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$. Цей фактор певним чином впливає на формування мікроструктури вказаного композиту в процесі спікання при 1500°C .

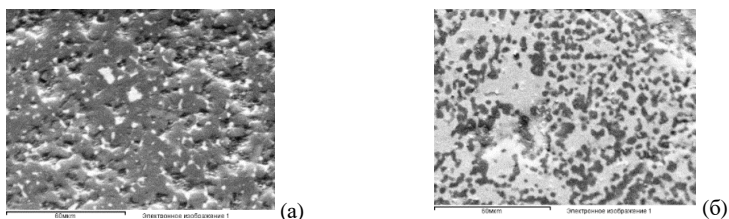


Рис. Мікроструктура ZTA-композитів 90 AZG (а) та 58,5AZG (б)

При дослідженні механічних властивостей ZTA-композитів встановлено, що при збільшенні вмісту твердого розчину на основі ZrO_2 в складі ZTA-композиту знижуються мікротвердість (з 190 МПа до 160 МПа) та твердість по Вікерсу (з 8,3 ГПа до 5,6 ГПа), а K_{1c} підвищується (з 6 до 8 МПа $\text{m}^{0,5}$). Композити характеризуються високою стійкістю до низькотемпературної деградації властивостей (процесу старіння).

Удосконалення процесів консолідації ZTA-композитів при мікроструктурному проектуванні біоінертних матеріалів дозволить досягти необхідного комплексу їх фізико-механічних характеристик.

**KNOEVENAGEL REACTION CATALYZED BY IRON(III)
1,3,5-BENZENETRICARBOXYLATE IN FLOW**

Sotnik S. O.^{1,2}, *Gavrilenko K. S.*^{1,3}, *Kolotilov S. V.*²

¹Enamine Ltd, Kyiv, Ukraine

²L. V. Pisarzhevskii Institute of Physical Chemistry of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine

³National Taras Shevchenko University of Kyiv, Kyiv, Ukraine
sotniksvitlana@ukr.net

C-C coupling reactions play important role in fine and industrial organic synthesis. Knoevenagel reaction – interaction of aldehydes or ketones with active methylene compounds – is one of the ways to form C-C bond. Development of the efficient heterogeneous catalysts for the Knoevenagel reaction is urgent task [1].

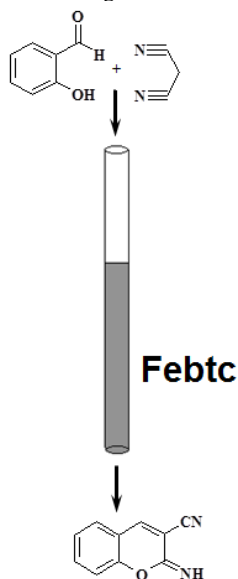


Fig. 1. Reaction of the salicylaldehyde and malononitrile at presence of the Febtc as catalyst in flow

Porous coordination polymers (PCP) with acidic or basic Lewis sites can catalyze Knoevenagel reaction activating carbonyl or active methylene compound, respectively. A new PCP of Fe³⁺ with 1,3,5-benzenetricarboxylate (btc³⁻) [Fe₂(OH)_{0,3}(H₂O)_{1,7}×(btc)_{4/3}]_nCl_{1,7n}·2,8nDMF·1,9nH₂O (hereinafter referred to as Febtc) was tested as catalyst for such transformation. This PCP contains Fe³⁺ ions (Lewis acids) with coordinated H₂O molecules. Such H₂O molecules can be removed upon heating. It was previously shown that Febtc catalyzed reaction of salicylaldehyde and nitromethane at 100 °C and was stable in a batch reactor (catalyst suspension in toluene) [2]. Due to its activity and stability Febtc can be considered as promising heterogeneous catalyst for the Knoevenagel reaction in flow.

Passing the mixture of salicylaldehyde (0,1 M) and malononitrile (0,1 M) solutions in toluene at room temperature during 2 h through a column (40 mm length and 5 mm diameter) filled with Febtc resulted in 100 % conversion of salicylaldehyde. It was shown that only 2-imino-2H-chromen-3-carbonitrile was obtained as a product. Condensation of salicylaldehyde (0,7 M) and nitromethane (8,5 M) was carried out in the same flow reactor leading to 85 % yield of *trans*-nitrovinylphenol. High products yields at room temperature could be explained by a large ratio of the quantities of PCP active sites to reagents. Use of copper(II) 1,3,5-benzenetricarboxylate instead of Febtc in the same column for condensation of salicylaldehyde (0,7 M) and nitromethane (8,5 M) led only to 5 % yield of *trans*-nitrovinylphenol.

1. K. van Beurden, S. de Koning, D. Molendijk, J. van Schijndel, *Green Chem. Let. and Rev.*, 2020, 13:4, 349–364.

2. S. A. Sotnik, S. V. Kolotilov, M. A. Kiskin, Zh. V. Dobrokhotova, K. S. Gavrilenko, V. M. Novotortsev, I. L. Eremenko, V. K. Imshennik, Yu. V. Maksimov, V. V. Pavlishchuk, *Russ. Chem. Bull.*, 2014, 63, 862–869.

МЕТОДИКА ВИГОТОВЛЕННЯ ФОТОЧУТЛИВИХ ГЕТЕРОСТРУКТУР n -SnS₂/ p -InSe, З ВОДНИХ РОЗЧИНІВ СОЛЕЙ SnCl₄·5H₂O і (NH₂)₂CS МЕТОДОМ СПРЕЙ-ПІРОЛІЗУ*Ткачук І. Г.^{1,2}, Орлецький І. Г.³, Ковалюк З. Д.¹*¹Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України, Чернівцьке відділення, Чернівці, 58001, Україна²Буковинський державний медичний університет, Чернівці, Україна³Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, 58012 Чернівці, Україна

ivan.tkachuk.1993@gmail.com

В даний час гетеропереходи на основі тонких плівок є досить цікавими з точки зору виготовлення нових гетероструктур. Тонкі плівки сульфідів олова (SnS, SnS₂, Sn₂S₃) характеризуються різним фазовим складом, який визначає їх основні фізичні властивості. Плівки дисульфиду олова SnS₂ з шириною забороненої зони $E_g \approx 2,45$ eV придатні для виготовлення фронтального шару фотоприймачів на основі гетеропереходів. Плівка SnS₂ містить хімічні елементи Sn і S, які широко розповсюджені, мають невисоку собівартість і малотоксичні. Моноселенід індію InSe за значенням ширини забороненої зони $E_g = 1.2$ eV відноситься до придатних матеріалів для фотоелектричного перетворення енергії в наземних умовах. Шарувата структура кристалів InSe зі слабким Ван-дер-Ваальсівським зв'язком обумовлює зручність у виготовленні підкладок для гетероструктур і позбавляє операцій різання злитків на пластини та їх механічної і хімічної обробки. З використанням селеніду індію створені фоточутливі і діодні структури різних типів. Властивості гетероконтакту n -SnS₂/ p -InSe в значній мірі залежать від методу виготовлення. Застосування спрею-піролізу плівок SnS₂ позбавляє необхідності вирощування об'ємного матеріалу SnS₂. Метод супроводжується термічними процесами розкладу хлоридних солей на поверхні p -InSe із можливою зміною властивостей поверхні підкладок, що відображається на властивостях утвореного гетеропереходу n -SnS₂/ p -InSe.

При виготовленні плівок дисульфиду олова віддають перевагу низьковартнісним невакуумним методам спрею-піролізу хімічних розчинів солей Sn і S, спін-коутінгу органічних розчинників, CBD-методу. Дані методи забезпечують необхідні режими осадження плівок сульфідів з потрібними фізичними властивостями.

Для одержання структур n -SnS₂/ p -InSe використовували вирощені методом Бріджмена кристали селеніду індію p -типу провідності. Для діркової електропровідності здійснювалося легування домішкою Cd (0.1 % за масою). За даними дослідження ефекту Холла концентрація носіїв заряду становила $p \approx 10^{14}$ cm⁻³ і їх рухливість перпендикулярно до вісі симетрії С в InSe при температурі 295 К дорівнювала $\mu_{pH} \approx 50$ cm²/(V·s).

Гетероструктури n -SnS₂/ p -InSe виготовлялися нанесенням плівок SnS₂ товщиною $\sim 0.3 - 0.4$ μ m на поверхню нагрітих до температури $T_s = 350$ °C підкладок p -InSe методом спрею-піролізу за атмосферного тиску 0.1 М водних розчинів солей tin(IV) chloride pentahydrate SnCl₄·5H₂O і thiourea (NH₂)₂CS. При піролізі формується бінарна сполука дисульфиду олова SnS₂ n -типу з електропровідністю $\sigma \approx 3 \cdot 10^{-1}$ $\Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$ та шириною забороненої зони $E_g = 2.4$ eV. З врахуванням невисокої рухливості електронів у полікристалічних плівках $\mu = 2.43 \cdot 10^{-3}$ cm²·V⁻¹·s⁻¹ концентрація вільних носіїв заряду у плівках SnS₂ становить $n \approx 2.7 \cdot 10^{17}$ cm⁻³.

ВИВЧЕННЯ СОРБЦІЇ ФЕНОЛУ НА ПОВЕРХНІ ГІБРИДНИХ МСМ-41 КРЕМНЕЗЕМІВ

Трофимчук І. М., Белякова Л. О.

Інститут хімії поверхні ім.О.О. Чуйка Національної академії наук України
вул. Генерала Наумова, 17, Київ, 03164, Україна
trofymchuk_iryana@ukr.net

Ароматичні сполуки негативно впливають на стан навколишнього середовища і здоров'я людини, оскільки вони є легкозаймистими, токсичними, канцерогенними та мутагенними речовинами. Сорбційне вилучення ароматичних речовин є одним з найбільш ефективних методів очистки води. Спрямована функціоналізація поверхні твердих носіїв широко використовується для покращення їх сорбційних властивостей. Для функціоналізації кремнеземів особливо цікавим є β -циклодекстрин (β -ЦД) – циклічний олігосахарид, здатний утворювати комплекси включення типу «хазяїн–гість» зі сполуками відповідної хімічної та геометричної структури.

У даній роботі шляхом гідролітичної золь-гель конденсації структуроутворюючого та β -ЦД-вмісного силанів у присутності йонного темплату синтезовано гібридні МСМ-41 кремнеземи, що містять різну кількість хімічно закріплених амінопропільних та олігосахаридних груп (Таблиця). Хімічна будова та параметри пористої структури синтезованих кремнеземів установлені за допомогою ІЧ спектроскопії, хімічного аналізу, низькотемпературної адсорбції-десорбції азоту, рентгенівської дифракції, трансмісійної електронної мікроскопії, фотонної кореляційної спектроскопії.

Таблиця. Хімічна будова і структурні характеристики МСМ-41 кремнеземів

Кремнезем	Вміст поверхневих груп		СВЕТ, м ² ·г ⁻¹	V _t , см ³ ·г ⁻¹	D, нм
	[NH ₂], мкмоль·м ⁻²	[β -ЦД], мкмоль·м ⁻²			
МСМ-41	-	-	995	0,75	3,7; 5,1
NH ₂ -МСМ-41	0,84	-	523	0,86	3,7; 5,1
β -ЦД-МСМ-41-1	0,06	0,02	812	1,06	3,9; 5,1
β -ЦД-МСМ-41-2	0,21	0,14	512	0,60	2,5; 3,3; 5,1
β -ЦД-МСМ-41-3	0,26	0,21	457	0,69	2,4; 3,1; 4,8

Ефективність синтезованих гібридних кремнеземів у процесах сорбції ароматичних сполук з водних розчинів вивчено на прикладі фенолу в залежності від тривалості контакту та його рівноважної концентрації. Щоб з'ясувати роль поверхневих β -ЦД-вмісних груп у вилученні ароматичних сполук з водних розчинів, також було вивчено сорбцію фенолу на поверхні гідроксильованого МСМ-41 та аміновмісного NH₂-МСМ-41 кремнеземів. Показано, що хімічне закріплення олігосахаридних груп на поверхні МСМ-41 кремнеземів приводить до зростання сорбції фенолу з водних розчинів у порівнянні з МСМ-41і NH₂-МСМ-41 кремнеземами. Зі збільшенням вмісту поверхневих β -ЦД-вмісних груп гібридних МСМ-41 кремнеземів також спостерігається зростання кількості сорбованого фенолу. Експериментальні кінетичні криві сорбції були порівняні з теоретичними моделями Лагергрена та Хо-МакКея для процесів псевдопершого та псевдо-другого порядків. Рівноважну сорбцію фенолу було проаналізовано за допомогою моделей Ленгмюра та Фрейндліха. Одержані результати можуть бути корисними при створенні селективних сорбентів для вилучення ароматичних сполук з водних розчинів.

POLYMERIC NANOCOMPOSITES BASED ON POLYMETHACRYLIC ACID AND POLYANILINE*Khamar O. O., Dutka V. S., Kovalskiy Ya. P.*Ivan Franko National University of Lviv, str. Cyril and Methodius 6,
Lviv 79005, Ukraine
oleh.khamar@lnu.edu.ua

Composites containing a film-forming polymer, such as polymethacrylic acid (PMAA) and other vinyl polymers, are often used to produce a variety of sensors and biosensors, and emeraldine salts of polyaniline (PANI) and their derivatives are used as an electrically conductive component. Sensors and biosensors developed on such composites can be successfully used for the analytical determination of gases such as ammonia, hydrogen sulfide, sulfur dioxide and others, as well as amino acids and sulfur-containing compounds. The electrical conductivity of composites based on PANI and PMAA was synthesized and investigated. The obtained composites are characterized by good film-forming properties and electrical conductivity.

Physicochemical properties of the obtained composites with different composition of PMAA and PANI were studied. Thermo gravimetric experiments of PMAA and PMAA and PANI composites were performed. The activation energies of the thermal destruction process of the studied composites were found. The increase in the content of PANI leads to a sharp increase in electrical conductivity in the composite PANI-PMAA. The study of the morphology of composites shows that at 10 % of the PANI content, electrically conductive polymer chains are formed, which provide electrically conductive properties. Further increase in PANI leads to a sharp increase in the electrical conductivity of composites. The study of the dependence of the resistance of the obtained composites on temperature allowed to determine the activation energy of charge transfer (ϵ). Numerical values of ϵ indicate that the resulting composites are typical semiconductors. The obtained composites have good film-forming properties, which allows to obtain electrically conductive films on different surfaces.

Quantum chemical modeling of nanocomposites was performed by the semi-empirical method PM7 of the MOPAC2016 program and the Winmstar graphical interface. The study showed that, depending on the conformational state between PMAA and PANI macromolecules, intermolecular hydrogen bonds with different energies are formed (Fig.), which affect the physicochemical properties of composites.

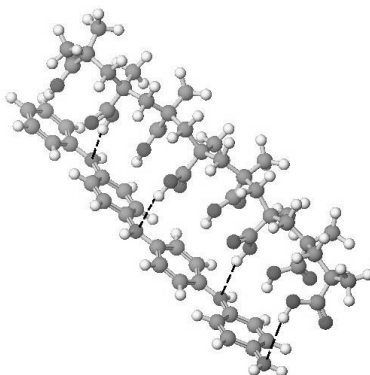


Fig. Formation of intermolecular hydrogen bonds between PMAA and PANI macromolecules

INVESTIGATION OF TITANIUM DIOXIDE DOPED BY CARBON AND SULFUR AS PHOTOCATALYST

*Shapovalova M.*¹, Khalyavka T.¹, Camyshan S. V.¹, Khyzhun O.², Shcherban N.³, Korzhak A.³, Permyakov V.⁴

¹Institute for Sorption and Problems of Endoecology, NAS of Ukraine,
13 General Naumov Str., Kyiv 03164, Ukraine

²Institute for Problems in Materials Science, NAS of Ukraine,
3 Krzhizhanovsky str., Kyiv 03142, Ukraine

³L. V. Pisarzhevsky Institute of Physical Chemistry, NAS of Ukraine,
31 Prospekt Nauky, Kyiv 03028, Ukraine

⁴Institute of Geological Sciences NAS of Ukraine,
O. Gonchar Str., 55-b, Kyiv, Ukraine, 01054
bondarenko_maryna@ukr.net

The photocatalysts based on TiO₂ doped with non-metal (carbon and sulfur) has been obtained using modified sol-gel method and mechanochemical treatment. Analysis of SEM-images of the samples shows that they consist of roundish and fragmented agglomerates in the range of 5–30 μm which consist of the particles of 14 nm in size. Modification with carbon leads to an increase in particle size: as the amount of carbon increases from 1 to 21 mass. %, the particle size increases from 14 to 19 nm. Sulfur additives inhibit grain growth of TiO₂ and form the particles of 9–10 nm in S/TiO₂ composites. Simultaneous modification of TiO₂ with carbon and sulfur leads to the formation of particles with a size of 7–8 nm.

It was found that additives of carbon into the binary composites lead to anatase formation. XRD show the reflexes of anatase and rutile phases regardless of sulfur concentration in S/TiO₂. The addition of C (1.5 mass. %) and S (from 0.6 to 9 mass. %) into ternary composites practically does not influence on the TiO₂, but an increase in sulfur amount (12 and 15 mass. %) in the samples leads to appearance of rutile reflexes. Thus, an increase of the sulfur amount in the ternary samples leads to the formation of rutile structure. During doping and co-doping of TiO₂ with carbon and sulfur using mechanochemical treatment, the formation of new phases does not occur.

All composites show the presence of a hysteresis loop which is the evidence for mesoporous structure of the powders. The modification of TiO₂ by carbon and sulfur leads to increase of specific surface area (of about 3.3 times for S/TiO₂ and about 4.7 times for C/S/TiO₂), average pore volume and decrease of radius pore volume compared with TiO₂.

It was identified C–C, C–O, O–C=O, C–H i –CH₂ bonds on the surface of C/TiO₂, S/TiO₂ and C/S/TiO₂ samples and also S=O, S–O on the surface of S/TiO₂ and C/S/TiO₂ powders which obtained by sol-gel method and C=O bonds on the surface of C/TiO₂, S/TiO₂ and C/S/TiO₂ samples and S²⁻ and -NH₂ on the surface of S/TiO₂ and C/S/TiO₂ powders which obtained by mechanochemical treatment.

Absorption spectra of nanocomposites showed a bathochromic shift as compared with the absorption band of pure TiO₂ and band gap narrowing which explained by rutile formation.

Nanocomposite samples showed higher adsorption and photocatalytic activity compare with pure TiO₂ and P25 (in the presence of the best samples in 1 hour there is a destruction of 99 % of the dye), which is associated with a decrease in particle size, increase in specific surface area and narrowing of the band gap. Correlation of photocatalytic activity with adsorption capacity indicates that photocatalytic transformations occur on the surface of the powder. It was found that samples of TiO₂ modified with C and S show photocatalytic activity under visible irradiation in the destruction reaction of Safranin T, which is explained by their sensitization to visible light by the adsorbed dye. It is shown, that TiO₂ modified with activated carbon shows higher photocatalytic activity in photocatalytic hydrogen evolution from alcohol-aqueous solutions compared to pure TiO₂ and P25.

ДОСЛІДЖЕННЯ НАНОПОРОШКІВ ОКСИДНИХ ФАЗ ЗІ СТРУКТУРОЮ ТИПУ ПЕРОВСКІТУ

*Широков О. В.*¹, Лобунець Т. Ф.¹, Чудінович О. В.^{1,2}, Рагуля А. В.¹¹Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України, Київ, Україна²Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», Київ, Україна
shyrovkovav@gmail.com

Нанопорошки складних оксидних фаз $\text{LnLn}'\text{O}_3$ ($\text{Ln}, \text{Ln}' = \text{PЗЕ}$) зі структурою типу перовскіту отримано термічним розкладанням прекурсорів, синтезованих методом гетерогенного осадження. Кінцева температура розкладу обиралася із даних термогравіметричного аналізу та для синтезованих зразків становила 840°C . Однак швидкість охолодження зразків може мати вплив на їх властивості – порову структуру, розмір агломератів, агрегатів, частинок та фазовий склад. Так, при термічному розкладанні прекурсорів (5 об. % сечовини, питома поверхня $S_{\text{вст}} = 20,4 \text{ м}^2/\text{г}$, середній діаметр мезопор $D_{\text{ср, мез}} = 4,2 \text{ нм}$), незалежно від умов охолодження, утворюються практично однакова порова будова зразків (зразки 2, 3 з питомою поверхнею 16,2 і $17,4 \text{ м}^2/\text{г}$ та середньому діаметрі мезопор 13,2 і 14,9 нм). При розкладанні прекурсорів (20 об. % сечовини), які мають велике значення питомої поверхні $172,2 \text{ м}^2/\text{г}$ при середньому діаметрі мезопор 3,8 нм, утворюються нанопорошки з практично однаковим диференційним розподілом об'ємів мезопор за розмірами (зразки 5, 6), але різним за їх розподілом поверхні. Різке охолодження сприяє утворенню більш тонкої порової будови зразка (6). При близьких значеннях як питомої поверхні 18,5 і $16,4 \text{ м}^2/\text{г}$, так і об'єму мезопор $V_{\text{мез}} = 0,08$ і $0,07 \text{ см}^3/\text{г}$, середній діаметр мезопор складає 16,7 і 15,6 нм.

Згідно РФА, не залежно від вмісту сечовини у вихідному розчині при синтезі прекурсорів, формування однофазного нанопорошку з фазою типу перовскіту відбувається при поступовому охолодженні.

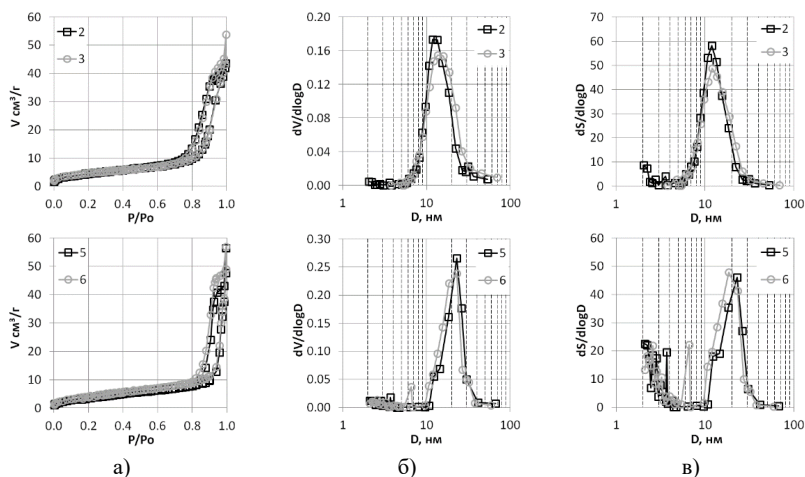


Рис. Ізотерми сорбції азоту (а) та диференційні розподілення об'ємів (б) та поверхонь (в) мезопор за розмірами нанопорошків, отриманих розкладанням прекурсорів, синтезованих при 80°C та вмісту сечовини 5 та 20 об. % при тривалому (2, 5) та різкому (3, 6) охолодженні

**КЕРАМІКА ДЛЯ ТЕРМОБАР'ЄРНИХ ПОКРИТТІВ НА ОСНОВІ ZrO_2 ,
КОМПЛЕКСНО ЛЕГОВАНОГО ОКСИДАМИ РЗЕ ЦЕРІЄВОЇ ПІДГРУПИ***Шмибельський В. Б., Рубан О. К., Дуднік О. В.*Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України, Київ, Україна
shmybelsky95@gmail.com

Підвищення коефіцієнту корисної дії газотурбінних двигунів пов'язано зі збільшенням їх робочих температур, що в свою чергу обумовлює необхідність підвищення теплостійкості елементів гарячого тракту двигуна – робочих і соплових лопаток газових турбін. Температура поверхні лопатки знижується шляхом осадження на її поверхні термобар'єрних покриттів (ТБП) з верхнім оксидним керамічним шаром. Традиційний матеріал керамічного шару ТБП – твердий розчин на основі ZrO_2 , стабілізованого (6–8 мас.%) Y_2O_3 наближається до температурної межі свого застосування (1200 °С). Перспективний напрямок розробки новітніх матеріалів – створення середньоентропійної оксидної кераміки у вигляді твердих розчинів, що містить три або більше основних компоненти, яка характеризується більш низькою теплопровідністю, більш високою твердістю і підвищеною стійкістю в процесі експлуатації, ніж традиційні матеріали.

Мета роботи: дослідження можливості використання для ТБП, нанесеного методом електронно-променевого напилення за один технологічний цикл, кераміки на основі ZrO_2 , комплексно легovanого сумішшю оксидів РЗЕ.

Для дослідження обрано концентрат РЗЕ на основі оксиду церію, складом (мас. %) CeO_2 – 62,4; La_2O_3 – 13,5; Nd_2O_3 – 10,9; Pr_6O_{11} – 3,9; Sm_2O_3 – 0,92; Gd_2O_3 – 1,2; Eu_2O_3 – 0,24; ZrO_2 – 2,66; Al_2O_3 – 1,2; SiO_2 – 1,7; загальний вміст інших оксидів – 1,38 (легкий концентрат, ЛК) та порошок діоксиду цирконію моноклінної модифікації ($M-ZrO_2$), чистий, марки ЦРО-1 (Китай).

Методи дослідження: рентгенофазовий аналіз (РФА), оптична і електронна мікроскопія, визначення мікротвердості.

Для нанесення покриттів виготовлено мішені, фазовий склад яких після спікання при 1350 °С – суміш моноклінної фази ZrO_2 ($M-ZrO_2$) і концентрату оксидів РЗЕ. Також ідентифіковано сліди $T-ZrO_2$ (тетрагонального твердого розчину на основі ZrO_2). На спинці і вхідний кромці лопаток нанесено покриття товщиною 85 мкм, а в коритці лопатки – 70 мкм. За результатами РФА встановлено, що фазовий склад покриття складається з суміші кубічного твердого розчину типу флюориту на основі ZrO_2 ($F-ZrO_2$) та $M-ZrO_2$. Вміст $M-ZrO_2$ становив приблизно 20 %.

Результати мікрорентгеноспектрального аналізу показали, що вміст церію, лантану і неодиму зменшується до досягнення товщини покриття 40 мкм. Швидкість змінення вмісту цих компонентів зменшується в ряду церій (7,84 мас. %–1,87 мас. %) → лантан (4,91 мас. %–1,32 мас. %) → неодим (1,63 мас. %–0,45 мас. %). При цьому вміст цирконію спочатку несуттєво зменшується (55,9 мас. %–53,21 мас. %), а потім практично не змінюється. Особливості мікроструктури покриття визначають градієнт розподілення мікротвердості по його висоті. Визначено, що мікротвердість в послідовності низ → середина → верх покриття на спинці змінюється в межах 2696 МПа → 2273 МПа → 1354 МПа, а в кориті 6110 МПа → 3675 МПа → 2860 МПа. Для стандартного покриття YSZ, нанесеного в аналогічних умовах, мікротвердість на спинці становила 3884 МПа, а в кориті – 6052 МПа, при цьому градієнт мікротвердості по перетину покриття відсутній.

Удосконалення процесів нанесення покриття методом електронно-променевого напилення призведе до створення середньоентропійного керамічного шару ТБП з необхідним комплексом фізико-технічних характеристик для використання за умов вище 1300 °С.

**CHEMICAL ENGINEERING /
ХІМІЧНА ІНЖЕНЕРІЯ**

ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ СИНИЛЬНОЙ КИСЛОТЫ*Авина С. И.,* Гринь Г. И.

Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт»,
Харьков, Украина
svetlanaavina@gmail.com

На сегодняшний день основным способом производства синильной кислоты (HCN) является каталитический синтез метана, аммиака и кислорода воздуха на платиноидном катализаторе с последующей ректификацией.

Синильная кислота может быть стабильна только в чистом виде. Под влиянием примесей таких как: влага, аммиак, цианистые соли и другие вещества она может измениться с образованием полимера.

Полимер синильной кислоты представляет собой черную углеобразную массу и имеет формулу $H_nC_nN_n$. Известно три продукта полимеризации синильной кислоты димер, тример и тетрамер. Полимеризация синильной кислоты в щелочной среде может быть описана следующим механизмом:

- а) взаимодействие синильной кислоты с катализатором на основе металлов платиновой группы с образованием цианид-аниона,
- б) димеризация синильной кислоты с образованием иминоацетонитрила,
- в) присоединение цианид-аниона к димерной синильной кислоте.

Полимеризация происходит с большой скоростью и носит взрывной характер, в результате возможен разрыв технологического оборудования получения синильной кислоты, а также загрязнение готового продукта.

В производстве синильной кислоты после контактного отделения предусмотрена стадия очистки цианистого водорода от примесей, а именно аммиака, что дает возможность избежать полимеризации на дальнейших этапах получения синильной кислоты. Даже пары воды в количестве до 4 % масс. могут быть катализатором начала полимеризации, что приведет к потемнению готового продукта и остановке всей технологической линии производства.

Полимеры синильной кислоты могут использоваться как минеральное удобрение, стабилизатор роста растений, в металлообработке и т.д. Также как дополнительный источник цианистого водорода, его разложение происходит при температуре 800 °С – 900 °С.

Хотя в мире не так много предприятий по производству синильной кислоты, проблема полимеризации синильной кислоты на сегодня является актуальной и до конца не изученной.

Существует несколько путей решения этой проблемы: во-первых на производстве добавляют стабилизаторы синильной кислоты, такие как растворы неорганических и органических кислот и щелочей. Во-вторых, распределение потоков синильной кислоты по ректификационной колонне, чтоб не было застоев. В-третьих, проводить процесс получения цианистого натрия без процесса ректификации синильной кислоты, а именно прямой абсорбцией цианистого водорода гидроксидом натрия.

До недавнего времени на азотно-туковых комбинатах стран СНГ использовали фосфорную кислоту в качестве стабилизатора. Однако на сегодня ситуация изменилась и предприятия перешли на раствор уксусной кислоты с концентрацией до 0,04 % масс. Использование такого стабилизатора дает автономность предприятию («НОВАИ АЗОТ», Узбекистан, «РУСТАВИ АЗОТ», Грузия). Также на предприятиях процесс получения цианистого натрия происходит с помощью прямой абсорбции контактного газа (Казахстан, Россия).

SYNTHESIS OF ALUMINIUM PHOSPHATES BY CHEMICAL PRECIPITATION IN AQUEOUS SOLUTIONS VARYING ACIDITY AND COMPONENT MOLE RATIO

Aksiutina K. I., Dubenko A. V., Nikolenko M. V.

Ukrainian State University of Chemical Technology, Dnipro, Ukraine
katryn.dnepr45@gmail.com

Food additive E541 is a chemically pure aluminum phosphate, which is used as an emulsifier, stabilizer, leavening agent, acidity regulator, etc. Most often, this food additive is used in confectionery and for baking, because aluminophosphate reacts with the product elements. It leads to the formation of carbon dioxide, which provides a lush structure of the finished product. Aluminum phosphate is used in the production of some types of yogurt, sausages and fish semi-finished products. Also, the use of additive E541 is very suitable for the production of processed cheeses. This food additive gives plasticity and elasticity to the finished product. Aluminum phosphate is a very good emulsifier using to improve the consistency of products containing fats and water.

Unfortunately, there are no deposits of high-quality phosphorus raw materials in Ukraine, and therefore E541 is not produced by Ukrainian enterprises. The food industry must import food phosphates from Belarus, Russia and China. To solve this problem, it is necessary to look for an easier way to get this supplement in our country.

A known method to obtain the chemically pure aluminum phosphates is its chemical precipitation using high-purity orthophosphate acid and chemically pure aluminum salt.

Based on a critical analysis of the scientific and technical literature, it was assumed that the precipitate composition primarily depends on such synthesis conditions as the pH of the solution and a mol (or a mass) ratio of aluminum and phosphate in the reaction mixtures.

Therefore, the aim of our work is to research the chemical precipitation processes of aluminum phosphates from aqueous solutions and to determine the optimal parameters of the precipitation process. As such parameters were used acidity and molar ratio of Al: P. The results of the research will allow to choose the appropriate method of aluminum phosphate synthesis, will help to avoid the dependence of the purchase of this additive from imported manufacturers, which, in turn, will reduce the cost of finished products.

To study the regularities of the precipitation process of aluminum phosphates, the synthesis of salts was carried out by varying the acidity of solutions (pH) from 3 to 11 and at different molar ratios of Al: P, which varied in the range of 0.5–1.6. To ensure the crystal structure during the aging of the precipitate in the mother liquor, aqueous suspensions with the precipitate were divided into several parts, and each of which was kept under isothermal conditions at certain temperatures (30, 50, 90, 150 and 250 °C) during 6 hours in a Teflon reactor RVD-200 with tightly closed lid. After cooling, the precipitate was filtered off under vacuum and dried in an oven at 100–110 °C. The phase composition of the precipitates was studied by X-ray diffraction.

Analysis of the obtained diffractograms allowed us to draw conclusions about the presence of the main forms of the obtained aluminum phosphates. It is also concluded that with the aging of precipitates, its phase transformation into less soluble forms of phosphates is possible. It has been experimentally proved, it is necessary to control the time of crystallization and settling (aging) of sediments in addition to pH and the molar ratio of Al:P in solution in the synthesis of salts.

The conducted experimental researches confirm our theoretical predictions.

ВПЛИВ ТИПУ АКТИВАЦІЇ НА ПОРИСТІСТЬ ТА СОРБЦІЙНО-МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ СОРБЕНТІВ З КОМПОЗИЦІЙНОЇ СИРОВИНИ

*Бован Л. А.*¹, *Циба М. М.*², *Шендрік Т. Г.*¹

¹Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАНУ, Київ, Україна

²Інститут сорбції і проблем ендоекології НАНУ, Київ, Україна
shendriktg@gmail.com

Метою роботи було порівняння пористої структури та сорбційно-механічних характеристик поруватих вуглецевих матеріалів (ПМВ), одержаних різними методами активації – лужною (КОН) та паровою (H₂O). Вихідною сировиною були сумішеві карбонізати на основі довгополум'яного (Д) та газового (Г) вугілля і побічних продуктів коксохімії (полімерів, фусів, кубового залишку (КЗ), смоли та кислоти смолки). Встановлено, що додаток рідких коксохімічних продуктів підвищує реакційну здатність сировини та суттєво змінює карбонізований (при 500–750 °С) залишок [1]. Перспективними добавками при складанні композиційної сировини виявились три види продуктів КХЗ, як от смола, кубовий залишок і кисла смолка, а з вугільних ресурсів перспективною сировиною – вугілля марки Д.

В результаті активації сумішевих карбонізаторів було встановлено, що лужна активація дозволяє при виході ПМВ 37–45 % розвинути поверхню до 900–1100 м²/г незалежно від типу відходу. Парова активація при розвинутій питомій поверхні до 600–900 м²/г та суттєво вищому виході ПМВ (до 80 %) дозволяла зберегти підвищену міцність матеріалу (ММ – 75–80 %). Сорбенти обох типів активації є переважно мікропоруватими матеріалами (рисунок), які за властивостями наближаються до молекулярних сит.

За виходом та механічною міцністю ПМВ парової активації (А(Д-КХЗ)_{H₂O}) вигідно відрізняються від сорбентів лужної активації, де ММ не перевищує ~ 30 %. За сорбентами лужної активації (А(Д-КХЗ)_{КОН}) залишається більш висока питома поверхня (~1000 м²/г), висока ємність (до 50 % від загального об'єму) ультра мікропор (~1 нм) та вірогідна висока сорбційна здатність у водному середовищі. Міцні ПМВ парової активації будуть також перспективними в процесі очищення газових середовищ.

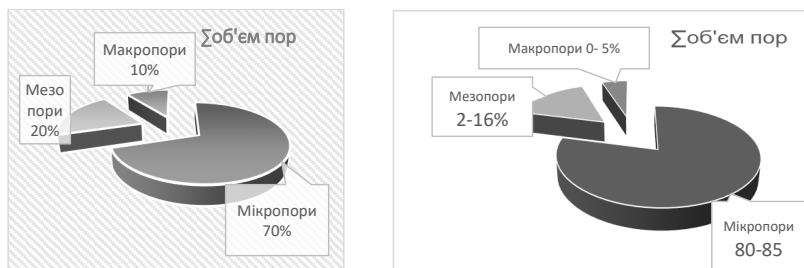


Рис. Класифікація пор сорбентів, одержаних лужною (ліворуч) та паровою (праворуч) активацією сумішевих карбонізаторів

1. Shendrik T.G., Shevkoptyas V.M., Saberova V.O. Coke chemical waste usage at joint conversion with coal into durable carbon sorbents // 1st Ukr.-Polish Workshop "Improving the efficiency and environmental performance of the combustion, gasification and thermochemical conversion of solid fuels", Abstr. of the reports, Kyiv, 2017, pp. 43-45.

СИНТЕЗ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ КЕРАМІЧНИХ МАТЕРІАЛІВ

Бондарєва А. І., Тобілко В. Ю., Корнілович Б. Ю.

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені
Гіорія Сікорського», Київ, Україна

a.i.bondarieva@gmail.com

Створення нових функціональних матеріалів з високою питомою поверхнею та пористою гетероструктурою є перспективним напрямком сучасної супрамолекулярної хімії. Застосування при синтезі шаруватих силікатів дозволяє одержувати поруваті композиційні матеріали з унікальними структурно-сорбційними характеристиками.

В даній роботі було синтезовано керамічні матеріали на основі природного глинистого мінералу монтморилоніту (ММТ) Черкаського родовища (Україна). В якості джерела кремнезему використовували тетраетоксисилан (ТЕОС), а темплату – катіонну поверхнево-активну речовину (НДТМА). Попередньо очищений та підготовлений монтморилоніт диспергували у водному середовищі для утворення стійкої тонкодисперсної суспензії. Далі, за умови постійного перемішування, до отриманої системи послідовно вносили золь кремнезему та НДТМА у різних масових співвідношеннях. Для видалення темплату висушені зразки термічно обробляли впродовж 3 годин при 500 °С.

Для дослідження питомої поверхні отриманих матеріалів використовували метод низькотемпературної адсорбції азоту, а розрахунки проводили за методом Брунауера, Еммета та Теллера (БЕТ). На рис. 1 представлені ізотерми адсорбції/десорбції азоту на вихідному монтморилоніті (а) та модифікованих зразках (б).

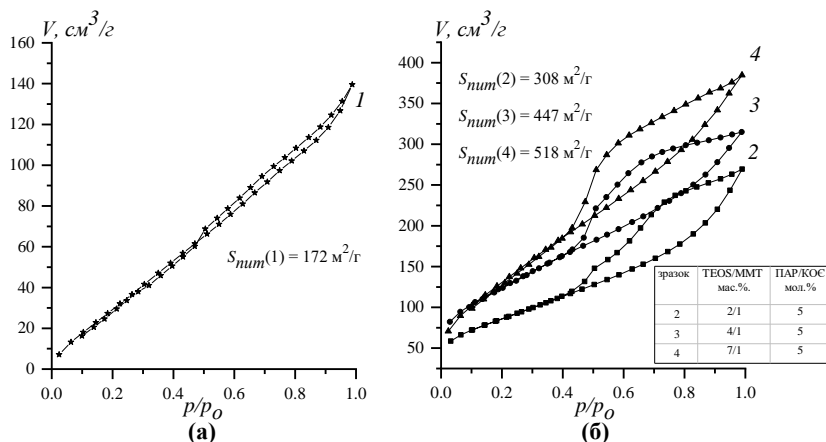


Рис. 1. Ізотерми адсорбції/десорбції азоту на вихідному (а) та модифікованому (б) монтморилоніті

Отримані експериментальні дані вказують на те, що синтезовані керамічні матеріали відрізняються розвинутою питомою поверхнею, величина якої в 1,5–3 рази перевищує таку для вихідного монтморилоніту. Таким чином, одержані зразки можна використовувати в якості неорганічних матриць для одержання селективних адсорбентів, каталізаторів, сенсорів тощо.

MODELING OF DEACTIVATION SYSTEM FOR DIMETOATE

Vasylenko V., Sidorenko M., Mickevičius S.

Vytautas Magnus University, Kaunas, Lithuania

volodymyr.vasylenko@vdu.lt

The world community has been paying close attention to the phasing out of obsolete pesticides since the late 1990s. Thus, in the EU, the use of organochlorine pesticides is almost completely stopped, but the widespread use of organophosphorus remains a problem. Plant protection products based on dimethoate, glyphosate, chlorpyrifos, pyrimiphos-methyl (aktelik) and others are widely used in the European Union.

Based on existing systems for the deactivation of organophosphates [1], studies of their effectiveness in relation to the destruction of dimethoate have been carried out. The tests were carried out using the HPLC method.

The results of research confirm previous studies on the positive effect of micellar systems and α -nucleophiles on the deactivation of organophosphorus compounds.

The proposed composition disinfects a system contaminated with dimethoate residues within two hours from a level of several thousand ppm to the level of the quantification limit. (Table 1).

Table 1. Averaged data of dimethoate decontamination

Sample	m, mg	S_{sm}	S_{av}	RSD, %	C, ppm
Standard	14,00	5066019	5077335	0,32	-
	7,00	5088651			
Rinsing water	10013,00	14211	14224	0,13	2765
	10013,00	14237			
60 minutes	10484,20	214	217	1,74	42
	10484,20	220			
120 minutes	15031,30	72	71	1,28	14
	15031,30	72			

There was no significant difference in the kinetics of reactions when changing the surfactant from cetylpyridinium chloride to sodium lauryl sulfate in the same concentrations and in the presence of ethanol as a defoamer (5 ml/100 ml) (Fig. 1).

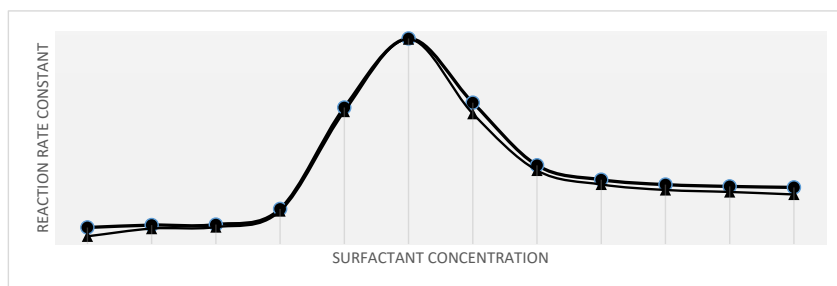


Fig. 1. Graph of the dependence of the reaction constant of the first order on the concentration of surfactants

1. Vakhitova L. N. Kinetics of the oxidation of methyl phenyl sulfide by eroxoborate anions / L. N. Vakhitova, N. V. Lakhtarenko, A. F. Popov // Theoretical and Experimental Chemistry. – 2015. – Vol. 51, № 5. – P. 297-302.

ПРИМЕНЕНИЕ ДЕКОРИРОВАННОГО СТЕКЛА В АРХИТЕКТУРЕ И СТРОИТЕЛЬСТВЕ

Ветвицкая С. А., Брагина Л. Л.

Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт»,
Харьков, Украина
gabriell.himik@gmail.com

Необходимость энерго- и материалосбережения в области современной архитектуры и строительства обусловили необходимость поиска или создания новых технологий декорирования стекла как элемента дизайна в строительстве. Это определяет актуальность данной научно-исследовательской работы, цель которой составила разработку метода декорирования стекла в архитектурно-строительном направлении.

Цель данной работы – выбор наиболее технологичного и экономичного способа обработки поверхности декорируемого стекла, предназначенного для использования в архитектуре и строительстве. Для достижения этой цели были поставлены следующие задачи: провести детальный анализ научно-технической отечественной и зарубежной литературы по вопросам истории декорирования стеклоизделий, современного состояния их производства и применения, составов стекол дизайнерского назначения и направлений в архитектурном дизайне, а также сравнить существующие методы декоративной обработки стекла.

Сравнение известных способов обработки стеклоизделий: механических, термических, химических, нанесения тонких слоев различных материалов, – свидетельствует, что почти каждый из них не является совершенным. С позиции уменьшения энергозатрат, одновременном достижении декоративных характеристик, важных эксплуатационных свойств и простоты технологии оптимальным является использование термического способа, а именно моллирования. Также после моллирования, когда стекло уже приобрело объемную форму, его можно модифицировать нанесением тонких слоев или обрабатывать химической протравой. Применение этого метода может привести к исключению механической обработки, что обусловит уменьшение энергозатрат, а также предоставит стеклоизделий нужную форму и создать необычные декоративные светоотражающие эффекты.

Реализация такого способа декоративной отделки стеклянных элементов потребовала осуществления расчетов температурного режима их отжига. Проведением следующих экспериментальных отжигов с разным количеством выдержек при постоянном общем времени спекания и использованием различных огнеупорных элементов для предоставления объемного рельефа удалось усовершенствовать один из распространенных способов декоративной обработки стекла для архитектурно-строительной отрасли. Расширение спектра декоративных эффектов при осуществлении разработанного способа происходит за счет того, что как фрагменты композиции используются различные материалы, которые можно размещать в любой последовательности и вариациях.

Таким образом, стекло имеет чрезвычайно широкое и разнообразное применение в различных сферах, особенно архитектурно-строительной отрасли. Сочетание высокого уровня его декоративно-прочностных свойств с новейшими материаловедческими и дизайнерскими достижениями и использованием иных огнеупорных компонентов, расширяет перспективы применения этого материала при значительном уменьшении энергозатрат и дефицитных ресурсов.

UREA PHOSPHATE AS A COMPONENT OF COMPLEX NPCa-FERTILIZERS

*Vetsner Yu. I.*National Technical University "Kharkiv Polytechnic Institute", Kharkiv, Ukraine
vetsner7@gmail.com

The use of mineral fertilizers is one of the main criteria for increasing yields in agriculture. Complex fertilizers, which contain both nitrogen and phosphorus, are of particular importance. To provide agriculture with complex fertilizers, technologies based on the use of phosphorus-containing raw materials, which are located in Ukraine, are promising. Of particular practical interest is the use of carbamide due to its ability to form complex fertilizers with almost all inorganic acids and salts. This contributes to the production of complex fertilizers with various forms of nutrients, which slowly decompose under the action of soil solutions or water, which leads to the transition of phosphates fixed in the soil to assimilable ones.

The study of the interaction of urea with various salts and acids is of both theoretical and practical importance in connection with the production of complex fertilizers. Urea is the most nitrogen-rich fertilizer; it contains 46.6 % nitrogen in an easily assimilable form. It has the ability to form crystalline inclusion compounds with both organic and inorganic compounds. Urea inclusion compounds are highly stable. With acids, urea forms in the process of hydrolysis easily dissociating crystalline salt-like compounds having an acidic reaction.

In this regard, it is of interest to obtain carbamide phosphates depending on the concentration of phosphoric acid. The studies were carried out using analytical grade reagents ($\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ and H_3PO_4). The general procedure for the preparation of carbamide phosphate was as follows: crystalline carbamide was slowly added to a solution of orthophosphoric acid with a concentration of 80 %. Then, at a temperature of 40 °C, the mixture was stirred at $\tau = 30$ min. Then the hot solution was filtered using a Buchner funnel. The resulting filtrate was cooled to 0 °C and sent again for filtration using a Buchner funnel. As a result, a solid fraction was obtained – crystals of carbamide phosphate ($\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_3\text{PO}_4$).

The obtained samples of carbamide phosphate were subjected to X-ray analysis, as a result of which the composition was established, which fully coincided with the literature data. The X-ray diffraction pattern of carbamide phosphate is shown in Fig. 1.

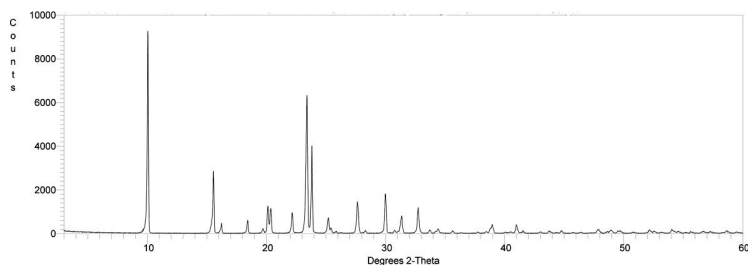


Fig. 1. X-ray diffraction pattern of urea phosphate

The optimum concentration of phosphoric acid (H_3PO_4) for the production of carbamide phosphate is 80 %. Because at a given concentration, moisture loss occurs faster than at higher concentrations.

**СИНТЕЗ ХІМІЧНО ЧИСТИХ ФОСФАТІВ АМОНІЮ, НАТРІЮ ТА КАЛІЮ
НА ОСНОВІ ЕКСТРАКЦІЙНОЇ ОРТОФОСФОРНОЇ КИСЛОТИ**

Гросу О. К., Кінаш М. С., Василенко К. В., Ніколенко М. В.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»

пр. Гагаріна, 8, Дніпро, 49005, Україна

grosy1995@gmail.com

В наш час солі ортофосфорної кислоти широко використовуються в сільському господарстві як джерело фосфору, а також в багатьох галузях промисловості: хімічній, фармацевтичній, харчовій, електронній, текстильній тощо. Для застосування в харчовій та фармацевтичній промисловості до фосфатів пред'являють особливі вимоги не містити токсичні домішки арсену, плумбуму та d-металів. Потреба в таких фосфатах безперервно зростає і тому становить інтерес розробити в Україні власні технології харчових фосфатів.

Класичні технології одержання хімічно чистих фосфатів амонію, лужних і лужноземельних металів базуються на способі нейтралізації розчинів харчової ортофосфорної кислоти або її реактивних марок «чиста» (ч.), «чиста для аналізів» (ч.д.а.) та «хімічно чиста» (х.ч.) відповідними хімічно чистими карбонатами або гідрооксидами лужних або лужноземельних металів з подальшим упарюванням розчинів солей і їх кристалізацією. Враховуючи відносно високу вартість хімічно чистих карбонатів та гідроксидів натрію і калію, нами поставлено завдання використати для перетворення амонійної солі в натрієві та калієві солі конверсійний метод, в якому перетворення проводиться за участю солей натрію та калію. Очевидно, що для забезпечення високих ступенів перетворення вихідних реагентів в цільові продукти процеси синтезу необхідно проводити за циркуляційним схемами з поверненням в цикл маткових розчинів.

Таким чином, вище сказане визначило мету нашої роботи: дослідити та оптимізувати процеси синтезу хімічно чистих ортофосфатів амонію, натрію та калію для використання їх в якості харчових добавок. Представляє інтерес визначити можливість використання конверсійного методу для отримання натрієвих та калієвих солей фосфорної кислоти, маючи за базовий прекурсор синтезу гідрофосфат амонію. Останній реактив є продуктом очистки екстракційної фосфорної кислоти від токсичних домішок способом співосадження з гідрофосфатом кальцію і тому в його розчинах присутні домішки солі NH_4Cl , що ускладнює процеси кристалізації хімічно чистих солей. Експерименти з одержання хімічно чистих солей проводили в два етапи: 1) очистки розчинів екстракційної ортофосфорної кислоти від токсичних домішок d-металів, плумбуму та арсену способом співосадження з гідрофосфатом кальцію; 2) процеси вибіркової кристалізації та/або конверсії прекурсору в цільовий продукт.

В результаті проведених досліджень встановлено, що при об'єднанні способів ізотермічної та ізогідричної кристалізації з методом конверсії можливо одержати наступні хімічно чисті продукти:

- з суміші $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$ і NH_4Cl можливо селективно кристалізувати чистий $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$ з виходом 82,5 %;

- з підкисленого соляною кислотою розчину суміші солей $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$ і NH_4Cl можливо виділити в осад чистий $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ з виходом 68,5 %;

- з суміші $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$ і NH_4Cl реакцією конверсії з NaCl можливо кристалізувати чистий $\text{Na}_2\text{HPO}_4 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$ з виходом 96 %;

- підкисленням фосфорною кислотою розчину Na_2HPO_4 можливо одержати Na_2HPO_4 , який можна кристалізувати у вигляді $\text{NaH}_2\text{PO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ з виходом до 100 %;

- з розчину NaH_2PO_4 реакцією конверсії з KCl можливо осадити чистий KH_2PO_4 з виходом 66 %.

- реакцією KH_2PO_4 з гідроксидом або карбонатом калію можливо одержати K_2HPO_4 з виходом до 100 %.

РОЗРОБКА АРОМАКОМПОЗИЦІЙ ДЛЯ КОСМЕТИЧНИХ ВИРОБНИЦТВ*Гусаревич Л. В.*, Лабяк О. В.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»

пр. Гагаріна, 8, 49005 Дніпро, Україна,

gusareviclesa@gmail.com

Актуальність застосування і великий попит на аромакомпозиції безперечно спонукає на пошук нових ароматів. Аромакомпозиції внаслідок збагачення хімічного складу здатні збільшувати спектр варіабельності їх застосування. В наш час вони широко поширені у косметичній та парфумерній промисловості і в медицині.

При виробництві косметики досить часто використовуються ефірні олії. Ефірні олії мають бактерицидну, антисептичну, протизапальну і заспокійливу дію. Вони є ефективними і дієвими помічниками в боротьбі за красу волосся, нігтів і шкіри. Володіють високою проникаючою здатністю, тому засоби на їх основі здатні боротися з самими складними недугами, у тому числі з сухістю шкіри, вугрі, акне, лупою і ламкості волосся. Вони також виступають в якості консервуючих агентів.

Таким чином, мета роботи полягала у розробці та приготуванні аромакомпозицій на основі ефірних олій та їх застосуванні у виробництві косметичних засобів. З метою забезпечення позитивного косметичного ефекту та запобігання можливої побічної дії, в роботі систематизовано та уніфіковано процес створення, виготовлення та використання аромакомпозицій. Доведено, що процес приготування, який у своїй більшості, має емпіричний характер, повинен відбуватися за певними правилами, які здатні впливати на косметичний ефект аромасуміші та забезпечувати її належну якість та безпеку. Встановлено, що в процесі технології приготування аромакомпозицій повинні враховуватися певні правила.

Важливим фактором при створенні аромакомпозиції виступає сировина. Залежно від того, яку сировину використовували фахівці буде створюватись відповідний запах і рівень його стійкості, безпеки, що в свою чергу сформує споживні властивості і ціну готового виробу.

Розробку аромакомпозицій проводили за методикою, яка враховує хімічний склад, сумісність ароматів, летючість, безпечність, тонове співвідношення згідно правилу золотого перетину. Після змішування компонентів залишали суміш на відстоювання. Пакувати аромакомпозиції потрібно в скляний флакон з темного скла і зберігати у темному прохолодному місці.

У роботі розроблено рецептури аромакомпозицій з фужерним, квітковим, цитрусовим і деревинним ароматами, досліджено їх органолептичні властивості, побудовано профіль основних сенсорних якостей розроблених аромакомпозицій. Оцінювання проводили незалежні експерти за визначеними показниками. Запропоновано використати розроблені аромакомпозиції у косметичних засобах.

Аромакомпозиції з базовими нотами олії сандалу, жасміну і ялівцю використано при розробці рецептур тоніків для жирної, нормальної та сухої шкіри обличчя. Проведено контроль якості експериментальних зразків тоніку для шкіри та їх споживчі властивості.

Проведені дослідження показали, що знайдено оптимальне співвідношення компонентів для аромакомпозицій, зразки відповідають очікуваним результатам, деякі відмінності можуть пояснюватись індивідуальністю сприйняття запахів незалежними експертами, розроблені рецептури тоніків відповідають всім вимогам за показниками якості.

**СИНТЕЗ ДОВГОЛАНЦЮГОВИХ ЕСТЕРІВ ЖИРНИХ КИСЛОТ НА ОСНОВІ
ТЕХНІЧНИХ ЖИРІВ***Давітадзе Д. З.*, Папейкін О. О.Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря НАН України, Київ, Україна
davitatzedza@gmail.com

Світове споживання енергії зростає кожен рік. За прогнозами її щорічний приріст збільшуватиметься на 1,2 % та до 2050 р. зросте майже на 50 %. Це пов'язане зі збільшенням кількості населення, покращенням умов життя та економічним розвитком країн. А це, своєю чергою, призведе до збільшення обсягів використання основних джерел енерговиробництва: нафти, вугілля та газу, виснаження їх запасів, на утворення яких знадобилося мільйони років.

Розв'язання цих проблем, при цьому не погіршуючи якість життя населення та знизивши емісію CO₂, є застосування альтернативних джерел хімічної сировини та енергії, в тому числі з використанням відновлювальної сировини. Одним з таких видів сировини є олії, жири та продукти, які одержують на їх основі – естери вищих жирних кислот (ЕВЖК) або біодизельне паливо. Таке паливо не містить сполук сульфурі, нетоксичне та при потрапінні в навколишнє середовище повністю розкладається. При використанні ЕВЖК викиди парникових газів знижуються на 74 % в порівнянні з нафтовим дизельним паливом.

В останні десятиріччя різко зріс попит на харчові олії, що пояснюється головним чином підвищенням споживання олій в країнах, що розвиваються, та збільшенням попитом на біодизельне паливо. Зараз близько 5 % одержаних олій припадає на виробництво біодизельного палива. У 2017 році у світі для виробництва 78 % біодизельного палива використані харчові олії, такі як ріпакова (20 %), соєва (27 %) та пальмова (31 %). Таке застосування харчових олій породило чималу кількість противників біодизельного палива, які стверджують, що великі обсяги виробництва такого палива може призвести в найближчому майбутньому до їх браку у світі.

Тому останнім часом така сировина, як пташиний, тваринний технічний жир (ТЖ) та інші жирові відходи м'ясопереробної промисловості, привернула увагу для залучення у виробництво біодизельного палива. Таким чином, використання та перероблення цієї сировини з одного боку, знизять вартість біодизельного палива, а з іншого – розв'яжуть питання з утилізацією відходів, більша частина яких спалюється.

Нашою метою було синтез довголанцюгових ЕВЖК алкоголізом на основі ТЖ, дослідження їх будови та фізико-хімічних властивостей. Особливістю ТЖ є високий вміст вільних жирних кислот понад 70 %, що спонукає до використання саме кислотного каталізатора для даної трансформації. Для його алкоголізу використовували гексиловий та дециловий спирти.

Серією синтезів встановлені оптимальні умови, а саме: температура 125 °С та тривалість 28 годин. Також треба зазначити, що підвищення температури до 150 °С призводило до утворення великої кількості коксового залишку. Перебіг синтезів фіксували за зміною вмісту вільних жирних кислот у реакційному середовищі. Після завершення реакції суміш фільтрували та видаляли гліцериновий шар відстоюванням. Будову одержаних ЕВЖК досліджували за допомогою ІЧ-спектроскопії, в їх спектрах спостерігаються смуги поглинання в області валентних коливань при 1735 см⁻¹ характерні для С=О зв'язку карбонільної групи та асиметричні валентні коливання при 1170 см⁻¹, які відповідають О–С–С карбонільної групи, що, своєю чергою, вказує на наявність естерів та проходження реакції. Кінематичну в'язкість визначали згідно з ISO 3104 за температур 40 °С та 100 °С, яка склала для гептилових естерів 11,88 і 3,58 мм²/с та децилових – 14,46 і 3,83 мм²/с відповідно.

ВАЖКІ ТАМПОНАЖНІ ЦЕМЕНТИ НА ОСНОВІ ВІДХОДІВ ХІМІЧНОЇ ГАЛУЗІ ПРОМИСЛОВОСТІ

Дев'ятова Н. Б., Корогодська А. М., Шабанова Г. М.

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»,
Харків, Україна
nataliya.devatova@gmail.com

При розвідувальному і експлуатаційному бурінні нафтових і газових свердловин, а також при капітальному їх ремонті застосовують тампонажні цементи, що представляють собою, в основному, різновиди портландцементу. Тампонажні цементи використовують для цементування свердловин, мета якого – ізолювати продуктивні шари від водоносних, а також відокремити шари один від одного при багатопластових покладах.

Таким чином, жорсткість вимог, що ставляться до сучасних тампонажних цементів вимагають пошуків нових технологічних рішень щодо хімічного та мінералогічного складу в'язучих матеріалів гідратаційного тверднення. З точки зору унітарності застосування, підвищення міцності та корозійної стійкості, а також зниження водопроникності найбільш придатними є алюмінатні та алюмоферитні цементи.

Для застосування у «гарячих» свердловинах до складу цементного клінкеру можна вводити оксиди, які при температурі синтезу цементу будуть формувати вогнетривкі фази, наприклад Cr_2O_3 . Для отримання важких тампонажних цементів була обрана система $\text{CaO-Fe}_2\text{O}_3\text{-Cr}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$, до складу якої входять гідравлічно активні алюмінати кальцію, браунміллерит, а також хроміт кальцію, який має значну щільність. За результатами проведених фізико-хімічних розрахунків для розробки складів важких тампонажних цементів обрано область, обмежену сполуками CaAl_2O_4 , $\text{Ca}_{12}\text{Al}_{14}\text{O}_{33}$, CaCr_2O_4 , $\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{Fe}_2\text{O}_{10}$.

В алюмінатних та алюмоферитних цементах найбільш актуальною проблемою є заміна глиноземного компонента, який є дорогокоштовною сировиною та промисловістю України не виробляється. З цієї точки зору найбільш придатними матеріалами є відходи відпрацьованих та відбракованих каталізаторів, які використовуються у хімічній промисловості, оскільки вони мають практично постійний хімічний склад, який коливається у вузьких межах.

При розробці технології отримання тампонажних цементів використовувалися наступні сировинні матеріали: кальційвмісні відходи водоочищення, відходи відпрацьованого залізохромового каталізатора середньотемпературної конверсії вуглеводнів СТК-1, відхід відпрацьованого алюмохромового каталізатора пароводневої конверсії вуглеводнів ДІАП-14С, які використовуються ПрАТ «Северодонецьке об'єднання «Азот»».

За результатами проведених досліджень оптимальним обрано склад, який містить CaAl_2O_4 – 30 мас. %, CaCr_2O_4 – 10 мас. %, $\text{Ca}_{12}\text{Al}_{14}\text{O}_{33}$ – 30 мас. %, $\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{Fe}_2\text{O}_{10}$ – 30 мас. % та має наступні характеристики: за водоцементного співвідношення 0,32 розтікання складає 230 мм, терміни тужавіння: початок 90 хвилин, кінець 4 години, границя міцності при стиску у віці 1 доби – 28 МПа, у подальшому скидання міцності не спостерігається, границя міцності при вигині у тому ж віці 6,6 МПа, коефіцієнт сульфатостійкості 1,32. Розроблено склади тампонажних розчинів, та визначено що найбільш відповідає вимогам ДСТУ склад із заповнювачем баритом.

Таким чином, за результатами проведених досліджень встановлено, що з використанням відходів відходів хімічної галузі промисловості можливо отримання тампонажних цементів, придатних для цементування «гарячих» нафтових і газових свердловин.

НЕЙТРАЛІЗАЦІЯ КИСЛИХ ВОДНИХ СТОКІВ В РЕАКТОРІ З ПОЛІМЕРНОГО МАТЕРІАЛУ*Деркаченко Д. О.*, Поджарський М. А.Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, Дніпро, Україна
cher@dnu.dp.ua

Нейтралізація кислих водних стоків хімічних підприємств є нагальною проблемою, яку необхідно вирішувати ще на етапі проектування. Її складність полягає у строгих вимогах до корозійної стійкості технологічного обладнання, які в значній мірі обумовлюють його високу вартість. Однак в останні роки з'явилися нові технічні рішення, які дозволяють значно здешевити технологічне обладнання, не ризикуючи втратити його корозійні властивості. Так, замість корозієстійких сплавів для виготовлення реакторів-нейтралізаторів можна використовувати більш доступні та дешеві сучасні полімерні матеріали.

Метою цього дослідження є розробка реактора-нейтралізатора кислих водних стоків, виготовленого з поліпропілену.

Розробка проводилася методом теоретичних розрахунків з використанням сучасної комп'ютерної техніки.

Проведено розрахунок основних конструкційних параметрів реактора-нейтралізатора кислих водних стоків продуктивністю 2500 кг/добу, виготовленого з поліпропілену. Технологічні показники процесу нейтралізації: температура реакційної суміші не більш за 60 °С, процес проходить під атмосферним тиском, вихідна суміш – водний розчин соляної кислоти з концентрацією 15–20 %, домішки: оцтова кислота, сполуки алюмінію, похідні фероцену. В результаті розрахунку визначено необхідну кількість лугу NaOH для повної нейтралізації вихідного розчину, вона становить 360 кг. Розраховані основні геометричні параметри реактору: загальний об'єм 3 м³, робоча висота ємності 1,95 м, внутрішній діаметр 1,4 м товщина стінки корпусу і днища 12 мм. Визначені розміри і технічні характеристики лопатевої, однорядної мішалки: діаметр лопаті: 1 м, ширина лопаті 0,21 м, швидкість обертання валу 70 хв⁻¹, потужність двигуна 5 кВт. Передбачена можливість футерування лопаті мішалки полімерним матеріалом для зменшення маси та запобігання корозії металевих частин. Розраховано змійовиковий теплообмінник необхідної потужності.

Отримані результати досліджень будуть використані як основа масштабного 3D-моделювання реактора-нейтралізатора для його подальшої розробки.

РОЗРОБКА СКРАБУ ДЛЯ ТІЛА З ВИКОРИСТАННЯМ АБРАЗИВУ НАТУРАЛЬНОГО ПОХОДЖЕННЯ

Дранак О. С., Лабяк О. В.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»
пр. Гагаріна 8, Дніпро, 49005, Україна
pasosh1310@gmail.com

У XXI столітті все більшу популярність знаходить здоровий спосіб життя і нерозривно пов'язана з ним органічна продукція.

Органічна або натуральна косметика повинна бути виготовлена тільки з натуральної сировини й відповідно до вимог стандартів якості. Наприклад, в її складі заборонено використовувати такі речовини: формальдегід і його похідні, галогенорганічні з'єднання, етоксильовані компоненти, синтетичні ароматизатори та барвники, парабени і ряд інших консервантів.

Скраб – косметичний засіб у вигляді крему, емульсії, гелю, що містить тверді частинки (абразиви) і використовується для очищення шкіри від відмерлих клітин епідермісу. За призначенням розрізняють скраби для обличчя, для тіла та антицелюлітні. Абразиви можуть бути натуральними або штучними.

У пошуках альтернатив синтетичним компонентам розробники косметики та засобів особистої гігієни звернулися до природи, і частина відповідних варіантів вже знайдена – починаючи від кукурудзяного борошна до абрикосових кісточок, горіхової шкаралупи і масла жожоба. Також у якості абразиву можна використовувати сіль, цукор, целюлозу, луску риби попередньо оброблену при 80–100 °С у овочевому, або фруктовому соках, молочній сироватці, які містять у складі органічні кислоти.

Метою роботи була розробка рецептури скрабу, яка містить абразиви натурального походження та є екологічно безпечною для навколишнього середовища.

Основний склад скрабу: м'яка мильна основа, масло Ши, олія лаванди, обліпихи та абрикосових кісточок, а також абразив у вигляді цукру. Невід'ємною складовою скрабу є суміш вітамінів. Так як синтетичні барвники є однією з основних причин виникнення алергічних реакцій – було вирішено використовувати барвники натурального походження. Для даного косметичного засобу була обрана рослина з фарбувальним та запашним ефектом – лаванда.

До складу також входять рідкі та тверді масла, які потрібні для кращого нанесення скрабу на шкіру, її пом'якшення та зволоження, оскільки містять в своєму складі велику кількість ненасичених жирних кислот – речовин, що відіграють важливу роль у процесах регенерації та поділу клітин шкіри, регулюють водний баланс. М'яка мильна основа використовується у якості компоненту, який утворює піну і має здатність очищувати.

Таким чином розроблена екологічно-безпечна рецептура скрабу для тіла, яка має відлущуючий, пом'якшуючий та живильні ефекти. Обрані безпечні абразиви та запропоновані інші варіанти заміни синтетичних абразивів. Склад їх відрізняється також в залежності від типу шкіри – сухий, нормальної, комбінованої або жирної. Косметичний ефект від дії скрабу помітний після першого застосування. Ділянки шкіри, оброблені скрабом, набувають пружність, гладкість і змінюють свій колір (стають світлішими) в порівнянні з необробленими.

В результаті проведених досліджень було виявлено, що даний засіб не токсичний і не чинить подразнюючої та алергізуючої дії на шкіру тіла і організм людини, очищає шкіру від мікрозабруднень, має протизапальну дію. Відповідає показникам якості згідно нормативної документації.

Категорично забороняється наносити скраб на ділянки шкіри, які мають будь-які запалення, пошкодження або висипання: ранки або порізи, опіки, в тому числі і сонячні, акне (вугрі), гнійники, будь-які дерматологічні захворювання. Також не рекомендується скрабировать тіло після гоління або епіляції.

ВПЛИВ СПОСОБУ ОТРИМАННЯ НА ФОРМУ АГЛОМЕРАТИВ ПОРОШКІВ СРІБЛА

Короляничук Д. Г., Коломієць О. В., Овчаренко В. І.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет», Дніпро, Україна
markiz.kotik99@gmail.com

Порошок срібла окрім медицини, застосовуються для виготовлення товстошарових провідникових паст і електричних контактів на основі срібла, призначених для замикання і розмикання електричних ланцюгів, і для виготовлення струмопровідних клеїв, і у виробництві багатшарових керамічних конденсаторів. Тому синтез і дослідження нанопорошків срібла становить інтерес як для фундаментальної науки, яка вивчає принципи формування і стійкості наносистем так і для прикладної.

Метою даної роботи є визначення впливу відновника при виготовленні прошків срібла на форму агломератів порошка.

Порошок срібла отримали трьома способами: осадження хлориду срібла з розчину нітрату срібла водорозчинним хлоридом при температурі 20–50 °С і рН 1–5, декантацію розчину, обробку суспензії розчином гідроксиду лужного металу з концентрацією в реакційному середовищі 12–200 г/дм³, відновлення срібла з суспензії формаліном при температурі 40–90 °С протягом 10–60 хвилин, промивку послідовно гарячою деіонізованою водою, розчином аміаку, холодною деіонізованою водою, фільтрацію і сушку осаду порошку срібла при температурі 70–120 °С; відновлення галогені дів срібла формаліном у лужному середовищі з подальшою промивкою гарячою водою, 2 %-вим розчином сульфатної кислоти, 2 %-вим розчином аміаку і гарячою водою до негативної реакції на іон хлора. Промитий метал висушували при 40–50 °С; осадження хлориду срібла з розчину нітрату срібла водорозчинним хлоридом при температурі 20–50 °С і рН 1–5, декантацію розчину обробку суспензії свіжоосадженого хлориду срібла проводили розчином хлориду калію до концентрації в реакційному середовищі 50–60 г/дм³ та розчином гідроксиду амонію до концентрації в реакційному середовищі 8–10 г/дм³.

Дослідження форми і розміру порошків срібла проводили методом растрової мікроскопії за допомогою скануючого електронного мікроскопа РЕМ-106И в режимі отримання зображення у вторинних електронах; прискорювальна напруга 25 кВ, струм гармати – 95 мА.

За результатами електронно-мікроскопічних досліджень встановлено, що порошок срібла, отриманий методом 1, утворений агломератами частинок в широкому діапазоні розмірів від 1 до 20 мкм, при цьому форма частинок має лускате будову, і розмір їх становить 1–3 мкм. Порошок срібла отриманий методом 2 сформований з агломератів частинок такого ж діапазону розмірів (1–20 мкм), що і в першому випадку. Відмінність полягає в розмірі і формі самих частинок срібла. Частинки представляють собою сфери, розміром 400–700 нм. У третьому випадку, порошок срібла складається з фракцій двох видів діапазон розмірів яких становить 12–18 мкм. Одна фракція представляє собою агломерат, утворений частинками пластинчастої форми, розмір яких становить близько 3 мкм. Частинки, з яких складається друга фракція, мають форму сфер і циліндрів розміром 400–800 нм.

Встановлено, що швидкість відновлення металу і ступінь вилучення корисного матеріалу з вихідної сировини вище у порошку, отриманого методом 1, середні значення відповідають порошку, отриманому методом 3 і найменші параметри – для порошку, отриманого методом 2.

СОРБИЦИОННАЯ ОЧИСТКА СТОЧНЫХ ВОД ОТ ИОНОВ ЦИНКА ДРЕВЕСНЫМИ ОТХОДАМИ

Косевич Е. В., Шибка Л. А.

Учреждение образования «Белорусский государственный технологический университет», Минск, Республика Беларусь
Shibekal@mail.ru

Древесные отходы находят широкое применение в различных сферах народного хозяйства: для изготовления древесных плит, в качестве сырья в целлюлозно-бумажной и лесохимической промышленности, в качестве топлива, в сельском хозяйстве для изготовления органоминеральных удобрений, при производстве эфирных масел. Одной из областей использования древесных отходов является природоохранная деятельность. Древесные отходы используются для изготовления биофильтров для обезвреживания газовоздушных выбросов и сорбционных материалов для очистки сточных вод.

Цель работы – оценка возможности использования древесных отходов в процессах очистки сточных вод от ионов цинка.

В качестве объекта исследований выступали древесные опилки, образующиеся на одном из деревообрабатывающих промышленных предприятий Республики Беларусь с размером фракции не более 20 мм. Для увеличения сорбционной емкости древесных отходов производили активацию поверхности сорбента термическим методом путем выдержки древесных опилок в течение 2 часов при температуре 145 °С.

Исследования сорбционной емкости проводили на модельных сточных водах, содержащих ионы цинка в диапазоне концентраций 0,1–2 г/дм³. Определение статической сорбционной емкости образцов древесных отходов осуществляли следующим образом: в химический стакан помещали навеску сорбента и приливали раствор соли цинка с определенной концентрацией. Пробу периодически перемешивали. Через 2 часа после разделения фаз методом фильтрования, в фильтрате определяли содержание ионов цинка титриметрическим методом.

Установлено, что с ростом исходной концентрации ионов цинка в растворе увеличивается сорбционная емкость древесных сорбентов. При этом, предельное значение сорбционной емкости исходных древесных опилок составляет 22,1 мг/г сорбента, а модифицированных опилок – 25,9 мг/г. Таким образом, термическая обработка древесных отходов приводит к незначительному росту сорбционных свойств исследуемых материалов.

Следует отметить, ход сорбционных кривых для исходных и модифицированных древесных опилок несколько отличается друг от друга. В частности, для отходов, не подвергшихся термическому воздействию, наблюдается более стремительный рост изменения сорбционной емкости при увеличении исходной концентрации ионов цинка в растворе, чем для модифицированного образца. Такая ситуация имеет место в диапазоне начальных значений концентраций цинка в пробе 0,1–0,6 г/дм³. При дальнейшем увеличении исходного содержания ионов цинка в воде происходит плавное увеличение сорбционной емкости от 19,9 мг/г до 22,1 мг/г.

Для образца древесных отходов, подвергшихся термической активации поверхности, изначально характерен плавный рост сорбционной емкости в диапазоне исходных концентраций ионов цинка 0,1–0,8 г/дм³ до величины 19,0 мг/г, с последующим увеличением рассматриваемого показателя при большем содержании металла в пробе.

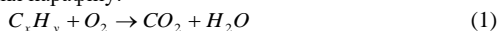
Установлено, что древесные отходы могут найти применение в процессах очистки воды от ионов цинка. Термическая активация поверхности древесных отходов приводит к незначительному росту сорбционной емкости материала.

ОТРИМАННЯ НАНОГЛОБУЛЯРНОГО ВУГЛЕЦЮ В ЕЛЕКТРИЧНОМУ ПОЛІ

Куряшов А. В.

Сибірський державний університет науки і технологій
імені академіка М. Ф. Решетньова, Красноярськ, Російська Федерація
dekakup@gmail.com

Сьогодні розроблено багато методів отримання вуглецевих наноструктур з різними розмірами і властивостями, але суть всіх методів одна: наночастинки вуглецю утворюються в результаті хімічних перетворень вуглецевмісних матеріалів в умовах підвищених температур. Цікавим у перспективі використання є спосіб отримання наночастинок вуглецю в процесі горіння свічки в електричному полі. Для цього був створений спеціальний пристрій, що складається з: двох мідних проводів (перетином 2,5 мм²), підключених до електричної мережі 220 В, до кінця проводів прикріплені тонкі мідні електроди (діаметром 0,5 мм). Мідні електроди розміщуються над полум'ям свічки з парафіну. Рівняння реакції горіння парафіну:



При нагріванні мідних електродів відбувається реакція міді з киснем, що протікає з виділенням тепла і світла:



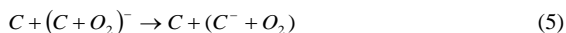
У процесі горіння вуглець відновлює мідь з оксиду з утворенням вуглекислого газу:



В результаті на мідних електродах починають утворюватися нарости чорного кольору – «вуглецеві куші». Це пов'язано з тим, що серед хаотичнорухомих електронейтральних молекул CO₂ є іон (CO₂)⁻, який прикріплює до себе полярні молекули CO₂. Така «адсорбція», обумовлена електричним зарядом іона (CO₂)⁻ і полярністю молекул CO₂, призводить до утворення частки з безлічі молекул, що формується навколо центрального іона CO₂⁻. Ця частка є деякою наночастинку, оскільки розміри її лежать в нанометричну діапазоні. Зростання наночастинки навколо іона протікає хоч і швидко, але поступово – молекула за молекулою. При кожному акті «приєднання» молекули CO₂ виділяється адсорбційна (конденсаційна) енергія, яка акумулюється нано - часткою. При досягненні деякого критичного числа «приєднаних» молекул CO₂ накопиченої конденсаційної енергії може бути достатньо, щоб розщепити центральний іон CO₂⁻ по реакції:



Подальше зростання наночастинки накопичує досить конденсаційної енергії, щоб в ядрі наночастинки сталася чергова дисоціація іона CO₂⁻ на атом вуглецю і молекулу кисню:



«Вуглецеві куші» знімаємо з мідних електродів механічним способом. На рис. 1 показані знімки отриманих частинок. В результаті експерименту були отримані наноглоби розмірів менше 50 нм. Отриманий наноглобулярний вуглець може бути використаний в якості наповнювача полімерних захисних матеріалів і покриттів.

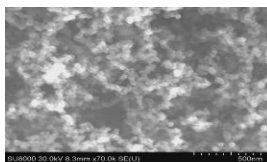


Рис. 1. Сем зображення наночастинок вуглецю

ДОСЛІДЖЕННЯ КЛІНКЕРІВ КОБАЛЬТВМІСНИХ ЦЕМЕНТІВ*Левадна С. В.*, Гамова О. О., Корогодська А. М., Шабанова Г. М.Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»,
Харків, Україна
sv.levadna@ukr.net

Актуальним завданням в галузі тугоплавких неметалічних матеріалів є створення нових видів вогнетривких в'язучих, в яких можливо замінити традиційні сировинні компоненти на відходи виробництва та, цим самим, здешевити готову продукцію і розширити сировинну базу України. У різних галузях промисловості все частіше використовуються цементи, отримані з використанням відходів, що зменшує витрати паливоенергетичних ресурсів, зменшує екологічне навантаження на промислові регіони країни, та, зокрема, підвищує технічні властивості отримуваних матеріалів.

Для розробки ресурсоощадної технології виробництва глиноземистого цементу з використанням як вихідних матеріалів відходів хімічної промисловості, за допомогою комплексу фізико-хімічних методів аналізу проведено дослідження відпрацьованих носіїв алумокобальтмолібденових каталізаторів та відходів водоочищення ПрАТ «Севродонецьке об'єднання Азот», а також барійвмісні відходи виробництва амінокапронової кислоти ДП «Завод хімічних реактивів» НТК «Інститут монокристалів» та встановлено, що вони можуть бути використані для синтезу експериментального глиноземистого цементу як вихідні алюміній-, кальцій- та барійвмісні компоненти за рахунок вмісту алюміній оксиду до 87 мас. % у складі відпрацьованих носіїв каталізаторів, кальцій карбонату до 75 мас. % у складі відходів водоочищення та барій карбонату до 90 мас. % у складі відходів виробництва амінокапронової кислоти.

Синтезовано ряд складів глиноземистих цементів складу, яких оптимізовані за допомогою симплекс-градчастого методу планування експерименту. За результатами розрахунків обрано оптимальні складу кальцієвих кобальтвмісних цементів з вмістом, мас. %: CaAl_2O_4 – 25 – 55, CaAl_4O_7 – 15 – 35; CoAl_2O_4 – 25 – 45 для кальцієвого та BaAl_2O_4 – 60 – 80; BaAl_2O_9 – 10 – 20; CoAl_2O_4 – 10 – 30 для барієвого цементу відповідно.

Проведеним комплексом фізико-хімічних досліджень кальцієвих та барієвих кобальтвмісних клінкерів, випалених при різних температурах та часі витримки доведено, що у результаті взаємодії вихідних сировинних компонентів суміші у матеріалі синтезується суміш гідравлічно активних моно- та діалюмінату кальцію або моноалюмінату барію, а також вогнетривких фаз – кобальтової шпінелі та гексаалюмінату барію, що забезпечує одержувані в'язучі матеріали комплекс заданих експлуатаційних характеристик: високу міцність, прискорені терміни тверднення, вогнетривкість. Відсутність фаз, які відповідають сполукам молібдену пояснюється тим, що вони входять до складу гідравлічно активних алюмінатів як обмежені тверді розчини, деформуючи кристалічну ґратку та підвищуючи гідравлічну активність матеріалу.

Отримані результати свідчать про те, що розроблені цементи на основі гідравлічно активних алюмінатів кальцію і барію та алумокобальтової шпінелі відносяться до швидкотверднучих, швидкотужавіючих, високоміцних в'язучих матеріалів з високою вогнетривкістю і можуть бути рекомендовані для виготовлення вогнетривких бетонів, торкрет-мас, а також мертелів для застосування їх в високотемпературних агрегатах різних галузей промисловості.

ХРОМАТОГРАФІЧНИЙ АНАЛІЗ КРОХМАЛЮ ТА ЙОГО ПОХІДНИХ*Миргородська В. Д., Авдієнко Т. М., Ніколенко М. В.*Український державний хіміко-технологічний університет, Дніпро, Україна
mirgorodskaya.viktoria@gmail.com

У сучасній косметичній, фармацевтичній, харчовій промисловостях використовуються різноманітні харчові добавки: консерванти, барвники, ароматизатори та інші. Широке застосування знайшли добавки, які регулюють консистенцію виробів. Зокрема, це група гелеутворювачів, стабілізаторів та згущувачів, до яких відносяться продукти деструкції та різних модифікацій нативних крохмалів. Однією з найбільш популярних речовин є декстрин.

Декстрин (E1400) – полісахарид, який одержують шляхом термічного оброблення нативного крохмалю.

Крохмаль являє собою полімер глюкози, який утворюється в рослинах і є їх основним резервним вуглеводом. Амілоза – це довгі нерозгалужені ланцюги, які містять 100-2000 α -D-глюкопіроназних залишків, з'єднаних α -(1 \rightarrow 4)-глюкозидними зв'язками. Молекулярна маса амілози в залежності від походження крохмалю коливається в межах 10^5 – 10^6 . А амілопектин на відміну від амілози складається з безлічі коротких та розгалужених поліглюкозидних ланцюгів, кожна з яких в середньому складається з 17 – 26 залишків α -D-глюкопіронази. В залежності від походження крохмалю молекулярна маса амілопектину коливається в межах 10^7 – 10^8 . Тобто маємо рухому та нерухому частини. Отже, можливе використання хроматографічного аналізу для дослідження одержаних зразків модифікованого крохмалю. Такий аналіз дозволить визначити якісні зміни у будові гранули після змін властивостей нативного крохмалю і одержання нового виду крохмалю.

Для дослідження використовували кукурудзяний та картопляний крохмаль. В якості модифікуючих реагентів застосовували неорганічні кислоти з різними концентраціями: фосфорну та хлорводневу. Для вибору модифікуючого агента при одержанні кислотного декстрину змінювали час замочування крохмалю та концентрації кислот. В результаті дослідження були одержані зразки кислотного декстрину жовтувато-білого кольору. Різновиди декстринів визначаються не тільки кольором після висушування, а й забарвленням в результаті взаємодії з йодом. А саме, під час гідролізу крохмалю в кислоті спочатку утворюється амілодекстрин, потім еритродекстрин, ахродекстрин і останньою стадією є мальтодекстрин. По мірі утворення декстринів їх розчинність у холодній воді підвищується, а йодна реакція втрачається. Одержанні зразки в реакції з йодом дають синє забарвлення, що відповідає амілодекстрину.

Для дослідження змін властивостей нативного крохмалю після модифікації було обрано тонкошарову хроматографію. Краплю суміші наносять на тонку пластинку, покриту сорбентом. Нижній край пластини занурюють в елюент. За рахунок капілярних сил починається рух рідини по пластинці, аналіз якого дозволяє визначити склад суміші. При правильній підготовці рухомої і нерухомої фаз і невеликому обсязі проби, кожен компонент реагенту рухається зі своєю швидкістю, утворюючи на поверхні пластини «пляму».

При проведенні дослідження було встановлено, що в залежності від умов одержання модифікованого крохмалю необхідно підібрати «свій» елюент, тому що декстрини мають відмінні властивості. А це доводить, що в залежності від температури одержання, виду крохмалю та каталізатора властивості декстринів змінюються.

**ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСУ УТВОРЕННЯ КОПІГМЕНТНИХ КОМПЛЕКСІВ
В АНТОЦІАНОВИХ БАРВНИКАХ***Мощенко І. М.,* Чигиринець О. Е.

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», Київ, Україна
Moskaa11@gmail.com

Попередньо отриманий розчин антоціанів фільтруємо через целюлозномембранний фільтр з діаметром пор 0,45 мкм. Для модифікації використовували такі розчини кислот: винна кислота, яблучна кислота, саліцилова кислота, суміш саліцилової та винної кислот.

До модельного розчину додається кислота у співвідношенні (об/об): 50:1 20:1, 10:1, 5:1 та струшують протягом 24 години при частоті 200 грм при кімнатній температурі (20–25 °С). Після чого розчин центрифугують при 4000 грм протягом 30 хвилин та знімають над осадову рідину для аналізу розчину. Для контролю утворення копігментних комплексів використовували метод УФ-спектрометрії. Спектр отримували в двох діапазонах 420–800 нм та 240–400 нм.

Антоціановий барвник має ярко виражений пік у діапазонах 475–625 нм та 260–295 нм. При утворенні копігментних комплексів в антоціанових барвниках інтенсивність та форма піків на спектрах може змінюватись як за формою так і за інтенсивністю. Після модифікації винною кислотою пік у діапазоні 475–625 нм має інтенсивність 0,47 А та у діапазоні 260–295 пік 0,5 А, що свідчить про утворення копігментних комплексів у розчині барвника. Розчин який модифікували яблучною кислотою у діапазонах 475–625 нм та 260–295 нм має однакову інтенсивність зі спектром після модифікації винною кислотою, що свідчить про схожу структуру утворених копігментних комплексів. Розчин модифікований саліциловою кислотою має інтенсивність піку у діапазоні 475–625 нм 0,45 А та у діапазоні 260–295 має інтенсивність 1,0 А та змінену форму у вигляді хвилястого плато. Розчин який модифікували сумішшо саліцилової та винної кислот має інтенсивність у діапазоні 475–625 нм 0,44 А та у діапазоні 260–295 нм має пік у вигляді хвилястого плато інтенсивністю 0,8 А. Різниця форми та інтенсивності піків при використанні сумішші кислот свідчить про утворенні різних форм копігментних комплексів за рахунок використання декількох типів комплексо-утворювачів.

Для визначення впливу копігментних комплексів на розчин барвника було досліджено стійкість барвника до зміни рН середовища та впливу температури. Для підвищення рН середовища використовували 0,01М розчин NaOH. Розчин барвника без модифікації почав змінювати колір при досягненні рН 4,01–4,03, що свідчить про руйнування структури антоціанів. Модифікований розчин саліциловою кислотою змінює колір при рН 7,31. Після модифікації яблучною кислотою барвник втрачає колір при рН 7,20. Модифікований розчин винною кислотою втрачає колір при рН 7,21. В результаті модифікації розчину сумішшо кислот стійкість барвника спостерігалась до рН 7,05.

Усі досліджувані зразки помістили до камери шафи та вирівняли температуру до 25 °С. Підвищення температури відбувалось поступово 5 °С/год для рівномірного прогріву проби. Розчин барвника без модифікації змінює колір при температурі 40 °С, що свідчить про розпад молекул антоціанів. Розчин, який модифікували сумішшо кислот, змінює колір при температурі 45 °С. Розчини, що модифікували яблучною кислотою та винною кислотою змінили колір при 55 °С та розчин модифікований саліциловою кислотою змінює колір при 60 °С. Отже, утворення копігментних комплексів має позитивний вплив на стійкість антоціанових барвників при підвищених температурах.

Отже, в результаті дослідження можна стверджувати, що після модифікації антоціанового барвника органічними кислотами у розчині утворюються копігментні комплекси. Копігментні комплекси підвищують стійкість барвника до впливу температури та зміни рН середовища при цьому повністю зберігають кольорові властивості розчину та безпечні для використання у харчовій промисловості.

ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕРМОСТІЙКИХ СКЛОКРИСТАЛІЧНИХ МАТЕРІАЛІВ

Нетреба О. О., Науменко С. Ю., Салей Ан. А.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»

Дніпро, Україна

netreba.olga@gmail.com

Традиційна технологія виготовлення жаро- і термостійких склокристалічних матеріалів (СКМ) є енергоємною і дорогою, що ускладнює використання їх для зазначених цілей. Менш дорогою є технологія виробництва спечених ситалів з реакційно-формованою структурою (РФС).

Принцип отримання РФС складається у повному або частковому виключенні найбільш тугоплавкого оксиду зі складу базового скла та введення його у незначній кількості до складу порошкових композицій на основі цього скла. Формування кристалофазового складу СКМ відбувається в результаті хімічної взаємодії кристалічного наповнювача з аморфною складовою при спіканні композиційних сумішей.

Для отримання жаростійкого склокерамічного матеріалу з низьким значенням температурного коефіцієнту лінійного розширення (ТКЛР) були вибрані композиційні системи «скло $\text{Li}_2\text{O} \cdot 2\text{SiO}_2 - \text{Al}_2\text{O}_3$ », «скло $\text{Li}_2\text{O} \cdot 2\text{SiO}_2 - \text{каолініт}$ ».

За допомогою програми MathCAD були проведені розрахунки основних властивостей вибраних з літературного огляду 4-х складів літійвміщуючих стекел. Аналіз результатів показав, що розрахована математична модель дає можливість враховуючи умови, отримати склокристалічні матеріалів з необхідними властивостями. Розрахункова модель була підтверджена проведеними експериментами. Для подальшого дослідження були вибрані два вихідних скла, що більш відповідають вимогам до матеріалу, який необхідно отримати.

Суміш складалась з тонкодисперсного порошку вибраних стекел і оксиду алюмінію у визначеному співвідношенні. Зразки з отриманої керамічної маси спікали при температурних режимах 580 та 1040 °C протягом 3-х годин. Подальше дослідження було направлено на визначення основних властивостей цього матеріалу (водопоглинання, уявна щільність, поруватість, ТКЛР, ТПР). А також були проведені тонкі методи дослідження – ДТА, РФА.

Аналіз отриманих результатів показав, що матеріал з данної суміші не достатньо відповідає вимогам СКМ. Так ТКЛР має значення в межах $20-40 \cdot 10^{-7} \text{град}^{-1}$; поруватість – 4–10 %; уявна щільність до 2 г/см^3 ; водопоглинання 8 %. Тому рекомендовано продовження досліджень з додаванням у суміш інших компонентів-катализаторів та з визначенням оптимальних співвідношень основних матеріалів композицій.

**РОЗРОБКА ЗНОСОСТІЙКИХ ПРОТЕКТОРНИХ ПОКРИТТІВ
ДЛЯ КЕРАМОГРАНІТУ***Новосьолова Л. О.¹, Саввова О. В.¹, Воронов Г. К.¹, Покроєва Я. О.²*¹Харківський національний університет міського господарства ім. О. М. Бекетова,
Харків, Україна²Приватне акціонерне товариство «Харківський плитковий завод»,
Харків, Україна
savvova_oksana@ukr.net

Інтенсифікація промислового виробництва та розвиток різних областей науки і техніки зумовлюють необхідність розробки матеріалів, які характеризуються спеціальними, іноді унікальними фізичними, хімічними та механічними властивостями. Властивості таких матеріалів дозволяють використовувати виробу із склокристалічними покриттями в складних умовах експлуатації при одночасній дії декількох руйнуючих факторів (різких перепадів температури, агресивних середовищ, абразивного зносу та різних видів випромінювання). З точки зору означених вимог експлуатації найбільш перспективними є зносостійкі склокристалічні покриття на основі багатокомпонентних оксидних систем, які дають можливість отримання різних кристалічних структур, що є основою абразивостійкості покриттів, які отримують в умовах швидкісного випалу. Використання зносостійкої керамічної плитки визначається класами та застосовується в залежності від призначення для облицювання приміщень різного призначення (від підлогу в ванних кімнатах та підлогу в метро і залізничних вокзалах).

Підвищення стійкості до стирання покриття може бути реалізовано шляхом введення до її складу тонкодисперсних сполук з високою абразивної стійкістю (корунд, циркон, баделеїт, воластоніт, кварц, кристобаліт) у кількості (не менше 10 об. %) Позитивний вплив на показники міцності покриття надають кристалічні фази муліту, вільеміт, ганіту, що мають кубічну або голчасту будову, та формуються в умовах направленої кристалізації в процесі термообробки покриттів.

Для синтезу фрит була обрана система $\text{CaO}-\text{BaO}-\text{ZnO}-\text{SiO}_2$. Дослідження кристалізаційної здатності синтезованої фрити дозволило становити, що після термічної обробки $1150\text{ }^\circ\text{C}$ фрита характеризується наявністю кристалічної фази гардістоніту, який характеризується високою твердістю та впливає на підвищення абразивостійкості поливи на основі фрити. Також у структурі присутній барієвий ортоклаз $(\text{KBa})(\text{Si}, \text{Al})_4\text{O}_2$. Наявність кристалічної фази барію у складі дослідної фрити також є додатковим чинником при забезпеченні абразивостійкості поливи та підвищення електроізоляційних властивостей. Дослідження структури при температурі $900\text{ }^\circ\text{C}$ спостерігаються зростки сферолітів, які сформовані на основі сиботаксичних груп, які є зародками кристалізації майбутніх кристалів. При підвищенні температури до $1050\text{ }^\circ\text{C}$ спостерігається процес формування на основі зародків клиновидних кристалів тетрагональної сингонії гардістоніту та моноклінних призматичних кристалів барієвого ортоклазу. При подальшому підвищенні температури при $1150\text{ }^\circ\text{C}$ спостерігається збільшення вмісту зародків, які формують зростки та коротко-стовбчатих кристалів гардістоніту, які розміщені під кутом один до одного. Ця обставина дозволяє стверджувати про армування скломатриці кристалами гардістоніту.

Із застосуванням розробленої фрити було отримане протекторне покриття для керамограніту. Зносостійкість протекторного покриття була визначена з використанням приладу «AbrasiMetro W3B» та відповідала категорії 4, що за EN ISO 10545 Ч.7 визначає доцільність його використання для приміщень з інтенсивним рухом (сходи і холи в житлових будинках, тераси, підлоги в офісах і готелях).

**ХІМІЧНА МОДИФІКАЦІЯ КАРТОПЛЯНОГО КРОХМАЛЮ
НЕОРГАНІЧНИМИ ОКИСНИКАМИ**

Подорожко В. Г., Должиков С. С., Авдієнко Т. М.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет», Дніпро, Україна
vikapodorozhko230100@gmail.com

У сучасному світі харчові добавки відіграють велику роль у нашому повсякденному раціоні. Без них важко уявити хоча б один продукт харчування. Серед них можна виділити декілька груп, які використовують найчастіше. Представниками однієї з таких груп є крохмаль та його модифікації. Крохмаль – полісахарид природного походження, який активно використовується у харчовій, паперовій, текстильній та інших промисловостях.

Крохмаль може бути 2-х видів: нативний та модифікований. Нативний крохмаль утворює густий непрозорий клейстер, не розчиняється у холодній воді, нестійкий до процесів заморожування та розморожування. Модифікований крохмаль одержують шляхом фізичної, хімічної та комбінованої обробки нативного крохмалю, властивості якого можуть бути змінені в залежності від потреби. Такими властивостями можуть бути: розчинність у холодній воді, утворення клейстерів з різною в'язкістю, термічна стабільність, стійкість до процесів заморожування та розморожування.

Основним методом модифікації крохмалю є хімічна модифікація – обробка кислотами, лугами, різними окисниками та їх комбінована дія. Однак, не дивлячись на широке використання та значну кількість способів модифікації, цей процес не достатньо вивчений, зокрема процес модифікації неорганічними окисниками. Окислені крохмалі одержують із застосуванням перманганату калію, бромату калію, гіпохлориту кальцію, пероксиду водню, йодної кислоти у присутності певної кількості води та при різному значенні рН і температури. У результаті обробки окисниками відбувається окиснення гідроксильних груп у карбонільні, а потім у карбоксильні групи. Крім цього, при проведенні процесу в кислому середовищі йде і розщеплення глюкозидних зв'язків з утворенням карбонільних груп.

Було проведено дослідження впливу калій перманганату на нативний картопляний крохмаль. Для проведення дослідів готували крохмальне молочко. Наважку крохмалю розчиняли у дистильованій воді, підігрівали до температури 30–50 °С, підкислювали соляною кислотою (1–3 % від маси сухої речовини) і при постійному перемішуванні додавали калій перманганат (0,15 % мас. від маси сухої речовини). Розчин ставили у термостат при заданій температурі та витримували протягом години. Після завершення процесу модифікації відмічали зникнення характерного фіолетового забарвлення суспензії та одержували модифікований крохмаль.

Перспективним є дослідження процесу модифікації нативного картопляного крохмалю з використанням якості окисника пероксиду водню. Даний метод є актуальним та безпечним аналогом калій перманганату. Змінними факторами експерименту нами були обрані: час, концентрація реагенту та температура реакції. В якості функції відгуку обрана в'язкість модифікованого крохмального молока, яка є важливим фактором при формуванні крохмального клейстеру. Встановлено, що підвищення концентрації та температури позитивно впливає на функцію відгуку – в'язкість крохмального молока, а підвищення часу модифікації впливає негативно. Проведена порівняльна характеристика властивостей зразків в залежності від умов їх одержання.

СИНТЕЗ ФОСФАТІВ МАГНІЮ ДЛЯ ВИКОРИСТАННЯ В ХАРЧОВІЙ ПРОМИСЛОВОСТІ

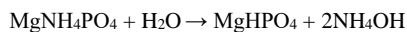
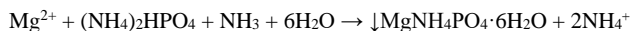
Пунько І. С., Василенко К. В., Ніколенко М. В.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет», Дніпро, Україна
punkarona@gmail.com

На даний момент в країнах Європейського Союзу в якості харчової добавки використовують фосфати та пірофосфати магнію. Вони використовуються в якості регуляторів кислотності, емульгуючих солей, фіксаторів забарвлення, вологоутримуючих агентів, стабілізаторів та синергістів антиоксидантів. Вітчизняного виробництва харчових фосфатів магнію в нашій країні не має, тому Україна використовує імпортовані.

Метою роботи було обрано вивчення процесів синтезу ряду фосфатних солей, а саме магнію фосфатів і пірофосфатів, та пошук технологічно доцільних умов їх промислового одержання. Результати таких досліджень дозволять розробити вітчизняну технологію одержання фосфатовмісних харчових добавок та зменшити залежність економіки країни від закордонних виробників.

Відомим способом одержання хімічно чистих фосфатів магнію є їх хімічне осадження з використанням термічної (високочистої) ортофосфатної кислоти та хімічно чистої солі магнію. Пірофосфати магнію одержують методом дегідратації відповідного гідрогенортофосфату при нагріванні:



Для вибору оптимальних умов осадження нами були розраховані діаграми розчинності всіх ймовірних осадів в системі Mg^{2+} – PO_4^{3-} – OH^- .

В результаті досліджень хімічного осадження фосфатів магнію в залежності від кислотності і молярного співвідношення Mg/P їх маточних розчинів було знайдено, що ступінь кристалічності осадів, також як і фазові склади, не залежить від мольного співвідношення Mg/P, а визначається кислотністю і температурою розчинів. Аналіз дифрактограм осадів MgHPO_4 , отриманих при pH 3–6, показав цікавий ефект зміщення рефлексів щодо довідкових даних в сторону зменшення 2θ на 0.3–0.45 градусів. Величина такого зсуву рефлексів не постійна, а зменшується в міру збільшення часу дозрівання осадів в маточних розчинах. Цю закономірність можна пояснити стисненням кристалічної ґратки при її формуванні в об'ємі раніше сформованого осаду. Збільшення міжплощинних відстаней при старінні осаду свідчить про зменшення такого стиснення і поступовий перехід структури осаду в її рівноважний стан.

Також нами розглянуто вплив на ізотерми розчинності надлишку солей магнію і іонної сили розчинів. Справа в тому, що фазові переходи фосфатів магнію при їх старінні в маточних розчинах супроводжуються закономірною зміною співвідношення Mg/P не тільки в осаді, а й в об'ємі розчину.

Проведені експерименти показали, що склад осадів добре співпадає з результатами розрахунків, що дозволяє рекомендувати умови осадження для промислового використання.

СКЛОМЕТАЛІЧНІ ПОКРИТТЯ ДЛЯ ЗАХИСТУ ХРОМОНІКЕЛЕВИХ СПЛАВІВ ВІД ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО ОКИСЛЕННЯ

Степаненко Г. Д., Нагорна Т. І., Голєус В. І., Салей Ан. А.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,

Дніпро, Україна

astepanenko821@gmail.com

Для короткочасного захисту від перегріву та окиснення при температурах понад 1500 °С конструкційних виробів з хромонікелевих та інших тугоплавких сплавів успішно використовуються металокерамічні та склометалічні покриття. Ці покриття одержують за шлікєро-обпалювальною технологією, яка передбачає нанесення покриттів з водного шлікєру та закріпленням їх на поверхні виробів обпалюванням при температурі до 1000 °С. Основними компонентами шлікєру є порошки боросилікатного скла та нікєлю. Скло в такій композиції є компонент, який при температурах обпалу утворює в'язкий розплав, що зв'язує тугоплавкі компоненти та забезпечує формування суцільного покриття.

Мета роботи – дослідити можливість одержання на основі скла в оксидній системі BaO-B₂O₃-SiO₂ жаростійких захисних покриттів для хромонікелевих сплавів.

Для експериментальних досліджень обрано три скла, в яких вміст компонентів змінювався в наступних межах (мол.%): 27–35 BaO, 15–38 B₂O₃, 35–50 SiO₂. Розрахункові дані (рис. 1) показують, що дослідні стекла за в'язкістю (η) та поверхневим натягом (σ) відповідають вимогам, які сприяють утворенню суцільних покриттів.

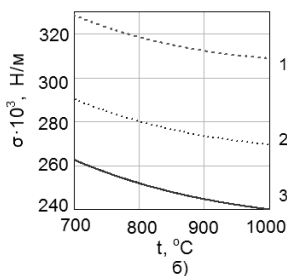
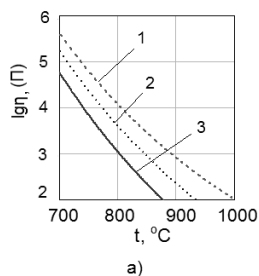


Рис. 1. Залежність в'язкості (а) і поверхневого натягу (б) розплавів дослідних стекел від температури.

Цифри біля кривих – номер скла

Водні шлікєра готували змішуванням в фарфорових кульових млинах порошоків скла (вміст варіювався в межах 10–40 мас.%) та нікєлю з додаванням 5 мас.% вогнетривкої глини. Для визначення властивостей покриттів дослідні шлікєра були висушені, сформовані з них напівсухим пресуванням зразки, які потім були спечені при температурі обпалювання покриттів (850 °С).

На виготовлених таким чином спечених зразках були визначені температурний коефіцієнт лінійного розширення ($\alpha \cdot 10^7 = 97\text{--}126 \text{ град}^{-1}$), відкриту поруватість ($P = 4\text{--}34\%$), уявну щільність ($d = 4,03\text{--}7,24 \text{ г/м}^3$) та водопоглинення ($B = 1\text{--}13\%$). Результатами експериментів було встановлено, що властивості дослідних спеків суттєво залежать як від кількісного вмісту скла в композиційній суміші, так і від властивостей його розплаву. Обробка експериментальних даних методом множинної кореляції показала, що зменшенню поруватості і водопоглинення спеків сприяє більший вміст скла в композиційній суміші, а також більш висока в'язкість розплаву скла та менший його поверхневий натяг. Збільшення вмісту скла у композиційній суміші обумовлює також і зменшення значень температурного коефіцієнта лінійного розширення. Проте значення α знаходяться в межах, які є допустимими при одержанні склометалевих покриттів на хромонікелевих сплавах.

УСОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ СИНТЕЗА АЦЕМИДОФЕНА

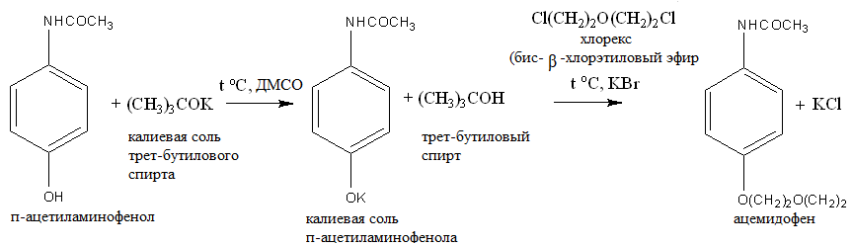
Бушуев А. С.¹, Шапкин В. П.², Мороз О. В., *Стрельцова С. В.*¹, Піддубна К. Ю.¹¹ДЗ Луганський державний медичний університет (м. Рубіжне), Україна²Інститут хімічних технологій Східноукраїнського національного університету ім. Володимира Даля (м. Рубіжне), Україна

bushuev@i.ua

streltsova.jn27@gmail.com

Известно, что ацемидофен ([бис-β-(4-ацетиламинофенилокси) этиловый эфир]) встречающийся также под названием «дифенид», «корибан», ацетвикол» является малотоксичным препаратом обладающим высокой эффективностью при лечении гельминтных заболеваний у животных. Кроме того, на его основе получают некоторые сульфаниламидные препараты используемые для получения препаративных форм медицинского назначения.

Исходя из литературных данных и патентных источников, исходным продуктом в синтезе ацемидофена является очищенный бензол коксового газа, который образуется при коксовании каменного угля. Нитрованием бензола получают моонитробензол, который при последующем восстановлении в щелочной амальгамной среде образует фенилгидроксиламин. Перегруппировка гидроксиламинной группы приводит к синтезу *p*-аминофенола, который затем подвергают ацилированию с образованием 4-ацетиламинофенола. 4-Ацетиламинофенол далее взаимодействует с трет-бутилатом калия [(CH₃)₃СОК] в среде диметилсульфоксида (ДМСО) при температуре до 90 °С с последующей стадией обработки полученной калиевой соли *p*-ацетиламинофенола хлоресом (он же 2,2'-дихлорэтиловый эфир) в присутствии бромистого калия (КВr) при кипении реакционной массы по следующей схеме:



К недостаткам существующей технологии получения ацемидофена можно отнести использование щелочных металлов (К или Na), что связано с обслуживанием взрывобезопасного оборудования в производственном взрывоопасном процессе (при получении алкоколятов) и энергозатратами, обусловленными применением обезвоженных (абсолютных) спиртов.

Для упрощения процесса получения ацемидофена с одновременным исключением упомянутых недостатков разработана усовершенствования технология синтеза взаимодействием *p*-ацетиламинофенола в щелочно-органической (диметилформамидной – ДМФА) среде с последующим воздействием на образующийся раствор *p*-ацетиламинофенолята калия хлоресом в присутствии бромистого калия (КВr) при температуре от 50–60 °С до кипения реакционной массы.

Усовершенствование технологии позволяет упростить процесс синтеза и получать ацемидофен с повышенным выходом (на 5,8 %), который после перекристаллизации имеет $T_{пл.}$ 160–161 °С и соответствует по качеству продукту, синтезированному в условиях патента США (US3862226А).

**ПРОМИСЛОВЕ ОСУШЕННЯ ОРГАНІЧНИХ РОЗЧИННИКІВ В ЦЕОЛІТОВИХ
УСТАНОВКАХ**

Тараненко І. В., Сияньський С. В., Поджарський М. А.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, Дніпро, Україна
ireni.tv133@gmail.com

Сучасне виробництво хімічних речовин в інтересах ракетної промисловості вимагає застосування розчинників підвищеної чистоти. Так, вміст води у деяких не може перевищувати сотих та навіть тисячних часток відсотку. Ці суворі вимоги потребують використання у промислових технологіях новітніх способів осушення, які ще вчора вважалися суто лабораторними. До таких відноситься осушення органічних розчинників за допомогою цеолітових поглиначів. Цей спосіб добре відомий хімікам-дослідникам, але промислові цеолітові установки на ринку хіміко-технологічного обладнання з'явилися порівняно недавно.

Метою даного дослідження було вивчення можливості впровадження цеолітових установок провідних європейських компаній-виробників у технологію виготовлення деяких металоорганічних регуляторів горіння сумішевого твердого ракетного палива. Об'єкт дослідження – процеси осушення ізопропанолу і метиленхлориду.

Дослідження проводили методом теоретичних розрахунків. Вихідні дані, зокрема ізотерми адсорбції указаних розчинників цеолітами, отримали шляхом аналізу наукових публікацій відомих у світі дослідницьких груп.

Обчислення проводили, використовуючи методи розрахунків промислових адсорберів, відаючи перевагу методиці Н.А.Шилова.

В ході дослідження отримані такі результати. Для продуктивності за розчинником 2000 кг/доб час адсорбції складає 58 годин для ізопропанолу, та 67 годин для дихлорметану. Висота шару цеоліту – 2,6 м, маса цеоліту – 1600 кг, що відповідає технічним даним промислових цеолітових установок, які випускаються, наприклад, компанією Silica Verfahrenstechnik GmbH (Німеччина).

Отримані результати дозволяють зробити висновок про те, що новітні промислові цеолітові установки вже сьогодні можуть бути використані у проєктованих виробництвах компонентів ракетного палива.

**MECHANICAL PROPERTIES
OF GALVANIC METALOXIDE Fe-Co-MoO_x COATING**

Tur Yu. I., Sakhnenko M. D., Ved` M. V., Yermolenko I. Yu., Karakurkchi G. V.
National Technical University "Kharkiv Polytechnic Institute",
Kharkiv, Ukraine
organick@ukr.net

The paper discusses the results of testing the mechanical properties of metal oxide galvanic Fe-Co-MoO_x coatings deposited onto a mild steel from a complex citrate bath contain, g/dm³: Na₃C₆H₅O₇ × 2H₂O – 95–100; Fe₂(SO₄)₃ × 9H₂O – 30–45; Na₂MoO₄ × 2H₂O – 15–25; CoSO₄ × 7H₂O – 30–45; Na₂SO₄ – 15–45; H₃BO₃–6. Electrolysis was carried out in a galvanostatic mode at a current density $i = 2.5\text{--}3$ A/dm².

Elemental composition and morphology of coatings were determined by energy dispersive X-ray spectroscopy. Surface roughness was determined as the arithmetic mean of R_a in accordance with international standards ISO 4287/1 according to the results of research by atomic force microscopy. Thermal stability was tested by heating the samples from 25 to 800 degrees in air. The microhardness of the coatings and the substrate material (mild steel) was determined by the Vickers method on a PMT-3 hardness tester at loads $P = 0.02\text{--}0.2$ kg and a holding time of 10 s.

The deposited coatings are characterized by a high oxygen content both on the hills (21 Fe, 22 Co, 26 Mo, and 31 O at.%) and in the valleys (16 Fe, 17 Co, 20 Mo and 47 O at.%), which is confirmed by the data SEM analysis and indicates the inclusion of molybdenum oxides MoO_x in the alloy structure. This makes it possible to consider Fe-Co-MoO_x coatings as composite materials. The obtained coatings demonstrate high adhesion to the substrate material and retain it under mechanical loads, such as polishing, fracture at an angle of 90°, preparation of cross-sections, etc., which is confirmed by the results of metallographic studies. The results of atomic force microscopy studies indicate the formation of a globular structure of the coating surface with spheroid sizes of 2–3 μm. The surface roughness R_a is defined as 0.15, which allows us to relate the obtained materials to the 9–10 class of roughness. Heating samples with Fe-Co-MoO_x coating to 800 °C in air showed that the coatings are thermally stable in the temperature range from 25 to 600 degrees (Fig. 1). The formation of scale is observed on the surface of the samples and an increase in the mass of the samples at an increase in the annealing temperature to 700 degrees (Fig. 1f).

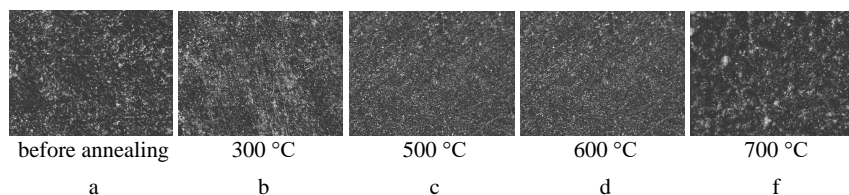


Fig. 1. Images of the samples with Fe-Co-MoO_x coating before (a) and after (b-f) heat treatment. The thickness of the coatings is 20 μm. Magnification ×40

The microhardness of samples with ternary coating is 595–630 kgf/mm², which is 2.5–3.5 times higher than those of the substrate material and 1.5 times higher than the microhardness of binary coatings.

Thus, high indicators of microhardness and thermal strength of composite coatings of the Fe-Co-MoO_x system make it possible to consider these coatings as protective and strengthening materials.

ФОРМУВАННЯ ТУГОПЛАВКИХ СПОЛУК ПРИ СПІЛЬНОМУ СПАЛЮВАННІ ВУГІЛЛЯ РІЗНОГО МЕТАМОРФІЗМУ І СОЛОНОСТІ

Шендрік Т. Г.¹, *Фатеев А. І.*²

¹Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАНУ, Київ, Україна

²Інститут вугільних енерготехнологій НАНУ, Київ, Україна

antonfateev86@gmail.com

Викопне вугілля належить до неповновлених джерел енергії, а придатні до безпроблемного використання його поклади в світі вже майже вичерпані. Людство змушене залучати до енергетичного використання все менш якісне паливо та відходи (вуглецевмісні відходи, торф, низькоякісне вугілля, вуглецеві суміші різного походження тощо). Тим не менш, вугілля як складова паливної бази ще довгі роки буде відігравати в енергетиці багатьох країн світу (Китай, США, Польща, РФ, Казахстан, Австралія тощо) значну роль. Незважаючи на проблеми (шлакування, швидка корозія), що виникають при спалюванні вугілля з високим вмістом солей (Na_2O у золі $>2\%$), так званого «солоного» вугілля (СВ), воно залишається реальним енергоносієм не тільки в Україні, але й у США, Австралії, Китаї та Польщі [1].

Перспективним способом використання СВ вважається його спалювання з вугіллям, що має вищу температуру плавлення золи, тобто, з таким, що не утворює низько плавких евтектик через малий вміст лужних солей. Для експериментів обрано солоне довгополум'яне вугілля Старобільської промислової площі та пісне (П) вугілля Кузбасу, що використовується наразі на українських ТЕС.

Таблиця. Технічні характеристики зразків дослідженого вугілля

Вугілля	Зольність A^d , %	Вихід летких V^{daf} , %	Вологість W, %	Вміст Na_2O у золі, %	Сірка, S^{daf} %
Старобільське солоне	7,3	43,7	20,3	6,5	2,8
Пісне несолоне	12,2	17,9	1,1	0,7	0,5

Експерименти зі спалювання сумішей 50:50 та 60:40 (П:СВ) показали наявність неаддитивності, оскільки золі сумішей при цьому утворюється більше, ніж теоретично розраховано. Тобто, має місце відчутний синергетичний ефект, що може свідчити про утворення в процесі термолізу ($850\text{ }^\circ\text{C}$, 2 год) сумішей нових мінеральних сполук.

З використання рентгенофазового аналізу (РФА) зол та програми MATCH! встановили, що більшість інтенсивних рефлексів на дифрактограмах обох типів вугілля відповідають мінеральним фазам, які відносяться до групи оксидів – SiO_2 , Fe_2O_3 , Fe_3O_4 та Al_2O_3 . В значній кількості визначені ангідрит (CaSO_4), силікат кальцію (CaSiO_3), алюмосилікат (Al_2SiO_5) тощо. Особливу увагу заслуговують результати з визначення мінеральних фаз за участю натрію У порівнянні з солоним вугіллям у зольному залишку суміші спостерігається значно менша кількість силікату (Na_2SiO_4) та сульфату натрію (Na_2SO_4). Натомість помічено появу більш складних та тугоплавких мінералів – нефелінів (NaAlSiO_4 , $\text{KNa}_3(\text{AlSiO}_4)_4$, $\text{K}_{0.86}\text{Na}_{0.16}\text{AlSi}_2\text{O}_6$) та ультрамарину ($\text{Na}_7\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24}\text{S}_3$), а також інших нових сполук – комбіту (NaCaSiO_4) та алюмінату натрію (NaAlO_2 , $\text{Na}_2\text{Al}_2\text{O}_4$). Одержані результати дають реальні підстави вважати, що реальним напрямом використання вітчизняного солоного вугілля може стати його спільне спалювання з іншим вугіллям, що не має в своєму складі підвищеного вмісту Na та Cl. При цьому вирішуються і такі проблеми як от зниження у суміші загального вмісту солей, формування тугоплавких натрієвих сполук, підвищується загальна реакційна здатність сумішевого палива.

1. Іванова А.В. Генезис і еволюція солоного вугілля України та проблеми його освоєння // Дис. на здобуття наук. с. докт. геол. наук. – Київ. – 2016. – 336 с.

ІННОВАЦІЙНІ НАПРЯМКИ РОЗРОБКИ СКАФФОЛДІВ ДЛЯ ЗАМІЩЕННЯ КІСТКОВОЇ ТКАНИНИ

Фесенко О. І., Саввова О. В., Байрамов Е.

Харківський національний університет міського господарства ім. О. М. Бекетова,
Харків, Україна
savvova_oksana@ukr.net

Лікування дефектів кісткових тканин, отриманих в результаті механічних травм, вроджених аномалій або хірургічних втручань, продовжує залишатися актуальною медичною та соціальною проблемою. Розвиток тканинної інженерії сприяє появі альтернативних підходів до відновлення кісткової тканини, які потенційно можуть вплинути на повсякденну клінічну практику. На сьогоднішній день методи тканинної інженерії дозволяють створювати скаффолди (каркаси майбутніх тканин), які не поступаються, а за рядом характеристик і перевершують ауто- і алотрансплантати кісткової тканини.

Виробництво сучасних біокомпозитних скаффолдів являє собою складний процес, що враховує багато критеріїв – біосумісність і низьку імуногенність, механічну міцність, контрольовану біорезорбцію, остеоіндуктивність, остеоіндуктивність, певні поверхневі властивості, пористість і особливо васкуляризація. Основні вимоги, які пред'являються до сучасних матеріалів для створення скаффолдів: повна біологічна сумісність; об'ємна пориста структура, що підтримує міграцію, заселення та подальшу життєдіяльність клітин; визначені механічні та фізико-хімічні властивості.

Перспективну групу імплантів для заміщення кісткової тканини представляють скаффолди четвертого покоління – полімер-керамічні композитні з включенням остеогенних клітин, чинників росту або кісткових морфогенетичних білків. Найбільш ефективним у якості основи мінеральної складової кісткової тканини у структурі скаффолду є використання апатитвмісних склокристалічних матеріалів, які характеризуються комплексом медико-біологічних, фізико-хімічних та технологічних властивостей, які наближені до кісткової тканини.

Основною гіпотезою при розробці біоактивних склокристалічних матеріалів є створення кальційсилікофосфатної скломатриці з регульованими строками резорбції. Це досягається шляхом: забезпечення, тонкодисперсної кристалізації скла з утворенням біоактивних фаз фосфатів кальцію (ГАП та КАП) при співвідношенні $\text{CaO} : \text{P}_2\text{O}_5 = 1:4$: досягнення визначеного рівня розчинності матеріалу, необхідних для протікання процесу апатитоутворення на його поверхні *in vivo*; зміцнення її структури шляхом ситалізації.

Наступним важливим етапом створення скаффолду є проектування бімодальної пористої структури склокристалічного матеріалу з визначеним розподіленням пор у кортикальному (зовнішньому шарі) та трабекулярному (внутрішньому) шарі імплантату відповідно до архітекtonіки кісткової тканини дозволяє стимулювати процес регенерації нової кістки.

Одержання бімодальної структури реалізується методом дублювання полімерної матриці. Структура матеріалу представлена зовнішнім щільним шаром (кортикальним) який містить близько 10 об. % каналних пор з діаметром $5 \div 100$ мкм, необхідних для проростання і закріплення остеобластів, а також губчастим центральним шаром (трабекулярним), в якому знаходиться близько $80 \div 90$ об. % пор з розмірами $100 \div 1000$ мкм, що вміщують кровоносні судини і кістковий мозок.

Створення скаффолдів на основі біоактивних склокристалічних матеріалів дозволить отримати імплантати з розвиненою каналною структурою, що є умовою створення в живому організмі єдиної клітинної структури.

СОРБЦИОННАЯ АКТИВНОСТЬ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ШЛАКОВ

Хоботова Э. Б., Грайворонская И. В., Горенко Ю. В.Харьковский национальный автомобильно-дорожный университет, Харьков, Украина
elinahobotova@gmail.com

Отходы металлургической промышленности содержат минеральные фазы, обладающие сорбционной активностью. Цель исследований – обоснование сорбционных свойств шлака Побужского ферроникелевого комбината. Используются современные методы анализа: рентгенофазовый (определение минерального состава шлака, главный минерал диопсид $\text{Ca}(\text{Mg,Fe,Al})(\text{Si,Al})_2\text{O}$), электронно-зондовый микроанализ (особенности структуры поверхности частиц; элементный состав, который соответствует минеральному составу шлака по главным минералообразующим элементам), гамма-спектрометрический (определена удельная эффективная радиоактивность, не превышающая 120 Бк/кг, что определяет I класс радиационной опасности и возможность использования шлака без ограничений в технологиях), спектрофотометрический (сорбционная емкость). Сорбционная активность шлаков выше при наличии аморфного состояния веществ, что подтверждается наличием волнообразных участков на дифрактограммах. Косвенным подтверждением присутствия аморфных фаз также может служить кислотность диопсида. Кислые расплавы при затвердевании образуют аморфное состояние, что подтверждено микрофотографиями.

Сорбционная активность шлака исследована с использованием в качестве сорбата красителя метиленового синего (МС). Предварительно шлак активировался в 0,5 М H_2SO_4 , для данной активатора отмечено наибольшее разрыхление поверхности. При проведении сорбции МС отношение $\frac{m_{\text{шлака}}}{V_{\text{МС}}} = 5 \text{ г} : 100 \text{ мл}$ при концентрации $C_{\text{МС}} = 0,01 \text{ г/л}$. Время сорбции 3 суток в статических условиях достаточно для установления обменного равновесия. Сорбционную обменную емкость шлака (СОЕ) рассчитывали по формуле:

$$\text{СОЕ} = \frac{(C_1 - C_2) \cdot V}{m}, \text{ мг/г},$$

где C_1 и C_2 – соответственно концентрации МС до и после сорбции, мг/л; V – объем раствора, л; m – масса сорбента, г.

Наивысшая сорбционная емкость достигается при кислотной активации шлака при 20 °С. Так как СОЕ шлака во времени увеличивается, то для определения ее максимального значения проводили сорбцию МС в течение 20 суток в статических условиях. Через 10 суток достигается $\text{СОЕ} = 0,194 \text{ мг/г}$, соответствующая 97 %-ой эффективности очистки раствора от МС.

Сорбция МС на шлаке ПФК эффективная с образованием прочных связей, что подтверждается практическим отсутствием десорбции МС из отработавшего сорбента, выдержанного в дистиллированной воде в течение 1 месяца. МС десорбировался в воду с установлением концентрации 0,0003 г/л, что соответствует уменьшению емкости шлака на 5,56 %. Предварительной практической рекомендацией может быть использование шлака при очистке промывных вод в текстильной промышленности. При концентрации красителей в промывных водах 0,48–4,8 мг/дм³ и максимальном значении СОЕ шлака ПФК 0,194 мг/г для очистки 10 м³/сут промывных вод потребуется 25–250 кг шлака.

ЗАГРЯЗНЕНИЕ ТЯЖЁЛЫМИ МЕТАЛЛАМИ ПОЧВ ВБЛИЗИ ТЭС

Яровой Я. К., Игнатенко М. И.Харьковский национальный автомобильно-дорожный университет, Харьков, Украина
chemistry@khadi.kharkov.ua

Одним из самых крупных загрязнителей окружающей среды в Харьковской области является Змиевская теплоэлектростанция (ТЭС). Загрязнение атмосферы Змиевской ТЭС происходит в результате выбросов продуктов сжигания топлива и пыления золоотвала. Зола, выдуваемая из золоотвалов, способна создавать в почве концентрации тяжелых металлов (ТМ) в несколько раз большие, чем за счёт выбросов из труб. Поступление ТМ из золоотвала также возможно с ливневым стоком при выщелачивании ТМ из шлаков и смывании высокодисперсных фракций золы. Поэтому целью работы было определение особенностей распространения ТМ от Змиевской ТЭС, изучение процессов аккумуляции ТМ в почвах данной территории и влияния pH на эти процессы. Территория для исследования выбрана с учётом наличия различных почв и различных видов их использования, а также расстояния от объекта загрязнения (от 300 м до 25 км). Для исследования были выбраны ТМ, которые являются биологически активными или относятся к токсичным загрязнителям различного класса опасности: 1-й – Pb, Zn, Cd; 2-й – Co, Ni, Cu, Cr; 3-й – V, Sr.

Концентрации ТМ в водной вытяжке из почвы определяли атомно-эмиссионным спектральным анализом, атомно-абсорбционным анализом и методом капиллярного электрофореза. Для определения состава твердой неорганической части почв использован рентгенофазовый анализ. Определены следующие малорастворимые соединения в образцах почв: $Zn_2V_2O_7$, $Zn_3(VO_4)_2$, $Zn(VO_3)_2$, $Pb(VO_3)_2$, $4PbO \cdot V_2O_5$, $Pb_3(VO_4)_2$, $PbCrO_4$, $PbCr_2O_7$, $SrCrO_4$, $SrCr_2O_7$, $Sr(VO_3)_2$, $Ni_2V_2O_7$.

Подвижность ТМ определяется в любой почве значением pH, поскольку катионные формы более подвижны в кислой среде, а аниогены – в почвах с повышенным значением pH. Рассмотрена зависимость pH от макросостава почв и влияние некоторых ТМ на pH среды. Наибольший коэффициент корреляции между pH почвы и микроэлементами установлен для Fe, Al, Si.

Анализ полученных данных по содержанию ТМ в почвах на территории влияния выбросов Змиевской ТЭС показал, что наиболее распространёнными загрязнителями территории района является Cu, Sr, Co, V, Cr. Уровень загрязнения определялся при сравнении полученных результатов содержания элементов с кларковыми значениями для почв. Для определения степени загрязнённости использован коэффициент концентрирования загрязнения почвы $K_c = C/ПДК$, где C – общее содержание загрязняющих веществ, а ПДК – предельно-допустимая концентрация загрязняющих веществ. Согласно полученным результатам и рассчитанным значениям K_c вблизи ТЭС все почвы относятся к сильнозагрязнённым. В приведенном ряде указан разброс значений K_c , а в скобках – значения K_c в 10 км от Змиевской ТЭС: V 0,05-2 (0,13); Co 0,5-6 (1); Cu 2-16,7 (4,7); Ni 1-12,5 (1,5); Pb 0,2-1,6 (0,38); $Pb_{подвиж}$ 1-8,3 (2); Cr 1,7-33,3 (0,43); Zn 0,5-6 (0,52). Установлено, что в 10 км почва является сильнозагрязнённой по Cu и подвижной форме Pb. По Co и Ni она среднезагрязнённая, по другим металлам уровень загрязнения еще меньше.

Таким образом, наиболее загрязнённой является территория, расположенная от источника выброса в радиусе 10 км. Основными загрязнителями являются Cu, Sr, Co, V, Cr, что является закономерным: V, Cr является аниогенами, кислотные остатки образуются в слабощелочных почвах и с ТМ образуют нерастворимые или малорастворимые соединения, что приводит к их накоплению. Данная закономерность прослеживается и для Cu, Sr, Co.

**CHEMICAL EDUCATION /
ХІМІЧНА ОСВІТА**

ВИКОРИСТАННЯ ІННОВАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ НА ЗАНЯТТЯХ АНАЛІТИЧНОЇ ХІМІЇ

Бараняк О. Г.

ВСП «Львівський фаховий коледж харчової і переробної промисловості
Національного університету харчових технологій», Львів, Україна
olhabaranyak@gmail.com

Розвиток інформаційного суспільства поруч з його цифровізацією, яка проявляється у всіх аспектах життєдіяльності сучасної людини, ставить нові вимоги до процесу формування професійних навичок студентів. Застосування інноваційних технологій викладання в освіті через запровадження нових підходів з використанням смарт-технологій є необхідною умовою успішного засвоєння знань студентами сучасного суспільства.

На сьогоднішній день кожен викладач замислюється над проблемою: яким має бути сучасне заняття, як організувати і провести його так, щоб максимізувати рівень засвоєних знань? Адже ХХІ століття – час високих комп'ютерних технологій. Відтак, в умовах формування електронної культури передачі і пошуку інформації, зміщуються акценти та роль викладача в процесі навчання з гуру-транслятора нових знань до координатора інформаційного потоку. Для активного залучення уваги студентів при формуванні нових знань, викладачам необхідно володіти сучасними методиками та новими освітніми технологіями, щоб спілкуватися на одній мові зі студентами. Однією з основних частин інформатизації освіти є використання інформаційних технологій в освітніх дисциплінах.

При вивченні аналітичної хімії доцільно використовувати різні засоби навчання: готові мультимедійні програми, створювати власні розробки за допомогою програмного забезпечення. Серед величезного різноманіття навчальних мультимедійних систем умовно можна виокремити засоби, які є найбільш ефективними: *мультимедія-презентації та відео-демонстрації*.

Мультимедія-презентації – це один з найбільш функціональних та ефективних засобів під час проведення лекцій з аналітичної хімії.

Варто відзначити, що відео-демонстрації та інші мультимедійні засоби не можуть зовсім замінити справжній, «живий» хімічний експеримент. Але у випадку відсутності певного обладнання (спектрофотометра, нефелометра, різних хроматографів, полярографа, кондуктометра) це дає можливість з'ясувати будову, принцип дії та техніку використання приладів при різних дослідженнях та підвищити рівень засвоєння знань.

Відео-демонстрація є фрагментарною і не пов'язана з певною методикою викладання теми. Наприклад, викладач має можливість продемонструвати весь метод дослідження або його фрагмент. Використання відео-демонстрацій через технічну можливість її призупинити чи повторити, дозволяє зосередити увагу на важливих моментах при вивченні кожного методу аналізу та наочно усвідомити роль кожного з них у виробництві харчової продукції.

Використання комп'ютерних технологій при вивченні аналітичної хімії в коледжі відкриває широкі можливості для створення та використання складного наочно-демонстраційного супроводу на лекційному занятті або при виконанні лабораторної роботи, дозволяє зробити заняття сучасним, впливає на зростання професійної компетентності викладачів, сприяє розвитку самостійності, творчих здібностей студентів, спрощує процес сприйняття інформації та підвищує якість освітніх послуг. Заняття з використанням ІКТ є одним з найважливіших результатів інноваційної роботи в нашому коледжі.

ЕЛЕМЕНТИ ІГРОВИХ ТЕХНОЛОГІЙ ЯК ЗАСІБ ПІДВИЩЕННЯ ЯКОСТІ НАВЧАННЯ З ХІМІЇ

*Біла Г. М.*¹, Антрапцева Н. М.²

¹Національний університет харчових технологій, Київ, Україна

²Національний університет біоресурсів і природокористування України, Київ, Україна
aspirant_nubipu@ukr.net

Для підвищення ефективності та якості засвоєння навчального матеріалу з хімії традиційно застосовують різноманітні методи, прийоми, та засоби. Один з них – впровадження в навчальний процес дидактичних ігор. Сучасних студентів вже не задовольняє роль тільки пасивних слухачів на занятті, їм не цікаво переписувати з підручника, записувати під диктовку або списувати з дошки готові рішення. Вони очікують нових форм ознайомлення з новим матеріалом, в яких могли б втілитися їх активність, діяльний характер мислення, тяга до самостійності.

Одним з відомих, але необґрунтовано забутих нетрадиційних видів навчання є, на наш погляд, гра-кросворд, яка містить в собі великі можливості для розвитку творчих здібностей. Складання кросвордів, зокрема хімічних, є одним з видів самостійної роботи, яка готує студентів до безперервної освіти, добування нової інформації протягом всього життя.

Функція складання кросвордів, як форми самостійної роботи, полягає у формуванні вміння добувати та відбирати фактичний матеріал; робити власні узагальнення, висновки; давати пояснення; використовувати та викладати набуті знання.

Основне значення кросворду виявляється у формуванні у студентів почуття самостійності, творчості, винахідливості у наданні формі кросворду деякої оригінальності та незвичайності. Під час складання кросворду студенти використовують не лише текст підручника, а й довідники, енциклопедії, таблиці, ілюстрації, інтернет-джерела тощо. Пошук матеріалу для складання кросворду – засіб у навчанні, який дозволяє, спираючись на знання, вміння, навички, що мають студенти, ставити перед ними творчу пошукову задачу.

Підтримка пізнавальної активності студентів в процесі контролю за рівнем знань – важлива умова успішності навчального процесу. Але відомо, що повторне відтворення студентами навчального матеріалу, будучи важливим в плані закріплення і контролю, знижує зацікавлення предметом якщо проводиться дублюючим чином та в формі простого повторення. Активізувати опитування студентів можуть цікаві форми перевірки засвоєння фактичного матеріалу – кросворди, загадки, ігри-хвилинки тощо.

Нами розроблений і апробований сценарій підготовки, організації та проведення дидактичної гри – конкурс «Хімічний кросворд». Тематика конкурсу для студентів певних напрямків навчання і спеціальностей обирається з врахуванням елементів професійної спрямованості і відображує міждисциплінарні зв'язки.

Найголовніше, щоб складання кросворду викликало у студента живе зацікавлення, захоплювало його своєю зовсім особливою інтригою, було здатним розпалити в його душі іскру азарту.

Немає сумніву в тому, що цей конкурс є елементом навчальної, виховної, педагогічної технології, оскільки елементами освітньої системи є не тільки зміст, викладання та навчання, але й чітко визначена навчальна діяльність студента як системна властивість.

Застосування елементів ігрових технологій (кросворди, загадки тощо) ні в якому разі не заперечує використання інших методів та засобів навчання, а лише доповнює їх, сприяючи підвищенню якості навчання.

ОСНОВНІ ПРОБЛЕМИ У ВИКЛАДАННІ ХІМІЇ ОНЛАЙН

Майорова О. Р.

Харківський національний університет імені Г. С. Сковороди, Харків, Україна
olyamayorova1999@gmail.com

Хімія – це саме та наука, яка потребує великих пояснень та демонстрацій.

На початку наведемо, плюси які ми можемо виділити у вивченні хімії онлайн:

1. Навчальний процес ведеться вдома, і батьки можуть при бажанні спостерігати за ним;
2. Виключена трата часу на збори і дорогу, не потрібно оплачувати автобус або таксі, не потрібно йти пішки, в цей час краще зробити корисну справу;
3. Заняття по інтернету набагато дешевше, ніж звичайні заняття з репетитором;
4. Можна повторно переглянути конспект заняття після його завершення;
5. Вибір викладачів не обмежується однією країною, можна вибрати репетитора з-за кордону.

6. Унікальна можливість підлаштувати темп навчання під себе

- 7 Можна виявити слабкі сторони дитини під час навчання і працювати над ними.

Багато того, чому ми навчаємось ще з дитинства, відбувається через реєг-to-реєг learning – взаємне навчання. Дорослішання й відчуття приналежності до соціальної групи – Надважливо складових становлення для підлітків.

У звичайний житті діти вчать командної роботи, вирішенню конфліктних ситуацій та ефективної взаємодії одне з одним. В умовах дистанційного навчання в них не так много можливий здобути soft skills, які на Першому місці среди навичок XXI століття.

Зазвичай уроки в школі тривають з 8-ї до 14-ї, а далі на дітей чекають факультативи, спортивні секції. Карантин змусив школярів цілими днями просиджувати перед моніторами, а це негативно впливає на зір. Навіть враховуючи перерви на руханку й відпочинок.

3. Батьки – контролюють процес.
4. Замало практики. Що є не допустимо під час вивчення хімії. Учень повинен робити експерименти і бачити, що саме відбувається.
5. Відсутність дорослого авторитету і магії навчального процесу
6. Ми досі НЕ розробили єдину технологію переходу з офлайн в онлайн.
7. Відсутність соціалізації

РОЗРОБКА КУРСУ «ХІМІЧНА КІНЕТИКА» НА ПЛАТФОРМІ ДИСТАНЦІЙНОГО НАВЧАННЯ MOODLE

Мишук А. О., Гордєєва І. О., Мельниченко В. І.

Донецький національний університет імені Василя Стуса, м Вінниця, Україна
mishchuk.a@donnu.edu.ua

В останні роки сектор вищої освіти в усьому світі прийняв нові системи управління навчанням (LMS) для більш простого поширення, відстеження та управління навчальними програмами. Moodle (акронім від Modular Object-Oriented Dynamic Learning Environment) є однією з найпопулярніших навчальних платформ, безкоштовна і відкрита LMS. Вона широко використовується у багатьох галузях навчання, дає змогу користувачу налаштувати платформу відповідно до своїх цілей організації, проста у використанні і пропонує широкий спектр послуг як для викладачів, так і для студентів.

Метою даної роботи є розробка курсу «Хімічна кінетика» на платформі Moodle для вивчення дисципліни «Фізична хімія II» студентами III курсу СО «Бакалавр» спеціальності 102 «Хімія».

Структура курсу включає лекційний матеріал, лабораторні роботи, практичні і самостійні завдання, глосарій, тести для самоконтролю за темами «Формальна кінетика», «Кінетика складних реакцій», «Теоретичні уявлення хімічної кінетики». База тестових завдань включає питання закритого типу з однією та кількома вірними відповідями, на відповідність. Як вид підсумкового контролю запропоновано екзаменаційний тест, а також альтернатива екзамену у вигляді індивідуальних завдань, що передбачають розв'язок задач з усіх змістових модулів курсу. Для забезпечення наочності при вивченні дисципліни в онлайн-режимі здобувачам освіти запропоновано відеоматеріали до лабораторних робіт.

Розроблений дистанцій курс «Хімічна кінетика» протягом двох років активно використовується здобувачами освіти при вивченні дисципліни «Фізична хімія II». Аналіз тестів для самоконтролю, задач за темами дозволяє контролювати прогрес у засвоєнні матеріалу. Показано, що результати екзаменаційного тесту (Рис. 1) корелюють з поточними результатами контролю знань здобувачів освіти.

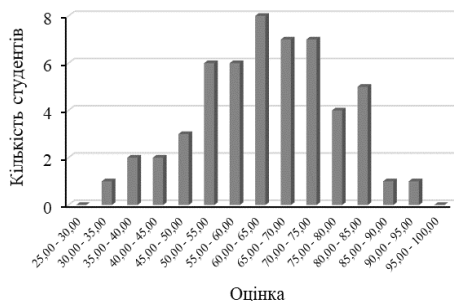


Рис. 1. Результати екзаменаційного тесту з курсу «Хімічна кінетика» у Moodle

Таким чином, використання розробленого курсу сприяє активізації самостійної роботи студентів, дозволяє здійснювати контроль одержаних знань, спонукає більш глибоко вивчати теоретичний матеріал та виконувати лабораторні роботи навіть в онлайн-режимі, що забезпечує закріплення не лише теоретичних знань, але і практичних навичок при вивченні дисциплін хімічного спрямування.

ОСОБЛИВОСТІ ТА ТРУДНОЩІ ВИКЛАДАННЯ ХІМІЧНИХ ДИСЦИПЛІН В ПЕРІОД КАРАНТИННИХ ОБМЕЖЕНЬ

Мороз В. О., Кучма А. Ю., Горяйнова Ю. А.

Донецький національний університет економіки і торгівлі імені Михайла Туган-Барановського, Кривий Ріг, Україна
Moroz_vo@donnuet.edu.ua

В Донецькому національному університеті економіки і торгівлі імені Михайла Туган-Барановського випускники двох освітньо-професійних програм першого рівня вищої освіти вивчають хімічні дисципліни. Це ОПП «Харчові технології» та «Готельно-ресторанна справа». За навчальним планом 2019–2020 н.р. бакалаври спеціальності 181 «Харчові технології» на першому курсі вивчають дисципліну «Харчова хімія та біохімія» протягом двох семестрів. На вивчення відводиться 330 годин, з яких: лекцій – 90, лабораторних занять – 72, СРС – 168. Студенти, які навчаються за навчальним планом підготовки бакалаврів спеціальності 241 «Готельно-ресторанна справа», вивчають в другому семестрі першого курсу дисципліну «Харчова хімія». На вивчення відводиться 180 годин, з яких: лекцій – 55, лабораторних занять – 17, СРС – 108. Як бачимо, обов'язковою умовою є виконання лабораторного практикуму, на якому студенти набувають певних навичок. Але досягти на 100 % цієї мети в другому семестрі 2019–2020 навчального року завадив карантин, який був викликаний COVID-19.

З початку березня наш заклад вищої освіти, як і багато інших, перейшов з очного навчання на дистанційне. Всі заняття відбувалися суворо за розкладом, кожний викладач та група студентів спочатку самостійно обирали зручний для них формат спілкування: Moodle, Skype, Viber, Zoom. Пізніше керівництво ДонНУЕТ рекомендувало застосовувати ще і програму Teams. Методичні матеріали, завдання поточного модульного контролю, самостійної роботи, методики лабораторних робіт з хімічних дисциплін студенти могли знайти в системі дистанційного навчання Moodle, яка впроваджена в навчальний процес в ДонНУЕТ з 2016 року. Але відсутність можливості безпосередньо працювати в хімічних аудиторіях та виконувати лабораторні роботи стала на заваді якісного повноцінного опанування хімічних дисциплін. І не тільки це.

Спілкування викладачів зі студентами підтвердило той факт, що здобувачі вищої освіти по різному ставилися до дистанційного навчання. У деяких зовсім не виникало ніяких труднощів, їм подобався такий формат навчання, але вони в той же час казали про тимчасову депресію. Інші спочатку не розуміли, в якому додатку будуть відбуватися заняття, які терміни здачі завдань, як буде відбуватися лабораторний практикум, але згодом все стало зрозумілим. Треті називають проблемою сам додаток, тому що інколи не транслювався екран з презентацією або був поганий інтернет-зв'язок, треба було розібратися з особливостями роботи в цьому конкретному додатку, встановити програмне забезпечення. Деяким студентам було важко зробити конспект самостійно, виділити головне. Треба відмітити, що загальна проблема усіх, хто дистанційно вивчав хімічні дисципліни, – уявити собі аналітичні ефекти, описати спостереження щодо хімічних дослідів. І тут перед викладачем виникала задача – швидко знайти відео в YouTube і надати посилання студентам. Іншого виходу не було, бо був жорсткий карантин.

Водночас багато студентів наголошують на тому, що дистанційне навчання має переваги – вони мали змогу знаходитися будь де та бути присутніми на заняттях постійно; їх практично нічого не відволікало; вони не витрачали час на дорогу.

Отже, сподіваємося, що цей досвід, якщо виникне необхідність, нам знадобиться для розв'язання проблем при викладанні хімічних дисциплін в період карантину.

НАФТОХІМІЧНІ УЯВЛЕННЯ В «НАТУРФІЛОСОФІЇ» ТЕОФАНА ПРОКОПОВИЧА

*Родигін К. М.*¹, Родигін М. Ю.²

¹Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна

²Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України, Київ, Україна
rodygin@ukr.net

Трактат Теофана Прокоповича (1681 – 1736 рр.), професора й ректора Києво-Могилянської академії, «Натурфілософія, або фізика» (1708 – 1709 рр.) презентує широкий спектр поглядів та уявлень притаманних тогочасному природознавству – аристотелістських, механістичних, алхімічних, ятрохімічних, флогістичних тощо.

Велику увагу Прокопович приділяє корисним копалинам, які він, аналогічно Георгу Агріколі, розглядає систематично. Це є закономірним, оскільки накопичений масив природничих даних конче потребував аналізу та систематизації, показовим прикладом чого є трактат Карла Ліннея «Systema Naturae», що вийшов за життя о. Теофана та зробив ботаніку найпрогресивнішою наукою природознавчого циклу.

Рідкі копалини українській ученій розглядає як смоли різного ступеню коагуляції. «Одна смола цілком рідка і подібна до олії, інша коагульована й густа ... Рідкої є три види: нафта, ропа і ... особлива рідка смола. Нафта – це випари зі смоли, тобто дуже легка частина смоли, очищена й рідша, в одних місцях природна, в інших – виділена штучно, подібно до того, як чистий спирт відділяється від вина. Роба – це ніби олія скелі, тому що капає зі скель і має ... різкий запах, проте менш легка і тонка, ніж нафта. Так звана рідка смола – це ще гущіша матерія, ніж ропа. Однак ці три ... природою не відрізняються, ... походять з одного кореня, а різняться лише тонкістю і роздрібненістю частинок. Це свідчать хіміки на основі перегонки...» (ч.3, кн.3, розд.2).

Історично термін «нафта» поширювався на широке коло легкозаймистих речовин. У Біблії фігурує горюча «масна вода», що називали «нефтоар» або «нефтай» (2 Мак. 1:19-22, 31-34, 36). У міркуваннях про природу такої легкозаймистості («великої спорідненості з вогнем») о.Теофан застосовує традиційний асоціативний ланцюжок «смола – жирність – горючість», що тягнеться від гомерівських «смольних лучин» (Одісея, XVIII, 310), біблійних «смоли палючої» (Іс. 34:9) та «масної води» (2 Мак. 1:19-22) до «жирної землі» (Terra pinguis) флогістики Йоганна Бехера.

В українську мову термін «нафта» прийшов із грецької та має латинський відповідник «petroleum» – «кам'яна олія» (за Прокоповичем «ропа – це ніби олія скелі»). Сучасний тлумачний словник згадує слово «ропа» як діалектну назву нафти з синонімічним рядом – кип'ячка, олива, текучка, гас. Із сучасного погляду «нафта» і «ропа» Прокоповича відповідають, певно, різним нафтовим фракціям (див. таблицю).

Речовина	Опис за Прокоповичем	Коментар
«Нафта»	Продукт дистиляції – природної («випари зі смоли») або штучної («як чистий спирт відділяється від вина»)	Ймовірно відповідає або власне бензиновій («очищеній») фракції нафтопродуктів, або ж первинній нафті з високим вмістом легких вуглеводнів
«Роба»	«менш легка і тонка, ніж нафта»	Вочевидь має містити переважно важкі вуглеводні лігроїн-солярової фракції
«Рідка смола»	«ще гущіша матерія, ніж ропа»	Має містити більш високомолекулярні сполуки – бітуми або асфальт (лат. bitumen, грец. asphaltos, буквально «гірська смола»)

Наведені вченим відомості становлять значний історико-науковий інтерес: можливо, це найдавніший приклад систематизації нафтохімічних уявлень в Україні – за півтора століття до початку бурхливого розвитку новітньої української нафтохімії.

ІННОВАЦІЙНИЙ ПОТЕНЦІАЛ ВИКЛАДАЧІВ ХІМІЧНИХ ДИСЦИПЛІН*Туриця О. О.*

ВСП «Львівський фаховий коледж харчової і переробної промисловості
Національного університету харчових технологій», Львів, Україна
olyaturytsya@ukr.net

Карантин змінів життя не лише студентів, а й викладачів. Усі навчальні заклади перейшли на дистанційне навчання, активізувалися проблеми інновацій в освітній системі та формування інноваційного потенціалу викладачів закладів фахової передвищої освіти.

Інноваційний потенціал педагога – сукупність соціокультурних і творчих характеристик особистості педагога, який виявляє готовність удосконалювати педагогічну діяльність, наявність внутрішніх засобів і методів, здатних забезпечити цю готовність [2, с. 51].

Інноваційний потенціал викладачів хімічних дисциплін можна розглядати як інтегральну характеристику якостей і можливостей особистості, що забезпечують інноваційний характер професійної діяльності.

Характерними ознаками високого інноваційного потенціалу викладачів є широке коло інтересів, відкритість до педагогічних інновацій, використання інноваційних технологій, наукова діяльність, творча уява, проблемне бачення, гнучкість і критичність мислення, інноваційна культура, ініціативність, наполегливість у досягненні поставлених цілей, самостійність, впевненість у собі, толерантність, комунікативність, працездатність тощо.

Рушійною силою інноваційної діяльності є педагог як творча особистість, оскільки суб'єктивний чинник є вирішальним при пошуку, розробці, впровадженні та поширенні нових ідей. Творчий викладач має широкі можливості і необмежене поле для інноваційної діяльності, оскільки на практиці може експериментувати і переконуватися в ефективності методик навчання, коригувати їх, пропонувати нові технології та методи навчання [1, с. 42].

Інноваційна професійна діяльність викладачів хімічних дисциплін має бути спрямована на:

- оволодіння інноваційними технологіями, методами науково-дослідницької діяльності, організацією інноваційного навчання;
- отримання нових знань та впровадження їх у зміст, методи, засоби та форми навчання;
- формування позитивної мотивації майбутніх фахівців до інноваційної діяльності; розвиток творчих здібностей і рефлексії студентів;
- набуття майбутніми фахівцями компетенцій, необхідних для їхньої професійної діяльності.

В умовах сьогодення всі викладачі повинні бути творчими, системно мислячими, мобільними, спроможними до ефективної інноваційної професійної діяльності, тобто мати високий інноваційний потенціал.

Література

1. Дяченко-Богун М. М. Сутність та актуальність інноваційних технологій закладів вищої освіти. Матеріали Міжнародної науково-практичної конференції «Методика навчання природничих дисциплін у середній та вищій школі» (XXVII Каришинські читання) (м. Полтава, 28–29 травня 2020 р.) / за заг. ред. проф. М. В. Гриньової. Полтава: Астрія, 2020. 437 с.

2. Мазоха Д. С., Опанасенко Н. І. Педагогіка: навч. посіб. Київ: Центр навчальної літератури, 2005. 232 с.

АНАЛІЗ ОСОБЛИВОСТЕЙ ВИКОРИСТАННЯ ЕЛЕКТРОННОГО НАВЧАЛЬНОГО КУРСУ З ДИСЦИПЛІНИ ХІМІЯ

Хижан О. І.¹, Панченко В. А.¹, Ковшун Л. О.¹, Нестерова К. А.¹, Хижан О. І.²

¹Національний університет біоресурсів і природокористування України,
Київ, Україна

²Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України,
Київ, Україна

olenakhyzhan@gmail.com

На сьогодні, особливо в умовах карантинних обмежень, якість освіти – тема більшості дискусій в світових освітніх спільнотах. Якщо декілька років тому ці обговорення стосувалися традиційної освіти, то тепер поняття якості застосовується щодо електронного навчання. Однією з провідних завдань, які стоять перед викладачами та працівниками ВНЗ, є не тільки впровадження системи дистанційної освіти, а й забезпечення сприятливого впливу нових технологій на освітній процес, тобто необхідність розвитку сильних сторін і мінімізація негативних.

В роботі проаналізовано особливості використання курсу дистанційного навчання з фізичної і колоїдної хімії для студентів спеціальності «Захист і карантин рослин» в оболонці Moodle. Курс дистанційного навчання включає такі елементи: візитка курсу, загальна інформація про курс, три змістовних модулів і контролюючий блок. У візитці наведено загальну лаконічну інформацію про електронний курс та його авторів, курс та семестр навчання, кількість кредитів ECTS та рівень доступу до курсу. Загальна інформація про курс містить: робочу програму навчальної дисципліни, глосарій, календарний план проходження курсу; друковані та Інтернет джерела; критерії оцінювання; новини.

У курсі запропоновано такі змістовні модулі: 1. Хімічна термодинаміка. Хімічна кінетика. 2. Розчини. Електроодні процеси 3. Поверхневі явища. Дисперсні системи. Кожний змістовний модуль включає лекції. У цьому курсі модуль Книга використано для зберігання лекцій. Цей формат дозволяє викладачу створювати структуровані багатосторінкові текстові ілюстровані ресурси з розділами та підрозділами, зміст яких відображає логіку навчання за курсом і надає студенту теоретичні відомості з модуля у повному обсязі. Теоретичний навчальний матеріал містить також мультимедійні презентації лекцій, відео матеріали. У матеріалах курсу є перелік лабораторних робіт у вигляді окремих ресурсів. До кожної роботи сформульовано мету та завдання, надано методичні рекомендації з їх виконання, форму подання результатів виконаної роботи, критерії оцінювання кожної роботи, список індивідуальних завдань, завдання для виконання у парах та групами. Лабораторні роботи по фізичній і колоїдній хімії виконуються експериментально в аудиторних умовах, про що зазначається при формулюванні завдання. Але в умовах карантинних обмежень деякі лабораторні роботи також представлено у вигляді відеоматеріалів. Результат виконання або розрахунків лабораторної роботи студенти надсилають викладачеві в електронній формі до навчального порталу. Після перевірки та оцінювання виконаних завдань, викладач має виставити бали у відповідну оцінювану діяльність. Після вивчення теоретичного матеріалу для самоперевірки та перевірки студентам пропонується пройти тест по заданій темі. Цей модуль надає викладачу можливість розробляти тести, які можуть містити питання різних типів, у тому числі множинного вибору, на відповідність, з короткою або числовою відповідями.

На відміну від традиційного дистанційне навчання уможливує вільний доступ до матеріалів навчання, надає можливість користуватися додатковими ресурсами, менш суворо за розкладом, ґрунтується на інформації, а не на структурованому викладанні.

**МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОПОДГОТОВКИ БАКАЛАВРОВ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ «ХИМИЯ» В ТЕХНИЧЕСКОМ ВУЗЕ***Хоботова Э. Б.*

Харьковский национальный автомобильно-дорожный университет, Харьков, Украина
elinahobotova@gmail.com

Дисциплина «Химия» присутствует как фундаментальная в образовательных программах подготовки инженеров практически всех технических специальностей. В настоящее время трансформации высшего образования большое значение приобрело самообразование. Во многом самоподготовку может обеспечить учебно-методическая литература нового поколения, разработка электронных вариантов учебных пособий и методических указаний, курсов-ресурсов и комплексов дистанционного обучения.

В Харьковском национальном автомобильно-дорожном университете разработан учебно-методический комплекс по дисциплине «Химия», включающий учебные пособия «Основы химия», «Сборник задач по химии», «Пакеты тестовых заданий по дисциплине химия» и «Лабораторный практикум по химии», а также курсы-ресурсы по химии для отдельных направлений подготовки бакалавров и курс дистанционного обучения для формы заочного обучения. Учебное пособие «Основы химии» включает все разделы химии, которые предусмотрены программами дисциплины для специальностей ВУЗа. Помимо теоретической части пособие содержит отдельные тестовые задания и типовые задачи. Сборник задач по химии разработан по принципу дифференциации. Все задачи и задания классифицированы на 4 уровня сложности: начальный, средний, высший и творческий. Для каждого уровня представлены образцы решенных заданий. Подобный подход позволяет студентам постепенно повышать уровень теоретической и практической подготовки. Пакеты тестовых заданий представлены в виде заданий для самоконтроля и тестовых заданий различных видов: закрытого и открытого. Разработаны тестовые задания закрытого типа альтернативного выбора, простой альтернативы, направленные на «грубую» проверку знаний и классификаций по определенному разделу, проверку навыков правильного применения знаний, а также задания, построенные по принципу соответствия. Предложены тестовые задания в графическом виде. Тесты открытого типа требуют более полных знаний формул, единиц измерения, умения провести расчет. Самостоятельная подготовка учащихся по тестовым заданиям дисциплины позволяет провести контроль знаний, проверить наличие навыков и творческой компоненты у студентов на разных этапах обучения.

Электронный методический комплекс размещен на образовательной платформе университета. Он включает в себя все методические компоненты, обеспечивающие теоретическую, практическую и самостоятельную подготовку бакалавров, приобретение навыков. Ресурс разделен на общую часть и отдельные тематические разделы. В общей части представлены программа дисциплины, силубус, требования к сдаче экзамена, учебные пособия, сборники задач, пакеты тестовых заданий и методические указания к лабораторным работам и практическим занятиям. Тематические разделы включают теоретический лекционный материал, примеры решения задач и тестовых заданий по уровням сложности, презентационный материал для лекций и практических занятий, видео лабораторных работ, пакеты вариантов контрольных работ и тесты.

Электронный ресурс доказал свою актуальность и высокую эффективность для дистанционного обучения во время пандемии. Он широко использовался для всех видов учебной деятельности, а также для самостоятельного обучения студентов.

**CHEMISTRY OF POLYMERS
AND COMPOSITES /
ХІМІЯ ПОЛІМЕРІВ
І КОМПОЗИТІВ**

**SYNERGETIC EFFECT OF HAZELNUT SHELLS AND BENTONITE
ON THE PROPERTIES OF HYBRID POLYETHYLENE BIOCOMPOSITES***Arzumanova N. B.*, Kakhrmanov N. T.Institute of Polymer Materials of Azerbaijan National Academy of Sciences, Sumgait,
Azerbaijan
arzumanova-nushaba@rambler.ru

The remnants of agricultural crops are produced in billions of tons and are available at low prices; only a small part of the residue is used as domestic fuel or fertilizer, as the main part burns in the field, causing air pollution and environmental hazards. Using these remnants as filler in polymer materials can solve the problem. Natural fillers from agricultural waste are replacing synthetic fibers as reinforcement in polymer composites due to their non-toxicity, low density, low cost, renewability, biodegradability and, therefore, a positive impact on the environment [1]. Despite all these positive properties, natural fiber composites suffer from a lower modulus of elasticity, lower strength, limited durability and relatively poor moisture resistance. To solve these problems and improve the basic properties of polymer composites reinforced with agricultural waste, a potential way is to combine two types of fillers. Therefore, the idea is to obtain a synergistic effect of filler properties on the overall properties of hybrid biocomposites. Thus, the main goal of this study was to assess the effect of the combination of natural bio-filler and bentonite on the physicomaterial properties of hazelnut shell/bentonite/polyethylene hybrid biocomposites.

Low density polyethylene (LDPE) grade 15 803-020 was used as a polymer matrix, which was provided by SOCAR POLYMER LLC, Sumgait, Azerbaijan. Bentonite clay from the Dash-Salakhly deposit (Gazakh, Azerbaijan) was used as filler. The chemical composition of the bentonite clay of the Dash-Salakhly deposit: SiO₂ – 58.60, Al₂O₃ – 13.40, Fe₂O₃ – 4.70, FeO – 0.18, TiO₂ – 0.39, CaO – 2.05, MgO – 2.30, P₂O₅ – 0.11, SO₃ – 0.25, K₂O – 0.39, Na₂O₃ – 2.30, LOI (loss on ignition) – 1.33. The extracted bentonite clays of the Dash-Salakhly deposit contain more than 85 % montmorillonite, in the exchange complex of which sodium and magnesium cations prevail. Hazelnut shells of the popular variety Atababa, provided by a hazelnut producer from the city of Khachmaz in northern Azerbaijan, were used as reinforcing filler.

Hazelnut shells are known to be hydrophilic, while polyethylene is hydrophobic in nature. Thus, hydrophilic hazelnut shells react poorly with hydrophobic polyethylene, which leads to a decrease in tensile strength and elongation at break. When combining peanut shells with bentonite, the hybrid composites showed better tensile strength than hazelnut shell/LDPE composites. Nanoclay enhances interfacial interaction and adhesion between fiber and polymer matrix, thereby improving the mechanical properties of composites. Of course, it should be noted that the improvement of the mechanical properties of composites by adding nanoclay can only be achieved up to a certain concentration of nanoclay. The decrease in tensile mechanical properties at higher bentonite concentrations is likely due to agglomeration of nanoclay plates, which sharply reduces the dispersion of particles in the matrix and, therefore, the effectiveness of reinforcing nanoparticles in improving mechanical properties.

Thus, bentonite clay, consisting mainly of montmorillonite, can be used as filler in hybrid polymer composites due to its well-known exfoliation / intercalation chemistry, large surface area, cost effectiveness and availability.

References

1. Shejkar S.K., Agrawal A., Agrawal B. Walnut shell particulates as filler material in polymeric matrix: a review // International Journal of Engineering Research in Current Trends. – 2020. – V.2. – №3. – P. 41–43.

DEVELOPMENT AND APPLICATION OF THE MICROEMULSION COMPOSITE MATERIALS WITH BIOBASED ADDITIVES

Bodachivska L. Yu., *Verba A. Yu.*

V. P. Kukhar Institute of Bioorganic Chemistry and Petrochemistry of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine

bodach@ukr.net

Any kind of metal mechanical alterations is accompanied by use of metalworking fluids (MF). These fluids are generally multipurpose materials, which provide removal of metal debris from operation zone, cooling of equipment details, prevention of wear and corrosion during the metalworking. Hence, use of MF increases productivity, accuracy and purity of processing and, in many cases, decreases duration and a number of manufacturing steps. Among the most promising AMF are microemulsions. Microemulsions are superdispersed systems, which contain nanoscale droplets in a bulk phase and, in contrast to macroemulsions, have both thermodynamic and kinetic stability, thus, they are steady in time. This stabilization effect is a consequence of extra-low interfacial tension between water and oil phases that usually is provided by the mixture of surfactants.

For preparation of microemulsion MF we used following components: Nonylphenol ethoxylated with 10 moles of ethylene oxide NP-10 (Chemproduct, Ukraine), as a surfactant; Triethanolamine TEA (Sigma-Aldrich Chemie GmbH, Germany), as a co-surfactant, corrosion inhibitor and inhibitor of bacteriological processes; Benzoic, salicylic, boric acids (Chemlaborreactiv, Ukraine), as a co-surfactant and corrosion inhibitor; Sulfur-rich fatty acid ethyl esters with 10, or 30 wt.% of S (10S-FAEE and 30S-FAEE respectively), as an extreme pressure additive and friction modifier. S-FAEE and WG we obtained from unrefined rapeseed oil; Waste glycerol (WG) from biodiesel manufacturing, as a co-surfactant, stabilizer and cooling agent. Microemulsion MF was achieved by sequential preparation and mixing of solutions, or dispersions of above described components. Firstly, we dissolved 1.0 g of NP-10 in 6.5 g of demineralized water, followed by addition of 1.4 g of TEA, 0.7 g of 10S-FAEE and 0.4 g of WG. This dispersion was mixed at the room temperature for 2 min, until formation of reddish emulsion. At the second step, four solutions were prepared by dissolving of 0.04 g of benzoic, salicylic, or boric acids in 90 g of distilled water. Finally, we received MF via agitating of initial emulsion and acid solutions during 2–3 min. Besides, we designed microemulsions with addition of 30S-FAEE by the similar technique. However, in this case we decreased mass fraction of NP-10 and sulfurized fatty esters in two times.

Table 1. Composition and characterization of MF

No	Composition, wt.%					Characterization				
	NP-10	TEA	WG	Tribological additive – content	Acid – content	Viscosity, mm ² ·s ⁻¹	pH	Steel corrosion	Pc, N	Pw, N
1	1.0	1.4	0.4	10S-FAEE – 0.7	Benzoic – 0.04	1.18	9.2	Non	1235	1303
2	1.0	1.4	0.4	10S-FAEE – 0.7	Salicylic – 0.04	1.22	9.3	Non	1166	1235
3	1.0	1.4	0.4	10S-FAEE – 0.7	Boric – 0.04	1.47	9.3	Non	1039	1235
4	0.5	1.4	0.4	30S-FAEE – 0.35	Salicylic – 0.03	–	9.3	Non	1180	1744

In summary, we want briefly outline industrial importance of designed composition. Ethoxylated nonylphenol and TEA are widely used inexpensive components for achieving of stable non-corrosiveness aqueous dispersed systems for metalworking operations. Application of available in Ukrainian market benzoic, salicylic, or boric acid, instead of deficient eodecanoic acid, not only economically advantageous, but also enables to achieve stable microemulsion MF with improved properties.

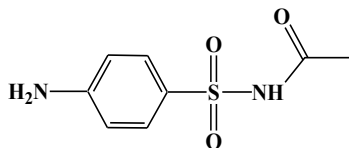
СИНТЕЗ І ВЛАСТИВОСТІ ПІНОПОЛІУРЕТАНОВИХ КОМПОЗИЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ З АЛЬБУЦИДОМ

Віслогузова Т. В., Рожнова Р. А.

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України, Київ, Україна
rudenchyk@gmail.com

В сучасній хірургії виникає необхідність проведення відновлювальних та реконструктивних операцій на орбіті та окулоорбітальній ділянці в результаті очного травматизму. Тому, пошук та впровадження нових матеріалів як багатофункціональних полімерних імплантатів для офтальмологічної хірургії є дуже актуальною задачею.

Перспективними матеріалами є пінополіуретани (ППУ), які використовують при виготовленні імплантаційного матеріалу з довготривалою пролонгованою лікувальною дією. Полімерна матриця на їх основі задовольняє вимоги до полімерів медичного призначення за фізико-механічними властивостями, є біосумісною, здатною пролонговано вивільняти лікарські речовини, тому доцільним є створення на її основі біологічно активних полімерних матеріалів. Як лікарська речовина для створення біологічно-активних ППУ заслуговує на увагу альбунід, який проявляє антимікробну та бактеріостатичну дію та використовується в медичній практиці у вигляді розчину як очні краплі:



Тому, метою роботи є створення та дослідження ППУ та пінополіуретанових композиційних матеріалів на їх основі з альбунідом як перспективних імплантатів для використання в офтальмологічній хірургії.

ППУ отримували на основі діізоціанатного форполімеру (синтезованого з поліоксипропіленгліколю та 2,4-;2,6-толуїлендіізоціанату) та каталізатора 2,4,6-трис(диметиламінометил)фенолу. На основі ППУ отримано пінополіуретанові композиційні матеріали з альбунідом (у кількості 5 % мас.).

Проведені дослідження структури та властивостей пінополіуретанів та композиційних матеріалів з альбунідом на їх основі. Встановлено, що іммобілізація лізоциму відбувається за рахунок міжмолекулярних водневих зв'язків. За результатами фізико-механічних випробувань значення адгезійної міцності отриманих ППУ з альбунідом складає ~1,2 МПа. За даними ТГА, розкладання зразків відбувається одностадійно. Температура початку розкладання ($T_{\text{поч. розкл.}}$) становить 172,05 (для ППУ) та 162,84 °С (для ППУ з альбунідом) і супроводжується незначною втратою маси (0,78 та 0,87 % відповідно). Температура максимальної швидкості розкладання для ППУ становить 313,26 °С, для ППУ з альбунідом – 303,83 °С. Отже, при введенні альбуніду до складу ППУ спостерігається зниження $T_{\text{поч. розкл.}}$, підвищення втрати маси та зниження $T_{\text{макс. шв. розкл.}}$. За даними ДСК досліджувані системи однофазні.

Отже, розроблені ППУ композити з альбунідом проявляють термостійкість до температури 162,84 °С, що робить можливим проведення сухої стерилізації зразків без зміни їхніх характеристик.

Таким чином, досліджувані ППУ композиційні матеріали з альбунідом можуть бути запропоновані для використання в медичній практиці та потребують подальших медико-біологічних випробувань.

UTILIZATION OF Cr (VI) BY COMPOSITES CELLULOSE/POLYANILINE

*Vlad Kh. I.*¹, Vereshchagin O. M.², Yatsyshyn M. M.¹, Zelinskiy A. V.¹, Reshetnyak O. V.

¹Ivan Franko National University of L'viv, Ukraine
kristinavlad1998@gmail.com

²SE Tylose GmbH & Co. KG, Wiesbaden, Germany
oleh.vereshchagin@googlemail.com

Purification of water from heavy metals and chromium is one of the important areas of modern research. It is known that Cr (VI) is 500 times more toxic than Cr (III) and may be present in natural reservoirs of water in the form of oxyanions, such as ($\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$, HCrO_4^- and CrO_4^{2-}), formed due to the high electrostatic repulsion force between these ions and negatively charged ground particles. The main sources of chromium water pollution are wastewater from many industrial extractions, processing of chromium-containing ores, galvanic wastewater, leather processing, production of paints and wood preservatives, etc. All these sources are anthropogenic and related to human activities.

Polyaniline (PAN) is an important representative of electrically conductive polymers (CPs) and consists with a high content of amino ($-\text{N}(\text{H})-$) and imino ($-\text{N}=\text{}$) groups, which are the main adsorption centres of Cr (VI) ions. Among different conducting polymers, polyaniline indicates under certain conditions the largest number of mesostructured states, that it is extremely important property and distinguishes from other CPs. However, having a wide range of physical and chemical properties, PAN is brittle-powdery polymer, that it makes possible to apply polyaniline to various matrices-carriers of inorganic and organic polymer nature. Cellulose is successfully used to build such carrier matrices of PAN. It is well known that cellulose consists of fibrils with crystalline and amorphous regions. These cellulose fibrils may be individualized by various mechanical and chemical properties and have a significant demand for composite materials. Composites of PAN with biopolymers can be interesting materials for utilization of chromium compounds from water of various origins.

The composites of cellulose/polyaniline (Cel/PAN) were synthesized by chemical oxidation of aniline using ammonium peroxodisulphate as an oxidizing agent in aqueous 0,5 M hydrochloric acid solutions in the presence of suspension of microfibrillar cellulose. The ratio aniline : cellulose (g : g) in the reaction mixtures was 1,0 : 1,25 or 1,0 : 2,5 or 1,0 : 5,0 and 1,0 : 10,0 accordingly. We have employed bleached pulp of linters (TM Linters 1058, ADM, USA, melt pulp 1290 μm , viscosity 37050 mPa·s, degree of polymerization ($\text{DS}=20150$)). Distilled water was used as solvent.

The adsorption properties of Cel/Pan composites were investigated on model aqueous solutions of $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ in a wide concentration range of 50–500 $\mu\text{g/l}$ Cr (VI). Determination of equilibrium concentrations of Cr (VI) was performed spectrophotometrically in the range of 350–600 nm by Cadas-100. The content of adsorbent was 0.1 g, and the volume of solution was 10ml. Indication of chromium content in the filtrate after adsorption was carried out by X-Ray fluorescence analysis by ElvaX Pro.

It was established, that the adsorption of Cr (VI) occurs as an adsorption-reduction of Cr (VI) to Cr (III) due to oxidation of emeraldine salt of PAN to pernigranilin and terminally almost complete adsorption of Cr (III) ions on polyaniline.

СИНТЕЗ НАНОСТРУКТУРОВАНИХ КАТАЛІЗАТОРІВ ДЛЯ ОКИСНЕННЯ ВУГЛЕВОДНІВ ПО С-Н ЗВ'ЯЗКАХ

Новохатько А. О., *Демчина О. І.*, Шепарович Р. Б., Опейда Л. І., Євчук І. Ю.

Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України, Львів, Україна
demchynaoksana@ukr.net

Розробка нетоксичних і екологічно чистих методів окиснення вуглеводнів до промислово важливих продуктів диктує необхідність створення нових типів каталізаторів. Перспективними є каталізатори, які є пористими матеріалами (носії), на поверхню яких нанесена каталітично активна речовина.

Синтезовано нанокаталізатори, де іони металів змінної валентності (Co, Mn, Cu) іммобілізовані на полімерній матриці. З цією метою під час процесу УФ-полімеризації акрилових мономерів (акрилової кислоти (AA) та стиренсульфонату натрію (SSS)) і зшивача (етиленглікольдіакрилату (EGDA) або N,N'-метилен-біс-акриламід (MBA)) у полімеризаційну суміш вводилась золь-гель система (SGS) на основі тетраетоксисилану (TEOS). Матеріал, одержаний у результаті кополімеризації акрилатів і золь-гель синтезу *in situ*, має пористу структуру, що складається із взаємозв'язаних між собою наночастинок, стабілізованих полімерною матрицею. Після подрібнення матеріалу його витримували протягом 2 діб у 5 % водних розчинах солей $\text{Co}(\text{NO}_3)_2$, CuCl , MnCl_2 , відцентругоували, промивали етанолом і сушили до постійної ваги. У результаті реакції із наявними у складі полімерної матриці сульфогрупами іони металів закріплювались на поверхні каталізатора і служили каталітичними центрами.

Активність синтезованих наноструктурованих каталізаторів оцінювалась кінетичними методами. Волюмометрично вимірювалось поглинання кисню, визначалась швидкість (W , моль $\text{л}^{-1} \text{хв}^{-1}$) його поглинання в початковий період реакції (до 30 хв), де кінетична залежність є лінійною, при окисненні кумолу в присутності ініціатора AIBN та синтезованих систем, що вміщують $\text{Co}(\text{NO}_3)_2$, CuCl , MnCl_2 при температурі 70 °C та тисковій кисню 760 мм рт. ст. Склад проби в кінетичних дослідженнях: кумол 1 мл, AIBN 10мМ (0,00165 г), каталізатор 10 мг (0,01 г).

Таблиця 1. Швидкості каталізованого синтезованими системами окиснення кумолу

	Склад каталізатора	Сіль	$W \times 10^3$, М $\text{л}^{-1} \text{хв}^{-1}$
1	AIBN		1,7
2	AA+MBA+SSS+SGS	$\text{Co}(\text{NO}_3)_2$	2,5
3	AA+MBA+SSS+SGS	CuCl	1,9
4	AA+MBA+SSS+SGS	MnCl_2	2,3
5	AA+EGDA+SSS+SGS	$\text{Co}(\text{NO}_3)_2$	1,9
6	AA+EGDA+SSS+SGS	CuCl	2,3
7	AA+EGDA+SSS+SGS	MnCl_2	2,0
8	AA+EGDA+SSS	$\text{Co}(\text{NO}_3)_2$	1,7
9	AA+EGDA+SSS	CuCl	1,9
10	AA+EGDA+SSS	MnCl_2	1,6

Порівняння результатів дослідів 1 та 8, 9, 10 показують, що за відсутності в системі SGS наявність солей практично не впливає на швидкість окиснення кумолу. Заміна EGDA у складі каталізатора на MBA (досл. 2 і 5 та 4 і 7) приводить до зростання каталітичних властивостей синтезованих нанокаталізаторів у випадку солей $\text{Co}(\text{NO}_3)_2$ та MnCl_2 . Найефективнішою є система, що вміщує $\text{Co}(\text{NO}_3)_2$ та MBA. Отримані дані є основою для розробки високоєфективних каталізаторів для процесів окиснення алкіларенів по С-Н зв'язках.

**РОЗРОБКА ЛАКОФАРБОВОЇ КОМПОЗИЦІЇ З ПІДВИЩЕНОЮ
ВОЛОГОСТІЙКІСТЮ***Димюра В. В.*, Голуб Л. С.

Державний вищий навчальний заклад «Український державний хіміко-технологічний університет», Дніпро, Україна
man-shan@ukr.net

На теперішній час все більшого значення набувають водно-дисперсійні лакофарбові матеріали, виробництво і застосування яких не пов'язане з використанням токсичних і пожежонебезпечних органічних речовин. До їх основних переваг відносяться низька токсичність, швидке висихання, можливість фарбувати вологі поверхні і проводити фарбувальні роботи при підвищеній вологості повітря. Застосування таких матеріалів дозволяє виключити використання токсичних та пожежонебезпечних розчинників, крім того, в промисловості при роботі з цими матеріалами знижуються вимоги до охорони праці, пожежо- та вибухонебезпечності фарбувальних робіт, не потрібно застосовувати обладнання для виробництва та нанесення лакофарбового покриття у вибухозахисному виконанні.

Останнім часом водно-дисперсійні лакофарбові матеріали широко застосовують в будівництві для зовнішньої і внутрішньої обробки. Такі матеріали повинні вирішувати завдання не тільки декоративного оздоблення будівель і споруд, а й захищати споруди від дії вологи, сонячного світла, механічних або хімічних пошкоджень. Найбільш поширені в цьому відношенні фарби на основі полівінілацетату. Перевага їх обумовлена легкістю виготовлення водної дисперсії полімеру і відносною дешевизною мономер. Однак вони мають низьку вологостійкість і при регулярному митті покриття поступово змивається водою.

Одним із способів вирішення цієї проблеми є можливість застосування водно-дисперсійних лакофарбових матеріалів, до складу яких входять водні дисперсії поліакрилатів, отримані емульсійної полімеризацією акрилових полімерів і сополімерів. Їх використовують в водорозчинних композиціях, що утворюють тверді, атмосферостійкі і блискучі покриття. Ці матеріали застосовують в будівництві для зовнішньої і внутрішньої обробки будівель і споруд, а також для обробки деревини. Найбільш поширеними плівкоутворювачем, що використовується в рецептурах лакофарбових матеріалів, є водні дисперсії акрилових сополімерів (чисті акрилати), акрилстирольних сополімерів (стирол - акрилати), а також гомо- і сополімерів вінілацетату (з етиленом, ефірами акрилової або метакрилової кислоти).

Нами запропоновано склад лакофарбової композиції для захисту деревини і металу з підвищеною вологостійкістю, в якій полімерною основою є акрилова дисперсія NeoCryl XK-237. Дана акрилова дисперсія є дисперсією самозшиваємого типу і являє собою результат полімеризації акрилової кислоти з додаванням стабілізаторів та емульгаторів. В рецептурі використовується біоцид, який має в своєму складі активну речовину – суміш хлорметилізотіазолінону та метилізотіазолінону. В якості загущувача використовується неіонний уретановий модифікатор реології, розроблений для складання рецептур широкого діапазону фарб, призначених для внутрішнього/зовнішнього застосування.

Розроблена екологічно чиста лакофарбова композиція для захисту деревини і металу, яка має підвищену стійкість до дії вологи, стійкість до впливу продуктів метаболізму бактерій та утворення грибової мікрофлори. Лакофарбове покриття на основі розробленого складу не має негативного впливу на здоров'я людини та негативного впливу на оточуюче середовище, володіє хімічно, термо-, морозо-, вогнестійкістю, підвищеною вологостійкістю для захисту виробів з деревини та металу.

CHEMICAL SYNTHESIS OF POLY(2-AMINOTHIAZOLE) IN THE PRESENCE OF GRAPHENE OXIDE

*Dubenska L.*Ivan Franko National University of Lviv, 79005, Kyryla & Mephodia Str. 6, Lviv, Ukraine
lidiya.dubenska@gmail.com

2-aminothiazole (2-AT) is a heterocyclic amine which is biologically active in various ways. Thiazole ring is a part of numerous drugs [1] such as analgesic, antithrombotic, anti-inflammatory or many more. Particularly interesting are its antimicrobial and antitumor properties. Besides all that, poly(2-aminothiazole) (PAT), that is conjugated polymer, has heavy metal sensing and selective concentration applications [2], anticorrosive properties. Therefore PAT is a promising polymer to study, however number of publications on this topic is limited.

In this study, chemical polymerization of 2-aminothiazole has been studied. Synthesis was carried out from aqueous solutions of monomer for 18 hours while heating at 70 degrees Celsius. As initiators of polymerization we used CuCl_2 and $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$ by adding them in a slow rate into reaction flask. Molar ratio of monomer and initiator was 0,2. As a result dark brown polymer was synthesized. With CuCl_2 , as initiator of the process, yield of about 40 % was observed, whereas with $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$ polymer almost did not formed at all. Proposed in the literature [3] scheme of polymerization of PAT is shown on fig. 1. One more sample of polymer was produced with adding of graphene oxide (GO) into the reaction mixture (250 μl of GO per 0,1 mol of 2-AT, CuCl_2 as initiator). Yield of PAT-GO was about 40 % (fig. 2). Graphene oxide is a frame carbon material with a high specific active surface formed by layers of graphite, the edges of which are covered with a number of functional oxygen-containing groups. The study of GO and its composites is due to special physical and chemical properties: from functional flexible films to biometric devices for medical applications can be obtained. When electrically conductive polymers contain reduced particles of GO, they can exhibit new, unpredictable properties. In such systems there is an interaction of the highly conjugated structure of GO and delocalized electrons in the chain of conjugated polymers. Therefore we studied influence of GO on surface morphology and conductivity of PAT.

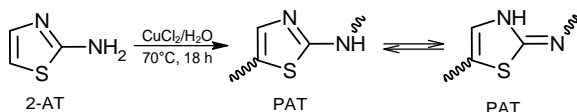
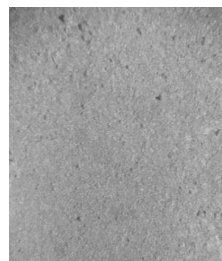


Fig. 1. Scheme of synthesis of PAT (with tautomers)

Fig. 2. Surface of PAT-GO (as initiator CuCl_2) through optical microscope (x120)

1. S. J. Kashyap, V. K. Garg, P. K. Sharma, N. Kumar, R. Dudhe, J. K. Gupta, Thiazoles: having diverse biological activities // *Med. Chem. Res.* 21 (2012), 2123-2132 pp. DOI 10.1007/s00044-011-9685-2

2. N. L. D. Filho, D. R. Do Carmo, A.H. Rosa, An electroanalytical application of 2-aminothiazole-modified silica gel after adsorption and separation of Hg(II) from heavy metals in aqueous solution // *Electrochimica Acta.* 52 (2006), 965-972 pp. DOI: 10.1016/j.electacta.2006.06.033

3. P.-F. Lv, X. Wang, H. Zou, Chemical Synthesis and Characterization of Conducting Poly(2-Aminothiazole) // *Materials Science Forum.* 867(2016), 111-115 pp. DOI 10.4028/www.scientific.net/MSF.867.111

ВПЛИВ КОМПОНЕНТІВ ПОЛІМЕРНОЇ МАТРИЦІ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ ГІБРИДНИХ ПРОТОНПРОВІДНИХ МЕМБРАН

Жигайло М. М., Демчина О. І., Євчук І. Ю.

Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії і вуглекімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України, Львів, Україна
zhyhailo.mariia@gmail.com

Завдяки величезному світовому економічному зростанню та як наслідок зростаючому попиту на енергію, докладаються великі зусилля для пошуку альтернативних джерел енергії. Паливні елементи вважаються перспективною та важливою технологією для енергетичних застосувань завдяки їх високій ефективності та низьким викидам у навколишнє середовище. Серед різних типів паливних елементів полімеробмінні паливні елементи мають багато переваг: низька робоча температура, тривалий термін служби, компактність, низька вартість та можливість швидкого запуску. Основним компонентом паливних елементів є мембранний електродний вузол, який складається з полімерної електролітної мембрани, затиснутої між двома електродами. Ефективність мембрани визначає продуктивність пристрою.

Серію гібридних органічно / неорганічних протонпровідних мембран нами було синтезовано методом радикальної фотоініційованої кополімеризації *in situ* – на основі гідрофільних та гідрофобних акрилових мономерів (2-акриламідо-2-1-пропансульфонувої кислоти (АМПС), акрилової кислоти (АК) та акрилонітрилу (АН)) у присутності фотоініціатора (IRGACURE 651) і зшивача N'-N-метилен-біс-акриламід (МБА) із одночасним проведенням золь-гель процесу прекурсорів: 3-метакрилоксипропілтриметоксисилану (МАПТМС) та тетраетилортосилікату (ТЕОС), введених у полімеризаційну композицію до початку гелеутворення [1].

Дуже важливо охарактеризувати поведінку протонних мембран у контакті з водою, оскільки наявність води в мембрані є необхідною умовою досягнення високої провідності протонів.

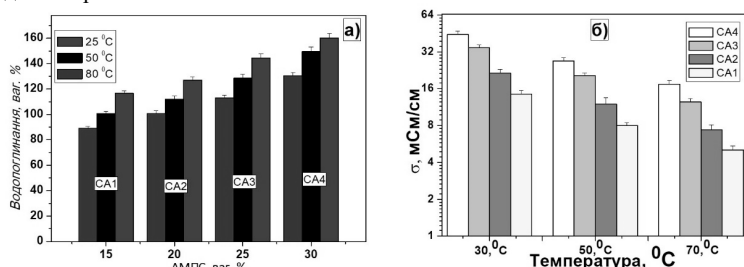


Рис. 1. а) водопоглинання б) протонна провідність мембран як функція вмісту АМПС

Як бачимо, водопоглинання (рис. а) та протонна провідність (рис. б) мембран поступово зростали із збільшенням вмісту АМПС, оскільки відповідно збільшувалася кількість груп $-\text{CONH}$ та $-\text{SO}_3\text{H}$, сильно гідрофільних за своєю природою. Таким чином, мембрана СА4 мала найвищий рівень поглинання води і, відповідно, найвище значення протонної провідності завдяки найбільшому вмісту сульфонувої кислоти. Протонна провідність мембран, виміряна при $T = 30^\circ\text{C}$, ($\text{RH} = 95\%$) знаходилася в межах від $1,44 \cdot 10^{-2}$ до $4,44 \cdot 10^{-2}$ См/см, що можна порівняти з провідністю Nafion 117 ($\sigma = 4,22 \cdot 10^{-2}$ См/см).

Подяка. Робота проведена за фінансової підтримки програми ДАД (Research Grants for Doctoral Candidates and Young Academics and Scientists 2019/20, program ID 91735754).

1. M. Zhyhailo, I. Yevchuk, M. Yatsyshyn [et. al.] // Preparation of polyacrylate/silica membranes for fuel cell application by *in situ* UV polymerization // Chemija. – 2020. Vol. 31. – P. 247-254.

**ВПЛИВ ТИПУ ПРЕКУРСОРУ НА СТРУКТУРНУ ОРГАНІЗАЦІЮ
ЕПОКСИДНО-СИЛОКСАНОВИХ НАНОКОМПОЗИТІВ АНГІДРИДНОГО
ТВЕРДНЕННЯ, ОТРИМАНИХ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ МЕТОДОМ***Жильцова С. В.*¹, Леонова Н. Г.¹, Лисенков Е. А.²¹Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна²Чорноморський національний університет імені Петра Могили, Миколаїв, Україна
sv.zhiltsova@donnu.edu.ua

Епоксидно-силоксанові композити, одержані золь-гель методом, мають різні області застосування. Зміна умов синтезу, природи компонентів і вмісту наповнювача в системі здатні в широких межах змінювати структуру і, відповідно, властивості одержаних матеріалів. Метою даної роботи було встановлення впливу типу кремнійорганічних прекурсорів і вмісту сформованих на їх основі золь-гель методом полісилоксанових частинок на морфологію епоксидно-силоксанових композитів ангідридного тверднення.

Для одержання композитів використано триепоксид УП-650Т, ізо-метилтетрагідрофталевий ангідрид і амінний прискорювач УП-606/2. Композити формували на основі золю полісилоксанових частинок (ПСЧ), епоксидної смоли, твердника і прискорювача. ПСЧ одержували *in situ* золь-гель методом на основі тетраетоксисилану (ТЕОС) або 3-гліцидоксипропілтриетоксисилану (ГПТЕС) при використанні для проведення гідролізу напівстехіометричної кількості води в присутності як каталізатора HNO_3 . Вміст ПСЧ у системі в перерахунок на діоксид кремнію (виходячи з кількості введеного етоксисилану) становив від 0,5 і 10 мас. %.

Показано, що наявність епоксидного олігомеру, а також тип алкоксисилану в системі суттєво впливають на морфологію одержаних композитів. При синтезі ПСЧ у присутності епоксидної смоли утворюються частинки меншого розміру порівняно із системою, де ПСЧ формувались без епоксидного олігомеру. Використання ГПТЕС замість ТЕОС для утворення силоксанової складової нівелює вплив епоксидного олігомеру, тому його наявність не є яскраво вираженою.

Фрактальний аналіз кривих малокутового розсіювання рентгенівських променів для систем, синтезованих з використанням ТЕОС, показав, що залежно від вмісту наповнювача, а також умов формування (наявність / відсутність епоксидного олігомеру) утворюються структури з різною фрактальною організацією. Для композитів із вмістом 0,5 мас.% ПСЧ характерне утворення масових фрактальних агрегатів (М), розмір яких становить 23 і 42 нм для систем з формуванням золів у присутності та за відсутності епоксидної смоли, відповідно. При збільшенні вмісту ПСЧ до 10 мас.% для композитів, частинки золів яких утворені у присутності епоксидного олігомеру, з'являється другий рівень структурної організації (М → М).

Для на основі ГПТЕС система, яка містить 0,5 мас.% ПСЧ, сформованих у присутності епоксидного олігомеру, характеризується трирівневою ієрархічною структурою типу з повагою поверхневих (S) фракталів $S \rightarrow M \rightarrow S$, при цьому частинки на різних структурних рівнях мають розміри 11, 72 та більше 250 нм відповідно. При зростанні вмісту наповнювача у системі, незалежно від наявності епоксидного олігомеру, характер фрактальної агрегації змінюється. Для системи, що містить 10 мас.% ПСЧ, спостерігається ієрархічна структура типу $M \rightarrow S$ з розмірами частинок 10–11 і 63–70 нм відповідно. Отже, можна зробити припущення, що при формуванні ПСЧ у присутності епоксидного олігомеру відносно довгі слабкорозгалужені ланцюги на основі ГПТЕС утворюють більш розгалужені структури. При проведенні стадії гідролізу за відсутності епоксидного олігомеру спостерігається утворення більших за розміром структур, які характеризуються більшою щільністю.

ІНФРАЧЕРВОНИЙ СПЕКТРАЛЬНИЙ АНАЛІЗ ВУГЛЕПЛАСТИКІВ НА ОСНОВІ ПОЛІТРИФТОРХЛОРЕТИЛЕНУ

*Калініченко С. В.*¹, *Томіна А.-М. В.*², *Ср̑ьоміна К. А.*²

¹ТОВ «СПЕЦТЕХОСНАСТКА», Кам'янське, Україна

²Дніпровський державний технічний університет, Кам'янське, Україна
labcommat@gmail.com

Композиційні матеріали на основі фторполімерів стали невід'ємною частиною трибологічних з'єднань машин і механізмів, що використовують у багатьох галузях промисловості. Використання зазначених композитів дозволяє отримати підшипники ковзання з високою термостабільністю, відмінними антифрикційними й механічними властивостями та інертністю до багатьох агресивних хімічних середовищ і змащувачів. Технічні характеристики виробів із композиційних матеріалів, у тому числі на основі фторполімерів, безпосередньо залежать від міжмолекулярної взаємодії між в'язучим і наповнювачем. У зв'язку з цим, дослідження хімічної та фізичної взаємодії між компонентами, за допомогою ІЧ-спектрального аналізу, стало традиційним та увійшло до основних методів досліджень.

Приготування композиційних матеріалів на основі політрифторхлоретилену, що містять 5–20 мас.% дискретного вуглецевого волокна марки Toray T700SC (виробник компанія «Toray Group», Японія), здійснювали за допомогою компресійного пресування. Для ІЧ-спектрального аналізу використовували Nicolet 380 (ІЧ-спектрометр фірми Thermo Electron Corporation, США).

Аналіз результатів ІЧ-спектральних досліджень, що наведені на рис. 1, дозволяє відзначити, що у всіх зразках композиційних матеріалів спостерігається взаємодія за місцем подвійних зв'язків кінцевих активних груп, а також ймовірних кисневмісних груп політрифторхлоретилену.

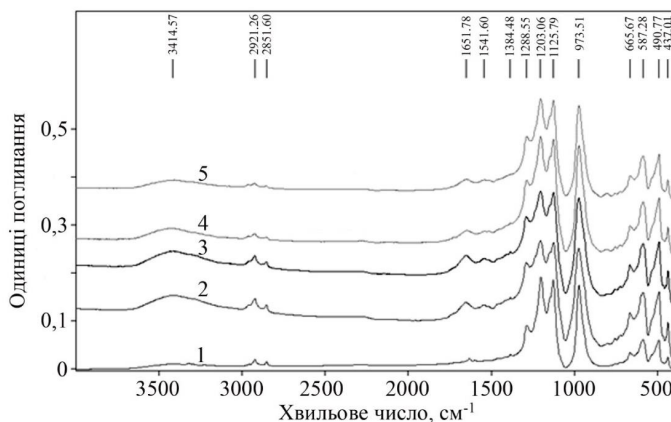


Рис. 1. ІЧ-спектри політрифторхлоретилену (1) та вуглепластиків на його основі, що містять: 5(2); 10(3); 15(4); 20(5) мас.% волокна

Окрім того, при збільшенні кількості наповнювача до 15–20 мас.% спостерігається руйнування Н-зв'язків та посилення π, π -взаємодії між останнім та полімерним в'язучим. Отже, при наповненні політрифторхлоретилену вуглецевим волокном композити зі вмістом наповнювача 15–20 мас.% характеризуються кращими технічними характеристиками.

**ПОЛУЧЕНИЕ СОПОЛИМЕРОВ МОДИФИЦИРОВАННЫХ
ПОЛИГЛИКОЛЬМАЛЕИНАТФТАЛАТОВ НА ОСНОВЕ КОМПОНЕНТОВ
С ОГРАНИЧЕННОЙ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ СОВМЕСТИМОСТЬЮ**

Киусе О. О., Савин С. Н.

Одесский национальный университет имени И. И. Мечникова,
кафедра прикладной химии и химического образования,
ул. Дворянская 2, Одесса, 65082, Украина
mazur.olesya@gmail.com

Для получения полимерных материалов, обладающих специфическими характеристиками, используют модифицированные ненасыщенные полиэфирные смолы, в частности, полигликольмалеинатфталаты (м-ПГМФ). На сегодняшний день сополимеры м-ПГМФ с виниловыми мономерами составляют 2 % всех полимерных материалов, которые вырабатываются в промышленности. Модификация их биологически активными комплексами позволяет получать фунгицидные краски, устойчивые к биологической коррозии композиционные материалы. Модификация аминами позволяет проводить отверждение при относительно низких температурах и существенно повысить скорость сополимеризации.

Однако, в некоторых случаях модификация олигомеров может привести к снижению их растворимости в виниловых мономерах. Особенно часто это наблюдается когда количество модификатора превышает концентрацию 0,2–1 моль/л. В этом случае компоненты могут образовывать однородную систему, но процесс растворения занимает слишком много времени. Так, для полного растворения м-ПГМФ модифицированного ацетатом кобальта (II) (1 моль/л) в метилметакрилате (ММА) при соотношении компонентов 1:1 требуется 5–6 месяцев. С другой стороны, при обработке ультразвуком, этот процесс завершается за 2–3 минуты. В некоторых случаях термодинамически несовместимые компоненты при обработке ультразвуком способны давать устойчивые эмульсии для получения качественных сополимерных материалов.

В данной работе нами была изучена возможность получения сополимеров м-ПГМФ с ММА в условиях ограниченной термодинамической совместимости компонентов при использовании ультразвуковой обработки системы с помощью диспергатора «УЗДН-1». Также было определено влияние предварительной обработки ультразвуком на растворимые системы и показано, что во всех случаях существенно увеличивается начальная скорость блочной радикальной сополимеризации с использованием, в качестве модификатора, пероксида бензоила и снижается температурный коэффициент реакции.

Для растворения компонентов с ограниченной термодинамической совместимостью также был использован циклогексанон, в качестве инертного растворителя. Такие системы удобны для изучения кинетики реакции сополимеризации, но не применимы для получения качественного полимерного продукта с хорошими прочностными характеристиками.

Полученные сополимеры обладают высокими прочностными характеристиками.

**ДОСЛІДЖЕННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ ПОЛІМЕРНИХ ГІДРОГЕЛЕЙ,
МОДИФІКОВАНИХ ГУМІНОВИМИ КИСЛОТАМИ**

*Лебедєв В. В.*¹, Мірошніченко Д. В.¹, Савченко Д. О.¹, Мазченко М. В.¹, Лендич Є. С.²,
Борісенко Л. М.²

¹Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»,
Харків, Україна

²Харківська гімназія № 65, Харків, Україна
vladimirlebedev1980@ukr.net

Одним з найважливіших напрямків сучасних досліджень у сфері полімерних матеріалів є сфера отримання і вивчення властивостей полімерних гідрогелів. Гідрогелі широко використовуються для різного промислового, харчового, косметологічного та біомедичного та іншого застосування – загусники, креми, гелі, речовини тканинної інженерії та молекулярного імпринтингу, сфера імуноізоляції та стоволової терапії, перев'язувальні матеріали, основа для доставки ліків та тощо.

Мета даної роботи – дослідити особливості отримання полімерних гідрогелів на основі желатину, модифікованих гуміновими кислотами. В роботі використовувалися желатин харчовий ТМ «Мрія» (Україна) марки П-11 згідно ТУ У 24.6-00418030-002: 2007 (частка вологи – не більше 16 %; кислотність рН = 5–7 для 1 % розчину) і гумінові кислоти у вигляді 8,5 % розчинів їдкою натру. Гідрогелі з желатину отримували шляхом отримання 10 % розчину желатину в дистильованій воді при 90–100 °С. Для аналізу реологічних властивостей отримували розчини желатину при різній концентрації гумінових кислот (5, 10, 15 % мас.).

Проведені дослідження дозволили отримати і дослідити полімерні гідрогелі желатину, модифіковані гуміновими кислотами різної природи. Показано, що гумінові кислоти надають специфічний вплив на процеси структуроутворення в полімерних гідрогелях на основі желатину, яке обумовлено різною природою і характеристиками гумінових кислот: наявність або відсутність частинок залишків вугілля різного ступеня дисперсності, ступінь метаморфізму вихідних вугілля, вихід летких речовин і вмісту кисню в них. Так, для гідрогелів з додаванням гумінових кислот в яких присутні частки залишків вугілля різного ступеня дисперсності, характерна знижена ступінь метаморфізму і вмісту кисню при підвищеному виході летких речовин у вихідному вугіллі спостерігається уповільнення структуроутворення у гідрогелях. У той же час, в гідрогелях з додаванням гумінових кислот з відсутністю частинок залишків вугілля різного ступеня дисперсності, підвишеним ступенем метаморфізму і вмісту кисню при зниженому виході летких речовин вихідного вугілля спостерігається посилення процесів структуроутворення. Також встановлено, що гумінові кислоти є активними антибактеріальними агентами в складі гідрогелю, які сповільнюють процеси утворення в них плісняви.

THERMAL SYNTHESIS OF METAL-CARBON NANOCOMPOSITES BASED ON SYNTHETIC HUMIC SUBSTANCES*Litvin V. A.*¹, *Njoh R. A.*², *Ozivska I. O.*¹¹Bohdan Khmelnytsky National University, Department of chemistry and nanomaterials Science, Cherkasy, Ukraine²Institute of Health Sciences, Department of Toxicology, Near East University, Nicosia, Cyprus

litvin_valentina@ukr.net

Interest in nanostructured materials, which include nanoparticles of ferromagnetic metals in a carbon matrix, is caused by specific magnetic properties manifested in the nanoscale state: high magnetization, the ability to change the values of the coercive force due to the dependence of this value on the size of nanoparticles, lower Curie temperature, high anisotropy, etc. For example, composite materials containing 3d-metal nanoparticles (Fe, Co, Ni) are of interest from the point of view of their use as heterogeneous catalysts in various chemical processes, components of dispersed radio-absorbing media in high-frequency devices, magnetic resonance imaging, and biomedicine.

We have proposed a new method of producing metal-carbon nanocomposites (Fe/C, Co/C, Ni/C), which includes three stages: 1) obtaining synthetic humic substances by oxidation of pyrocatechol with molecular oxygen in alkaline medium; 2) obtaining a metal humate by adding $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3$, $\text{Co}(\text{NO}_3)_2$ or $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ to a solution of synthetic humic substances; 3) reduction of Me^{n+} ions by pyrolysis in a hydrogen medium. The use of carbon-containing precursors on the basis of synthetic analogues of humic substances is due to the absence in their composition of the ordered structural fragments, from which the nanocrystal of carbon atoms can be obtained in the conditions of pyrolysis. At full stochastic structure the humic substances are characterized by the well-defined indicators content functional groups. The presence of carboxy-groups, quinoid fragments and phenolic hydroxy-groups in the structure of synthetic humic substances determined their ability to form salt and complexes with polyvalent cations of transition and non-transition metals. Carrying out the pyrolysis of the humates of iron group metals in the reducing atmosphere of H_2 removes almost completely the contained oxygen from the final product in the humic substances, partly in the form of CO_2 and partly in the form of water. Ions of the transition metal in these conditions are reduced to the metal atoms, forming nanoparticles surrounded by a grid of the randomly connected in a rigid structure of linear and cyclic carbon blocks. The pyrolysis temperature influence on the metal nanoparticles size and nature of the carbon matrix was investigated.

The structure and composition of the products were characterized by X-ray diffraction (Fig. 1), transmission electron microscopy, voltamperometry, and elemental analysis.

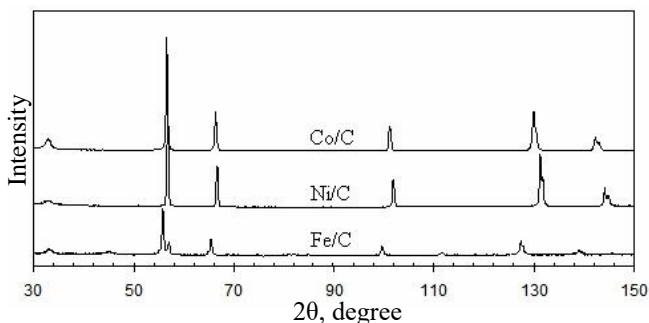


Fig. 1. The X-ray powder diffraction patterns of metal-carbon nanocomposites

СОРБЦІЙНІ ВЛАСТИВОСТІ КРІОГІДРОГЕЛІВ НА ОСНОВІ ЕКСТРАКТУ РОМАШКИ

Ляшок М. О., Іщенко О. В., Ляшок І. О.Київський національний університет технологій та дизайну, Київ, Україна
liashok87@gmail.com

Полімерні криогідрогелі ефективно використовуються у медицині і фармації. Гідрофільні полімерні плівки та гідрогелі застосовують у вигляді покриття для ран, які затримують вологу, абсорбують ексудати та втримують на поверхні шкіри тонкий шар власних протеїнів. Ці матеріали знижують температуру опікових пошкоджень шкіри та сприяють комфортному загоєнню та знеболенню рани. Для виготовлення гідрогелів часто застосовують полівініловий спирт (ПВС), який виконує функцію інертної полімерної основи [1]. Для надання лікувальних властивостей в полімерну матрицю вводять лікарські засоби [2]. Альтернативою синтетичним лікам, є застосування рослинних екстрактів, які мають невелику токсичність та відсутність побічних дій. Екстракт ромашки лікарської є протизапальним, заспокійливим, кровосинним, знеболювальним, антигестамінним та противірусним засобом, прискорює регенерацію епітелію. Суцвіття ромашки містять 0,2–0,8 % ефірної олії, сесквітерпенові вуглеводи, спирти, лектони матрицині і матрикарин, флавоноїди, кумарини, полісахариди, каротин, аскорбінову кислоту, ізовалер'янову, каприлову та ін. органічні кислоти.

В роботі були створені та досліджені криогідрогелі на основі ПВС та екстракту ромашки. Встановлено, що рівноважний ступінь набухання криогідрогелів на основі екстракту ромашки досягається після 24 годин спостережень та лежить в межах 978 % при дії фізіологічного розчину, і 984 % при дії дистильованої води. При відсутності рослинного компонента у ПВС гідрогелі рівноважний ступінь набухання складає 920–960 % не залежно від середовища набухання. Отже екстракт ромашки лікарської не значно підвищує ступінь набухання гідрогелів. Втрата кольору гідрогелевих зразків на рослинній основі практично не помітна. Спостерігається інтенсивне вивільнення рослинного компонента, як у дистильовану воду, так і у фізіологічний розчин. Було розраховано константи швидкості сорбції та висушування гідрогелів та швидкості набрякання та висушування. Встановлено, що перші 30 хвилин дії вологого середовища характеризуються максимальними значеннями швидкості набрякання 3,83 г/год та 3,63 г/год для дистильованої води та фізіологічного розчину відповідно. Для цього часу характерні константи швидкості при набряканні у воді 5,17 та у фізіологічному розчині 5,33. Висушування зразка відбувається перші 2 години із середньою швидкістю 0,75 г/год та константи швидкості 9,17. Полівініловий спирт у гідрогелі на основі екстракту ромашки служить, своєрідним «депо» для рослинного компоненту, який тривало вивільняється з часом, рівноважний ступінь набухання криогідрогелів досягається через 1 годину після початку експерименту. Встановили, перспективу застосування екстракту ромашки для одержання ПВС плівок та гідрогелів для перев'язувальних засобів з пролонгованою дією. Дослідження довели вплив різних чинників на сорбційні характеристики криогідрогелів та залежить від фізичної взаємодії між полімером та екстрактом лікарської рослини, а також, природи розчинника.

Література

1. I. Gibs, H. Janik A review on polymeric hydrogel membranes for wound dressing applications: PVA-based hydrogel dressings Chem Chem Tech, 4 (4) (2010), С. 297-304.
2. Купріянова О. М., Хохленкова Н. В., Ярких Т. Г. Вивчення актуальності розробки нових перев'язувальних засобів з використанням сировини природного походження. Запорозький медичинський журнал, – 2011. – Т. 13, № 4. – С. 114-115.

ПРОГНОЗУВАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ ГУМИ, ЯК МАТРИЧНОЇ СТРУКТУРИ

Павленко А. А., Гаврилюк Ю. В., Васильєв Р. В., Євдокименко Н. М.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет», Дніпро, Україна
aavsa@ukr.net

Гума – унікальний матеріал конструкційного призначення, який поєднує в собі властивості різної природи: міцність, що має потенційну природу, та здатність розсіювати механічну енергію, тобто характеризується кінетичною рухливістю сегментів. У фізиці твердого тіла властивості таких матеріалів пояснюють утворенням матричних структур.

Об'єктом дослідження є протекторна гумава суміш, що додатково містить високодисперсний наповнювач – алюмосилікатні порожнисті мікросфери (АСПМ), які утворюються при високотемпературному факельному згорянні кам'яного вугілля.

Гумові суміші виготовляли за загально прийнятою методикою, процес вулканізації вивчали при температурі 153 °С, протягом 3600 с.

В результаті процесу вулканізації відбувається утворення просторової сітки, гумава суміш перетворюється в гуму – матеріал з в'язко-текучого стає високоеластичним, також втрачається повзучість, розчинність та пластичність. Отже, гума – продукт хімічної взаємодії. Оптимальний термін вулканізації можна визначити, як за рівнем міцності (ГОСТ 270-75) або за даними методами віброреометрії.

Процес вулканізації еластомерної композицій оцінюють за характером зміни в'язкості суміші при заданій температурі за реограмами, знятими на реометрі – «Монсанто» (ГОСТ 10722 та ГОСТ 12535-84).

Суть метода полягає у тому, що вимірюють момент крутіння при деформуванні зразка гумової суміші, яке відбувається при коливанні ротору з біконічним диском (задану частоту та амплітуду коливання. Момент крутіння визначає концентрацію поперечних зв'язків, що утворюються в гумовій суміші при вулканізації.

Таблиця 1. Дані методу віброреометрії для протекторної гумової суміші, що містить АСПМ та результати розрахунків параметрів геометричної фазової морфології

Показник	Дослід				
	1	2	3	4	5
Зміна в'язкості в процесі вулканізації (ступінь зшивання), дН·м	21.83	22.96	22.88	22.87	23.86
Тривалість процесу вулканізації для забезпечення ступеню протікання процесу вулканізації на 10 %, 60 с.	2.55	2.93	2.91	2.95	2.65
Розмір часток гетерофаз, ум. од.	16	15	14	14	15

Вивчено вплив АСПМ на рівень фізичних та деформаційно-міцносних властивостей протекторних гум, проведено розрахунки параметрів геометричної фазової морфології за даними віброреометрії з метою прогнозування рівня властивостей.

Виявлено, що максимальний рівень деформаційно-міцносних властивостей реалізується при утворенні геометричної фазової морфології з мінімальним розміром часток гетерофаз.

СИНТЕЗ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ НОВИХ ПОЛІУРЕТАНСЕЧОВИН, ЯКІ МІСТЯТЬ ЯК ПОДОВЖУВАЧ МАКРОЛАНЦЮГА 3,6-ДИОКСООКТАН-1,8-ДІАМІН

Примущко С. О., Козлова Г. А., Гладирь І. І., Рожнова Р. А., Галатенко Н. А.

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України, Київ, Україна

Primushko.S@gmail.com

Одним із перспективних напрямів хімії високомолекулярних сполук на сьогодні залишається створення нових біосумісних полімерних матеріалів.

Відомо, що поліуретансечовини (ПУС), синтезовані з використанням як подовжувачів макроланцюга діамінів, проявляють стабільність до біодеградації та високу біосумісність, що дає можливість в подальшому використовувати ці матеріали в медицині. Тому залишається актуальною розробка методів синтезу нових ПУС та дослідження їх властивостей.

З метою створення полімерних матеріалів різної просторової будови та композицій на їх основі для іммобілізації біологічно активних сполук та лікарських речовин було розроблено метод синтезу ряду плівкотвірних поліуретансечовин на основі діізоціанатного форполімеру (ДФП) за різного співвідношення 4,4'-діамінодифенілметану (ДАДФ), 1,6-гексаметилендіаміну (ГМДА), до 3,6-діоксооктан-1,8-діаміну (ДООДА), як подовжувачів макроланцюга за мольного співвідношення 0,7:0,3; 0,5:0,5, 0,3:0,7 (рис. 1).

Синтез ПУС проводили у 2 стадії:

1. На першій стадії проводили синтез ДФП з періодично відбираючи проби для визначення вмісту вільних ізоціанатних груп у реакційній суміші до значення, близького до теоретично розрахованого (6,23%), ізоціанатне число визначали титриметричним методом.

2. Подовження макроланцюга проводили шляхом взаємодії 20 %-го ДФП в ДМАА за мольного співвідношення компонентів ДФП до ДООДА, ГМДА, ДАДФ за різного мольного співвідношенні.

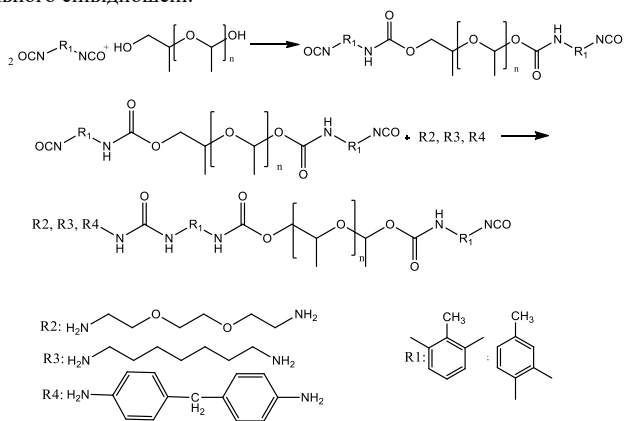


Рис. 1. Схема синтезу ПУС

Синтезовані полімери являють собою еластичні, прозорі плівки, товщиною 0,3 мм, міцність при розриві в межах (0,06–0,20)±0,01 МПа, відносне подовження (27–698)±10 % та проведено їх аналіз методом ІЧ-спектронетрії.

ХІМІЧНИЙ СИНТЕЗ ПОЛІІНДОЛУ

Пришляк Х., Аксіментьєва О.

Хімічний факультет

Львівський національний університет імені Івана Франка

Вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

pislakhristina@gmail.com

Одним з яскравих представників спряжених полімерів є полііндол, який має досить високу електропровідність та хорошу термостабільність, володіє високою окиснювально-відновною активністю. Хімічне окиснення індолу можливе при використанні різних окисників, наприклад CuCl_2 , FeCl_3 та KIO_3 в як у водних, так і органічних розчинниках [1]. Метою нашої праці стало дослідження умов хімічної полімеризації індолу під дією персульфату амонію, встановлення особливостей структури і властивостей одержаного полімеру.

Нами було встановлено, що при проведенні хімічного синтезу відносний вихід темно-зеленого порошку полііндолу становить 71%. За даними електронної мікроскопії виявлено, що в процесі полімеризації відбувається утворення упорядкованих структур поліедричного типу з нанорозмірами 30–50 нм.

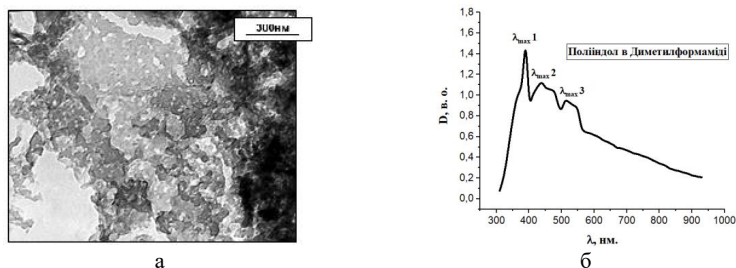


Рис. 1. (а) ТЕМ-зображення суспензії полііндолу; (б) Спектр поглинання 0,01 М розчину полііндолу в диметилформаміді

При розчиненні полімеру спостерігається сольватохромний ефект – зміна забарвлення розчину, і відповідно, спектру, в залежності від природи розчинника. В оптичних спектрах розчинів полііндолу спостерігаються смуги поглинання при $\lambda = 390$ і 510 нм (діоксан), $\lambda = 390, 440$ і 510 нм (ДМФА) та $\lambda = 400, 510$ і 540 нм (хлороформ) (рис. 1,б). Ефект пов'язаний зі специфічною взаємодією полііндолу з органічними розчинниками різної полярності [2]. Експериментально визначено електричну провідність отриманого полімеру, яка виявилась на рівні $5 \cdot 10^{-3}$ См/см. За температурною залежністю питомого опору (в координатах рівняння Арреніуса) визначено енергію активації провідності $E_a = 0,087$ еВ, що свідчить про напівпровідникові властивості синтезованого полімеру.

1. Billauda D., Maarouf E. B., Hannecart E. Chemical oxidation and polymerization of indole // *Synthetic Metals*. 1995. Vol. 69. Issues 1–3. P. 571-572. DOI: [https://doi.org/10.1016/0379-6779\(94\)02573-H](https://doi.org/10.1016/0379-6779(94)02573-H)

2. Brown D.W., Floyd A.J., Sainsbury M. J. *Spectroscopy of Organic Substances*. New York.: Wiley-Blackwell, 1988.

ЗАСТОСУВАННЯ ПРИНЦИПІВ «ЗЕЛЕНОЇ ХІМІЇ» ПРИ ПРОЕКТУВАННІ ВИРОБНИЦТВ СИНТЕЗУ ВИСОКОМОЛЕКУЛЯРНИХ СПОЛУК

Рассоха О. М., Черкашина Г. М., Мажуга О. В.

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»,
Харків, Україна
rassan2000@ukr.net

При проектуванні хіміко-технологічних виробництв (в тому числі і високомолекулярних сполук) доцільно застосовувати неформальне правило «трьох Е»: ефективність (технологічність), економічність та екологічність.

На сучасному етапі розвитку галузі багатотоннажного синтезу високомолекулярних сполук (поліетилен, поліпропілен, полівінілхлорид, поліетилентерефталат та ін.) при проектуванні виникає нагальна потреба застосування принципів «зеленої хімії» сформульованих Полом Анастасом і Джоном С. Уорнером, що забезпечує розробку ефективних та екологічних технологічних процесів.

В рамках даної роботи пропонується широко використовувати принципи «зеленої хімії» на першому (передпроектному) етапі проектування багатотоннажних хіміко-технологічних виробництв високомолекулярних сполук, а саме: при розробці техніко-економічного обґрунтування проекту (ТЕО) та його подальшої екологічної експертизи в різних формах.

При цьому в залежності від характеру хіміко-технологічного процесу синтезу полімерів рекомендується диференційований відбір принципів «зеленої хімії» на стадії розробки техніко-економічного обґрунтування проекту.

Особливу увагу слід приділяти на стадії розробки ТЕО при виборі технології виробництва товарної продукції, основних параметрів хіміко-технологічного процесу (температура, тиск, час, співвідношення інгредієнтів реакційної суміші, наявність та тип каталізатору або каталітичного комплексу тощо) ефективному аналізу застосування принципів «зеленої хімії» з урахуванням правила «трьох Е», використання на першому етапі проектування рішень з застосуванням маловідходних та безвідходних технологій.

Після розробки за відповідною нормативною процедурою техніко-економічного обґрунтування проекту необхідно провести екологічну експертизу ТЕО, враховуючи практично всі дванадцять принципів «зеленої хімії».

На цій стадії проектування доцільно ретельно, якісно, на високому науковому рівні провести аналіз на відповідність запропонованого хіміко-технологічного процесу синтезу високомолекулярних сполук принципам «зеленої хімії» при дотримуванні вимог неформального правила «трьох Е».

В роботі наведені конкретні приклади застосування принципів «зеленої хімії» на першому етапі проектування багатотоннажних високомолекулярних сполук, а саме: поліетилену високого тиску (низької густини) та поліетилену низького тиску (високої густини).

На даних прикладах показана висока технологічна та екологічна ефективність використання вказаних принципів для одержання готової (товарної) продукції з високим комплексом деформаційно-міцнісних, технологічних та експлуатаційних властивостей при мінімальному негативному впливі на довкілля та здоров'я робітників підприємства, що проектується.

Попередній аналіз показав, що максимальний позитивний ефект використання принципів «зеленої хімії» можна досягти при проектуванні хіміко-технологічних процесів синтезу високомолекулярних сполук, які одержують методом поліконденсації (прості та складні поліефіри, феноло-формальдегідні, карбамідні, епоксидні реакційноздатні олігомери та ін.).

**ОПТИМІЗАЦІЯ ПАРАМЕТРІВ ТЕХНОЛОГІЧНОГО ПРОЦЕСУ
ВИРОБНИЦТВА ПОЛІКАПРОАМІДУ***Рассоха О. М.*, Черкашина Г. М., Деріус Д. В.Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»,
Харків, Україна
rassan2000@ukr.net

З широкого спектру промислових інженерних термопластичних полімерних матеріалів в останні роки набув значне застосування полікапроамід (або поліамід 6), який використовується в машинобудуванні, електротехніці, приладобудуванні та інших галузях народного господарства.

Основними методами одержання полікапроаміду є гідролітична або аніонна полімеризація з розкриттям циклу ϵ -капролактаму. В залежності від методів полімеризації одержують готову продукцію з різними молекулярно-масовими характеристиками та технічними властивостями.

В рамках даної роботи здійснена оптимізація параметрів технологічного процесу виробництва полікапроаміду в результаті гідролітичної полімеризації ϵ -капролактаму під впливом води в присутності досліджених каталітичних систем кислотного типу.

Основними параметрами технологічного процесу синтезу поліаміду 6 гідролітичним способом були: температура, час проведення окремих стадій, тип та концентрація каталітичних систем кислотного типу, черговість та тривалість дозування інгредієнтів реакційної суміші.

Технологічний процес одержання полікапроаміду гідролітичним способом має автокаталітичний характер, що дозволяє цілеспрямовано регулювати молекулярно-масові характеристики готової (товарної) продукції.

Для різних типів каталітичних систем кислотного характеру в рамках даної роботи в результаті оптимізації основних параметрів технологічного процесу (температура та ін.) проведено дослідження впливу швидкості хімічної реакції на молекулярну масу та молекулярно-масовий розподіл макромолекул полікапроаміду.

Деякі складові каталітичних систем реакційної суміші при одержанні термопластичної високомолекулярної сполуки (поліаміду 6) одночасно виконують функції стабілізуючих компонентів при блокуванні кінцевих груп синтезованого полімеру.

Показано, що при ретельному дотримуванні експериментально визначених оптимальних параметрів технологічного процесу синтезу полікапроаміду можна одержати полімер з високим комплексом міцностних, технологічних та експлуатаційних властивостей.

Встановлено, що каталітичні системи кислотного типу при гідролітичній полімеризації ϵ -капролактаму по-різному впливають на швидкість хімічної реакції і, як наслідок, на технічні властивості поліаміду 6.

При цьому внаслідок зниження температури гідролітичної полімеризації ϵ -капролактаму на 10–15 °С в порівнянні з базовим технологічним процесом одержання полікапроаміду дещо зменшуються негативні явища при синтезі (наприклад, окислення високомолекулярної сполуки).

В роботі здійснено порівняльні оцінки технічних властивостей полікапроаміду, одержаного за базовою технологією (на підставі даних існуючих виробництв) та полімеру, синтезованого з урахуванням експериментально визначених оптимальних технологічних параметрів процесу синтезу даної високомолекулярної сполуки.

**УДАРОСТІЙКІ ФУРАНО-ЕПОКСИДНІ ЗАХИСНІ АНТИКОРОЗІЙНІ
ПОКРИТТЯ**

Рассоха О. М., Черкашина Г. М., Малихіна А. В.

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»,
Харків, Україна
rassan2000@ukr.net

Розробка та дослідження полімерних композиційних систем з комплексом високих деформаційно-міцностних, технологічних, експлуатаційних властивостей та доступної сировинної бази є актуальною та перспективною задачею сучасного полімерного матеріалознавства.

З цією метою для захисту зовнішньої поверхні магістральних газопроводів та технологічного обладнання застосовують захисні покриття на основі фурано-епоксидних полімерів.

Однак в деяких випадках захисні антикорозійні покриття мають відносно низьку стійкість до ударних навантажень під час експлуатації.

Для підвищення комплексу фізико-механічних параметрів (головним чином, ударної в'язкості) захисні антикорозійні покриття на основі фурано-епоксидних полімерів до матриці додають дисперсний (нульмірний) наповнювач – суспензійний полівінілхлорид, який при підвищеній температурі еластифікує фурано-епоксидний полімер.

Доцільно було дослідити вплив дисперсного суспензійного полівінілхлориду на комплекс властивостей фурано-епоксидних систем та основні параметри захисних антикорозійних покриттів на їх основі.

Структурування фурано-епоксидного реакційноздатного олігомеру здійснювалось амінофенольними тужавлювачами при температурі 80 °C впродовж 4 годин.

Експериментально встановлено, що додавання до фурано-епоксидної полімерної матриці більше 20 % суспензійного полівінілхлориду недоцільно, тому що виникають технологічні труднощі при формуванні якісного покриття.

Введення у фурано-епоксидний полімер дисперсного суспензійного полівінілхлориду у оптимальній кількості дозволяє суттєво (більш ніж у 2 рази) підвищити стійкість матеріалу до ударних навантажень.

При цьому рівень інших міцностних параметрів (міцність при згині, стисненні, модуль пружності), а також показників, що характеризують експлуатаційні властивості покриття залишилися майже незмінними.

При формуванні якісного захисного покриття важливе значення мають також параметри технологічного процесу, що забезпечують оптимальні умови одержання структурованого матеріалу з мінімумом структурних дефектів в об'ємі та на поверхні і комплексом високих експлуатаційних параметрів.

Розроблений технологічний процес «вписується» у базову технологію формування захисного антикорозійного покриття на зовнішній поверхні магістральних трубопроводів та іншого технологічного обладнання.

Кількість прошарків захисного матеріалу на поверхні складає 3–5.

Склад захисного покриття, а також технологічна схема формування антикорозійної системи були впроваджені у дослідно-промислових умовах у Харківській області.

Отримані результати показали високу ефективність розробленого захисного антикорозійного полімерного композиційного матеріалу.

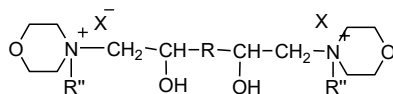
**ПОЛІМЕРНІ ІОННІ РІДИНИ ТА ІОННІ РІДИНИ НА ОСНОВІ ПОХІДНИХ
ТЕТРАГІДРО-1,4-ОКСАЗИНУ ТА 1,2-ЕПОКСИ-4,7-ДІОКСОНОНЕН-8**

Свердліковська О. С., Черваков О. В.

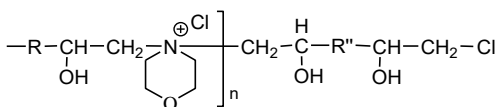
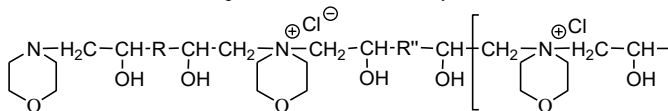
ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет», Дніпро, Україна
o.sverdlikovska@gmail.com

Метою даної роботи було вирішення актуального питання сьогодення – розробка наукових і практичних основ створення полімерних іонних рідин та іонних рідин іононогового типу для вирішення нагальних проблем хімічної та харчової технологій.

В результаті виконання роботи узагальнено та розширено існуючі теоретичні та експериментальні знання щодо нового класу полімерних іонних рідин іононогового типу. Отримані результати надали можливість розвитку науково-методичного підходу, а саме розроблено спосіб синтезу полімерних іонних рідин та іонних рідин іононогового типу, які не поступаються світовим аналогам за рівнем іонної провідності, але в значно більшому інтервалі температур. Синтезовані полімерні іонні рідини та іонні рідини іононогового типу на основі похідних 1,2-епоксі-4,7-діоксононен-8 і тетрагідро-1,4-оксазину загальних формул



Іонні рідини іононогового типу



Полімерні іонні рідини іононогового типу

Встановлено, що порівняно з відомими світовими аналогами (отримуваними радикальною полімеризацією метакрилатів пірролідінію або імідазолію), нові полімерні іонні рідини та іонні рідини іононогового типу мають суттєво вищі, на п'ять-шість порядків, значення іонної провідності ($\sim 10^{-1}$ – 10^{-4} См·см⁻¹) та зберігають ці властивості на такому рівні навіть за температур -16 °C ÷ -140 °C.

Розроблені рекомендації щодо вирішення науково-прикладної проблеми розробки полімерних іонних рідин та іонних рідин іононогового типу з високою іонною провідністю зі збереженням їх рідкого стану у широкому діапазоні температур. Виявлено кореляційні рівняння, що встановлюють взаємозв'язок між хімічною будовою полімерних іонних рідин та іонних рідин іононогового типу, їх фізико-хімічними та функціональними властивостями.

Встановлена принципова можливість обґрунтованого визначення структурно-хімічних характеристик носіїв іонних рідин, що забезпечують ефективно застосування полімерних іонних рідин та іонних рідин іононогового типу в якості розчинників і каталітичних середовищ в органічному синтезі та синтезі полімерів, коагулянтів, модифікаторів поліграфічних і лакофарбових матеріалів, а також композицій на основі природних полімерів тощо.

ВПЛИВ УЛЬТРАЗВУКУ НА ШВИДКІСТЬ ГЕЛЕУТВОРЕННЯ ПРИ СИНТЕЗІ КОМПОЗИТУ ТИПУ «СИЛКАГЕЛЬ – Na₂SO₄»*Сергієнко Я. О., Коломієць О. В., Сухий К. М.*ДВНЗ «Український держаний хіміко-технологічний університет», Дніпро, Україна
lenysik_kol@i.ua

Синтезу сорбційних матеріалів присвячено багато робіт, як в нашій країні так і за кордоном. Вивчення впливу параметрів режиму золь – гель процесів отримання на властивості композитних сорбентів, дасть змогу конструювати адсорбенти з заданими для конкретних адсорбційних процесів властивостями.

Мета роботи – визначити як впливає використання ультразвуку при синтезі композиту «силкагель – Na₂SO₄» на його властивості.

В ході досліджень золь композиту був підданий ультразвуковому впливу (44 кГц, 10 хв). Різкого прискорення гелеутворення в цьому випадку не спостерігалось. Однак, проведені дослідження структури золів за допомогою електронної мікроскопії (ПЕМ) показали розходження в кінетиці гелеутворення. Як видно з рис. 1, при спостереженні за зольом того самого складу, нанесеного на предметне скло, явно видно, що гелеутворення (формування пористої фрактальної структури) починається якщо золь попередньо був підданий ультразвуковому впливу.

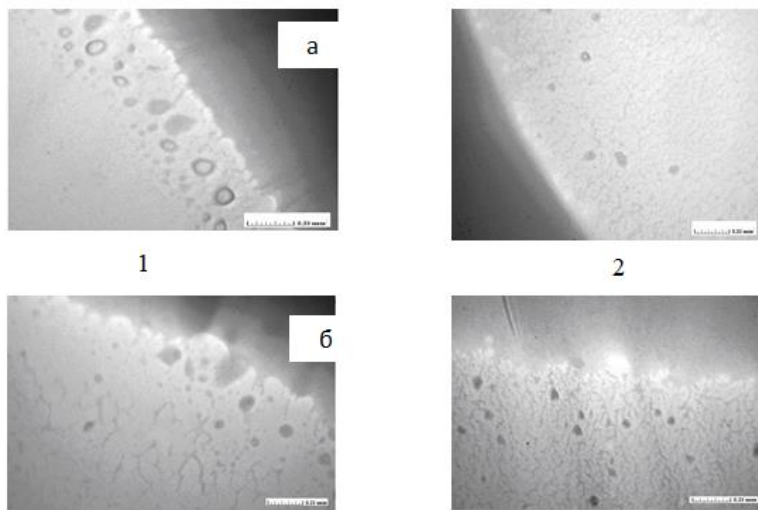


Рис. 1. ПЕМ-зображення краплі силікатного золю одного складу без ультразвукової обробки (1) і із застосуванням ультразвукової обробки (2) (а, б, – зображення різних фрагментів зразків)

При сушінні отриманих гелів у вакуумі при 80 °С, протягом 5 год, як правило, формуються грубозернисті білі порошки. Термообробка гелів у повітряній атмосфері при 200 °С приводить до утворення крупнокристалічних коричневих порошоків, колір яких заглиблюється у випадку присутності органічних модифікаторів.

**ОРГАНІЧНИЙ СКЛАДНИК СУПУТНОГО ПРОДУКТУ ПРОЦЕСУ
ОТРИМАННЯ СОНЯШНИКОВОЇ ОЛІЇ ЯК ІНГРЕДІЄНТ ЕЛАСТОМЕРНИХ
КОМПОЗИЦІЙ**

Скрипкіна М. Д., Соколова Л. О., Овчаров В. І.

Державний вищий навчальний заклад «Український державний хіміко-технологічний університет», 49005, просп. Гагаріна, 8, Дніпро, Україна
mary.skripkina31@gmail.com

Останні десятиліття зростає загроза суттєвого забруднення довкілля внаслідок інтенсивної техногенної діяльності людини. Особливо небезпечними є продукти нафтохімічної промисловості, зокрема складники гумових сумішей, гумові вироби на стадіях виробництва й експлуатації. Серед складників особливо небезпечними є прискорювачі сірчаної вулканізації, здатні утворювати канцерогенні нітрузоаміни, активатор сірчаної вулканізації оксид цинку, підвищені концентрації якого викликають порушення функціонального стану окремих органів і систем людини; пластифікатори на основі сировини нафтового походження, що містять канцерогенні поліароматичні вуглеводні. Підвищення вимог екологічної безпеки гумових виробів у процесі їх виготовлення й експлуатації сприяло появі досліджень з використання в рецептурі гум інгредієнтів на основі сировини рослинного походження.

З іншого боку, Україна як один із найбільших у світі виробників соняшникової олії на технологічній стадії її очищення отримує десятки тисяч тонн замасленого відпрацьованого адсорбенту, який належить до IV класу небезпеки. Тому актуальним є створення технологій переробки супутніх продуктів і відходів основних стадій виробництва. Відсутність таких технологій призводить до накопичення супутніх продуктів і відходів на промайданчиках, потім на полігонах і, як наслідок, збільшує екологічні ризики.

Аналіз наукових даних про хімічний склад супутнього продукту після стадії вінтеризації соняшникової олії засвідчив, що він може бути екологічно чистим сировинним ресурсом для отримання інгредієнтів еластомерних композицій нафтового походження. Зокрема, раніше нами було встановлено, що очищений алюмосилікатний адсорбент з супутнього продукту у складі еластомерної композиції на основі бутадієнметилстирольного каучуку марки СКМС-30 АРК є мінеральним наповнювачем напівпосилювальної дії, який надає гумовим сумішам покращені технологічні властивості, задовільне співвідношення кінетичних параметрів сірчаної вулканізації та рекомендується для використання при компресійному способі виготовлення гумотехнічних виробів. У даній роботі досліджено процес формування технологічних, фізико-механічних, динамічних та інших властивостей еластомерних композицій шинного типу за наявності органічного складника супутнього продукту після вінтеризації процесу отримання соняшникової олії. Отримані результати дозволяють зробити висновок про принципову можливість використання цього продукту як біоінгредієнта еластомерних композицій на основі каучуків загального призначення.

СИНТЕЗ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ КОМПОЗИТНИХ МАТЕРІАЛІВ АНТИБАКТЕРІАЛЬНОЇ ДІЇ НА ОСНОВІ КРЕМНЕЗЕМУ ТА ПОЛІМОЛОЧНОЇ КИСЛОТИ

*Тумко А. В.*¹, Фуртат І. М.¹, Вакулук П. В.¹,

Козакевич Р. Б.², Поліщук Л. М.², Тьортих В. А.²

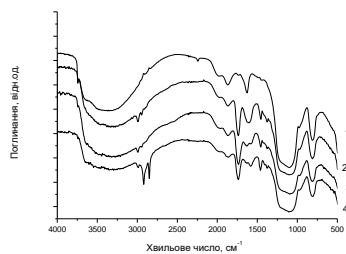
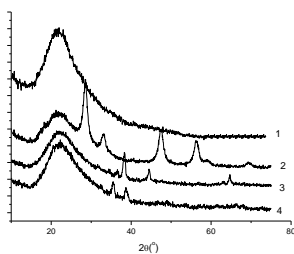
¹Національний університет «Кієво-Могилянська академія», Київ, Україна

²Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка НАН України, Київ, Україна

nastusia.com@gmail.com

Хоча і відмічено швидкий прогрес у створенні лікарських засобів і розвитку фармацевтичних технологій, інфекційні захворювання бактеріальної етіології й досі залишаються однією з головних проблем в усьому світі. Однією з причин, що не дозволяє подолати цю проблему, є здатність патогенних бактерій активно набувати стійкості до впливу антимікробних сполук. Це, своєю чергою, призводить до зниження ефективності дії антибіотиків і необхідності підвищення їхніх ефективних доз. Провідною стратегією боротьби з резистентними формами бактерій є створення принципово нових антимікробних агентів, серед яких перспективними вважаються наночастинки металів. Вони мають унікальні фізико-хімічні характеристики, внаслідок чого надзвичайно привабливі для застосування в різних сферах життєдіяльності людини, зокрема створенні нових ефективних матеріалів з бактерицидними властивостями.

В цій роботі досліджували композити на основі полімолочної кислоти (ПМК) та кремнезему, одержані шляхом *in situ* полімеризації L-лактиду з розкриттям його кільця, що містять наночастинки срібла (Ag), оксидів церію (CeO₂) чи міді (CuO). Формування нанорозмірних частинок оксидів міді і церію проводили шляхом просочення пірогенного кремнезему А-300 солями цих металів з подальшою температурною обробкою за 430 °С. Наночастинки срібла одержували просоченням кремнезему А-300 з прищепленими ≡SiH групами нітратом срібла AgNO₃ за кімнатної температури.



Рентгенівські дифрактограми пірогенного кремнезему А-300 (1), композиту А-300/CeO₂/ПМК (2), композиту А-300/Ag/ПМК (3), композиту А-300/CuO/ПМК (4) ІЧ-спектри пірогенного кремнезему А-300 (1), композиту А-300/CuO/ПМК (2), композиту А-300/CeO₂/ПМК (3), композиту А-300/Ag/ПМК (4)

На дифрактограмах композитів з частинками срібла, або оксидів церію та міді в поверхневому шарі виявляли рефлекси типові для кристалічних ґраток їх відповідних структур. Для підтвердження полімеризації L-лактиду з розкриттям його кільця отримували ІЧ-спектри вихідного кремнезему та одержаних композитів. Показано, що після полімеризації лактиду в ІЧ-спектрі спостерігається зменшення інтенсивності смуги валентних коливань вільних силанольних груп та з'являються інтенсивні смуги поглинання в області валентних коливань С-Н і смуга поглинання при 1740 см⁻¹, яка відноситься до валентних коливань карбонільної групи (C=O).

ДОСЛІДЖЕННЯ ХІМІЧНОГО ОПОРУ ЕПОКСИДНИХ СКЛОПЛАСТИКІВ

Хащинська А. В., Карандашов О. Г., Авраменко В. Л., Підгорна Л. П.

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»,

Харків, Україна

avramenko@kpi.kharkov.ua

Високі фізико-механічні характеристики епоксидних склопластиків є необхідною, але недостатньою умовою для успішного застосування цих матеріалів в різних конструкціях. Рациональне використання склопластикових виробів повинно базуватися на дослідженні їх хімічного опору, яке включає оцінку стабільності їх властивостей в умовах дії середовищ, напружень та температур.

Метою даного дослідження було виявлення можливості використання з'вязних на основі епоксидних олігомерів марок Epicote 828, CHS Epoxy 520, твердників ізометилтетрагідрофталевого ангідриду (ІМТГФА) та модифікованого ІМТГФА марки ХТ-152Б, прискорювача марки УП 606/2, а також модифікаторів – поліуретанових олігомерів марок Пластур і УРЕП та похідних оксипропілтриметоксисиланів марок GLIMO та MEMO для виробництва склопластикових труб методом косошарого поздовжньо-поперечного намотування, які мають бути призначеними для транспортування питної води, каналізаційних стоків та різних рідких середовищ при підвищеній температурі.

Робота виконувалась за завданням підприємства ТОВ «Склопластикові труби» (м. Харків).

У склопластиків, які одержували на основі епоксидних компаундів оптимальних складів досліджували сорбційно-дифузійні процеси і зміну експлуатаційних властивостей під впливом різних хімічних середовищ (10 % розчин NaOH, 10 % розчин NaCl, 10 % розчин HNO₃, 1 % розчин NH₂Cl, 3 % розчин ПАР ОП-7, розчин HCl 36 %, розчин HClO₄ 10 %, розчин H₂SO₄) при кімнатній температурі протягом 1–30 діб та при кип'ятінні протягом 1–7 діб.

Було встановлено, що найбільша зміна маси зразків при знаходженні в різних середовищах відбувається через 24 години. Рівноважне значення сорбції епоксидних склопластиків досягається через 75 годин з моменту занурення.

Дослідження за зміною фізико-механічних показників склопластиків (ударної в'язкості та руйнівної напруги у кільцевому напрямі) показали, що значення цих показників після витримки в різних середовищах протягом 15–30 діб зменшуються на 5–10 %, що є допустимим і дозволяє експлуатувати склопластикові труби з цих компаундів для транспортування багатьох хімічних середовищ та каналізаційних стоків різних підприємств.

Для деяких складів композицій при кип'ятінні зразків склопластиків до 7 діб визначається оборотна дія середовища, і значення досліджуваних показників збільшуються, навіть вище похідних. Підвищення фізико-механічних показників після кип'ятіння можна пояснити тим, що при підвищеній температурі відбуваються додаткові процеси структурування систем, а також проявляється пластифікуюча дія сорбованого середовища, проте не відбуваються процеси деструкції або хімічний розклад затвердених зв'язних.

Одночасно вивчали можливу зміну показника теплостійкості за Мартенсом. Результати показали, що значення цього показника практично не змінюється після контакту з досліджуваними середовищами.

Таким чином проведеними дослідженнями хімічного опору епоксидних склопластиків встановлено, що вони мають достатньо високі фізико-механічні показники і теплостійкість після дії різних хімічних середовищ.

СИНТЕЗ ТА СТРУКТУРА ГІДРОГЕЛІВ ПОЛІВІНІЛОВОГО СПИРТУ ТА ЖЕЛАТИНУ, ОДЕРЖАНИХ МЕТОДОМ КРІОСТРУКТУРУВАННЯ*Фармад К. Ф.*¹, Мурланова Т. В.¹, Діхтярук Є. В.², Матковський О. К.², Паєнтко В. В.²¹Національний університет «Кієво-Могилянська академія», Київ, Україна²Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка НАНУ, Київ, Україна

christina.farmand@gmail.com

Кріогелі на основі полівінілового спирту (ПВС) – макропористі полімерні гідрогелі, що утворюються в результаті заморожування та фізичної або хімічної зшивки, витримання в замороженому стані (кріоконцентрування), подальшого відтавання і висушування. Вони знаходять застосування в багатьох прикладних галузях, особливо як матеріали біомедичного і біотехнологічного призначення, зокрема, в гелевих системах контролюваного вивільнення лікарських засобів, заживлюючих покриттів ран і опіків, штучних протезів хрящової тканини та ін. Для них характерні зворотні деформації без руйнування каркасу. Кріогелі можуть утримувати воду в межах тривимірної сітки полімерних ланцюгів, що обумовлює ряд властивостей: проникність, набухання тощо. Обрані об'єкти дослідження є біосумісними, здатними до біодеградації, а желатин може посилювати клітинну адгезію.

Метою дослідження було отримання пористих зразків кріогелів на основі ПВС та желатину і дослідження їх властивостей. Синтезовано кріогелі із водних 5 % розчинів полівінілового спирту та желатину з відсотковим співвідношенням ПВС/желатин: 1:9; 3:7; 5:5; 7:3; 9:1. Як зшиваючий агент використовували 25 % розчин глутарового альдегіду (ГА) у відповідному мольному співвідношенні до функціональних груп полімерів. Зразки заморожували при температурі -12 °С протягом 48 годин. Синтез при підвищеному (до 1050 атм) тиску проводили в спеціальних товстостінних кріобомбах за ідентичною методикою. Далі зразки кріогелів розморозували і висушували ламінарним потоком сухого повітря протягом 96 годин.

Визначено ступені набухання кріогелів, синтезованих при атмосферному та високому тиску у воді. Встановлено, що найвищі ступені набухання (понад 2–3 рази) мають зразки, в яких переважає вміст желатину. У зразках, в яких переважав вміст ПВС, утворення пористої 3D структури не спостерігалось. При частковому випаровуванні розчинника (близько 80–90 мас. %) кріогелі були досить еластичними та при стисненні їх каркас не руйнувався. Методом оптичної мікроскопії встановлено, що зразки є макропористими (рис. 1). У кріогелях, синтезованих за атмосферного тиску, розміри пор лежали переважно в діапазоні 200–250 мкм, у кріогелях високого тиску – 50–100 мкм. Методом ІЧ спектроскопії підтверджено припущення про хімічну зшивку полімерних ланцюгів ГА.

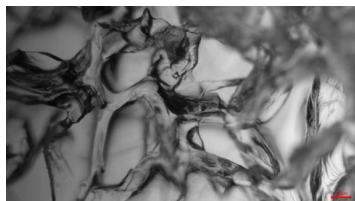


Рис. 1. Макропориста структура кріогелю складу ПВС/желатин

В результаті проведеної роботи синтезовано зшиті ГА кріогелі складу ПВС/желатин. Досліджено вплив співвідношення компонентів та тиску на структуротворення кріогелів. Проаналізувавши одержані результати зроблено висновок про перспективність застосування одержаних кріогелів у біомедичних цілях.

**CRYSTALLIZATION BEHAVIOR OF IRRADIATED POLY-L-LACTIDE
AND ITS COMPOSITES WITH BIOCIDES***Fedorenko A. A.*^{1,2}, Krul L. P.^{1,2}, Butovskaya G. V.¹¹RI for physical chemical problems of the BSU, Minsk, Belarus²Belarusian State University, Minsk, Belarus

sashfedorenko@gmail.com

One of the recent trends in the food packaging industry is the use of active packaging based on biodegradable polymers such as polylactide. This packaging contains a biocide incorporated into a polymer matrix and prevents pathogenic microorganisms growing on a food surface. The combined use of active packaging and radiation treatment is an effective method of food safety ensuring. Crystallization ability of the composite materials prepared for these purposes is among decisive factors influencing their properties.

The aim of this study is an effect elucidation of gamma irradiation on crystallization of poly-L-lactide (PLLA) and its composites with biocide.

Films based on PLLA preparing by reactive extrusion of PLLA 4043D (Nature Works LLC, USA) powder and containing 2 wt. % of oligo hexa-methylene guanidine hydrochloride (OHMG) as a biocide additive have been investigated. Films were gamma irradiated by 50 kGy dose in an air at a room temperature. Differential scanning calorimetry (DSC) permits us to obtain thermal characteristics of relaxation and phase transitions in the samples studied. Complex profiles of the overlapping peaks in DSC curves we analyzed by curve fitting procedure.

For both films with and without biocide T_g was about 60 °C. After irradiation, this value decreased by 1 °C, most likely due to the PLLA destruction during irradiation and reduction of its molecular weight. The degree of crystallinity (χ) of the initial polymer powder was about 20 %, with one melting peak detected, while the films were completely amorphous. After being exposed to irradiation the film χ value increased to 2–4 % apparently due to short chains formation with a mobility sufficient to form crystallites even at a room temperature.

Using curve fitting (fig. 1) we could accurately reveal two crystallite types with rather close melting temperatures (T_m) in DSC curves. Before irradiation, regardless of the OHMG presence, the melting peak was resolved into two components with maxima at 149 and 154 °C, the ratio of their areas being 1.0:0.6. The observation of two melting peaks indicates the presence of two forms of crystallites (more and less ordered one) with higher and lower T_m , respectively. Upon the film irradiation, the T_m of the less ordered fraction decreased to 146 °C indicating an accumulation of defects, presumably due to oxidative destruction and isomerization of the PLLA. At the same time, the ratio of fractions alters. In the case of PLLA film without additives it changes to the value of 1.0:1.9, while in the case of the film containing OHMG to that of 1.0:2.6. Possible reasons are discussed concerning the increase in the share of the more ordered crystallite form.

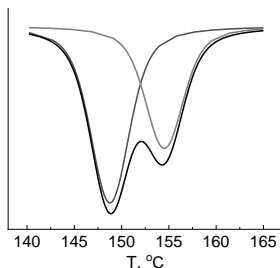


Fig. 1. Fitted melting peak of PLLA + 2 wt. % OHMG film (temperature rise rate is 5 °C per minute)

**ДОСЛІДЖЕННЯ ПОЛІМЕРНИХ МАТЕРІАЛІВ
НА ОСНОВІ ПОЛІСАХАРИДІВ ТА ІХТЮКОЛАГЕНУ**Варлан К. Є., *Шевцова К. Р.*, Луцкевич А. О.Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, Дніпро, Україна
konstvarlan@meta.ua

Світове виробництво полімерів та полімерних матеріалів зростає щорічно приблизно на 5 %. Разом з цим зростають обсяги полімерних виробів із вичерпаним терміном використання, що потребують утилізації. Через повільніший, порівняно з виробництвом, розвиток та впровадження технологій утилізації і вторинної переробки полімерних відходів значна їх кількість накопичується у навколишньому середовищі. Переважно це матеріали нетривалого вжитку: пакування, одноразова тара тощо. З огляду на повільне розкладання синтетичних полімерних матеріалів у природних умовах, їх накопичення становить глобальну екологічну проблему. Інша не менш серйозна проблема полягає в тому, що розвідані запаси невідновлюваної вуглеводневої викопної сировини, за останніми експертними оцінками, виснажені приблизно на 80 %. Таке становище сприймається як передвісник енергетичної та сировинної кризи, що неминуче відіб'ється на виробництві полімерних матеріалів, переважний обсяг яких складають продукти синтетичного походження.

Дієві шляхи вирішення означених проблем пропонує так звана стратегія стійкого розвитку, основні принципи якої поєднані поняттям «зелена» хімія». Зокрема, ці принципи передбачають використання поновлюваної сировини та застосування хімічних продуктів, що здатні після закінчення терміну використання швидко розкладатися у навколишньому середовищі до безпечних речовин. З огляду на вищенаведене, незаперечно є доцільність проведення досліджень, спрямованих на створення полімерних матеріалів з малим терміном вжитку (пакувань, одноразового посуду тощо) на основі відновлюваної сировини, що мають здатність до біорозкладання у природних умовах.

Раніше повідомлялося про можливість використання колагенвмісних рибних відходів, зокрема луски, як сировини для виготовлення контейнерів та пакувальних матеріалів харчових продуктів. Подальші дослідження були спрямовані на визначення умов створення плівочних матеріалів шляхом комбінації іхтюколагену з полісахаридами рослинного (агар-агар) і тваринного (хітозан) походження, та введення у рецептуру пластифікуючих і структуруючих інгредієнтів.

Дослідження передбачали розробку методик отримання колагену з луски карпа звичайного (*Cyprinus*) та хітозану з панцирів креветок. За результатами експериментів виявлено залежність властивостей отримуваних матеріалів від особливостей попередньої хімічної обробки луски та виділення з неї колагену. Визначено, що застосування хітозану, виготовленого за власною методикою, дає результати як і у разі використання товарного хітозану. Отримані напівпрозорі забарвлені зразки плівочних матеріалів, які, залежно від співвідношення в вихідних складах колагену і полісахаридів та вмісту інших компонентів, були жорсткими або гнучкими та еластичними, мали різну здатність до набрякання у воді.

Показана можливість створення полімерних матеріалів з прийнятними властивостями шляхом комбінування колагену або хітозану із стиромалем – синтетичним співполімером стиролу та малеїнового ангідриду.

РОЗРОБКА АЛКІДНО-УРЕТАНОВОЇ КОМПОЗИЦІЇ З ПІДВИЩЕНОЮ ЗНОСОСТІЙКІСТЮ*Шищенко О. С.*, Голуб Л. С.

Державний вищий навчальний заклад «Український державний хіміко-технологічний університет», Дніпро, Україна
man-shan@ukr.net

Лакофарбові матеріали широко застосовуються для покриттів. Вони захищають метали від корозії, дерево від гниття. Ефективність лакофарбових покриттів в значній мірі визначається якістю сировини і компонентів, які входять до складу лакофарбових композицій.

Залучення для виробництва лакофарбових матеріалів нових полімерів, а також модернізація виробництва сприяє створенню лакофарбових матеріалів поліпшеної якості зі специфічними властивостями. Лакофарбовий сектор хімічної промисловості розвивається досить стабільно: постійно оновлюється асортимент лакофарбових матеріалів, а сфери їх застосування розширюються. Сучасна лакофарбова промисловість використовує широкий асортимент мінеральних наповнювачів, які дозволяють досягти бажаних властивостей лакофарбових покриттів і контролювати рівень собівартості продукції.

Швидкий розвиток лакофарбової промисловості передбачає все більш широке використання нових видів сировини і зокрема багато нових синтетичних плівкоутворюючих речовин.

Підвищення якості лакофарбових покриттів може бути досягнуто різними шляхами:

- синтез і застосуванням нових плівкоутворюючих речовин й інших компонентів лакофарбових матеріалів з поліпшеними властивостями;
- підвищенням якості застосуванням плівкоутворюючих речовин та інших компонентів лакофарбових складів шляхом їхньої модифікації;
- розробкою прогресивних принципів одержання лакофарбових матеріалів та покриттів.

Алкідно-уретанові емалі являють собою суспензію пігментів у алкідно-уретановому лаку з додаванням сикативу та розчинника. Алкідно-уретанову емаль для підлоги використовують при покритті дерев'яних поверхонь, а також ДСП і ДВП. Дана фарба захищає підлогу від механічних пошкоджень і не стирається при впливі миючих засобів, емаль відноситься до швидковисихаючих.

Запропоновано в якості полімерної основи для емалі використовувати лак BALKYD 590 SU – 60 WS, який являє собою суміш алкідних смол і уретанових компонентів, розбавлену органічним розчинником. В якості розчинника запропоновано використовувати розчинник EXXSOL D60, який представляє собою багатокомпонентну систему низькокиплячих вуглеводнів, які отримують в низькокиплячих фракціях при переробці нафти, а також із кам'яновугільної смоли. В якості сикативу запропоновано використовувати сикатив октоатний «Octa Soligen 69», який має у своєму складі суміш металів на основі марганцю та барію.

Таким чином, розроблена алкідно-уретанова лакофарбова композиція з підвищеною зностостійкістю для дерев'яних і металевих покриттів. Завдяки використанню дезодорованого розчинника лакофарбове покриття на основі розробленого складу не має негативного впливу на здоров'я людини та негативного впливу на оточуюче середовище, має підвищену зностостійкість при використанні на дерев'яних і металевих поверхнях.

ПОЛУЧЕНИЕ ПОЛИАКРИЛАМИДА И ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТНЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ЕГО ОСНОВЕ МЕТОДОМ ФРОНТАЛЬНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ В НЕПРЕРЫВНОМ РЕЖИМЕ*Шуляковская М. Б., Гринюк Е. В.*Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь
marieshulyakouskaja@gmail.com

Полимеры на основе акриламида широко используются в очистке сточных вод, сельском хозяйстве, в медицине и фармацевтической промышленности [1]. Основным способом получения полимеров на основе акриламида (АА) является радикальная полимеризация в растворе. Менее распространенный способ получения таких полимеров, в частности, полиакриламида, – фронтальная полимеризация (ФП). ФП является простым и удобным технологическим методом полимеризации [2]. Одно из главных преимуществ ФП – низкие энергозатраты, поскольку реакции ФП экзотермические самоподдерживающиеся. Также возможно проведение синтеза без использования растворителей. Значимым преимуществом ФП является возможность осуществления процесса в высокопроизводительных трубчатых непрерывнодействующих реакторах [3].

В настоящей работе изучался процесс ФП АА в растворе с использованием стеклянного трубчатого реактора с внутренним диаметром 5 мм. В качестве растворителя использовали диметилсульфоксид (ДМСО). Мольное соотношение АА:ДМСО составляло 1:1, в качестве инициатора использовали пересульфат аммония в концентрации 0,5 мол. %. Приготовленную реакционную смесь помещали в реактор, закрытый с одного конца подвижным штоком с диаметром, равным внутреннему диаметру реактора. Полимеризацию инициировали точечным кратковременным нагревом реакционной смеси у открытого конца реактора. После возникновения равномерно движущегося полимеризационного фронта нагрев прекращали и к подвижному штоку прилагали усилие, достаточное для обеспечения движения реакционной смеси и образовавшегося продукта со скоростью, равной скорости фронта. При этом скорость фронта составила 6,4 см/мин, а его температура – 160,0 °С. В результате реакции ФП получен не сшитый водорастворимый полиакриламид, методом капиллярной вискозиметрии измерена его молекулярная масса, которая составила $1,1 \cdot 10^5$. С целью изучения возможности получения гидрогелей на основе полиакриламида в непрерывнодействующих трубчатых реакторах аналогичным образом были проведены эксперименты по полимеризации АА в присутствии сшивающего агента N,N'-метилена-*бис*-акриламида в количестве 0,05 мол. %. Показано, что даже при образовании за счет сшивания полиэлектролитного гидрогеля возможно равномерное движение реакционной смеси и образовавшегося гидрогеля, обеспечивающее непрерывность процесса.

1. Frontal polymerization as a new method for developing drug controlled release systems (DCRS) based on polyacrylamide / Elisabetta Gavini [et al.] // *European Polymer Journal*. – 2009. – № 45. – P. 690 – 699.

2. Тоноян, А.О. и др. / Фронтальная сополимеризация акриламида с метилметакрилатом и стиролом в присутствии наночастиц SiO₂, TiO₂. Теплофизические свойства полученных нанокompозитов // *Изв. НАН РА и ГИУА*. – 2013. Т. LXVI, №1.

3. Frontal polymerization in continuous-flow reactors / S.P. Davtyan, A.O. Tonoyan // *Review Journal of Chemistry*. – 2019. – Vol. 9, № 4. – P. 175 – 196.

**AUTHOR INDEX /
АВТОРСЬКИЙ ПОКАЖЧИК**

Abdullaev E. N.	92	Konysheva K. M.	104
Aksiutina K. I.	127	Kordan V. M.	56, 68, 72
Antrapitseva N. M.	55	Korechko S. A.	55
Aristova D.	44	Korinenko B.	69
Arzumanova N. B.	168	Korzhak A.	121
Asaula V. M.	113	Kosach V.	44
Bodachivska L. Yu.	169	Kovalska V.	44
Bondarchuk S. V.	36	Kovalska V. B.	48
Brzózka A.	105	Kovalskyy Ya. P.	101, 120
Burakov N. I.	37, 39	Kravchuk O.	29
Butovskaya G. V.	194	Krul L. P.	194
Camyshan S. V.	121	Kurmach M. M.	104, 105
Chernii S.	44	Kushch O. V.	34
Chernii S. V.	48, 67	Litvin V. A.	180
Chernii V. Y.	67	Losytskyi M. Yu.	48
Chorna N. O.	72	Lozovytska O. I.	104
Dubenko A. V.	127	Lytkin D.	30
Dubenska L.	15, 174	Lytvynenko A. S.	88, 105
Dubenska L. O.	14	Mackiv T.	29, 30, 33
Dushna O. M.	14	Mamedova G. A.	59
Dutka V. S.	101, 120	Manuilov E. V.	107
Fedorchuk A. A.	70	Mariichak O. Yu.	60
Fedorenko A. A.	194	Martinyuk V.	30, 33
Formanchuk R.	30	Martyniuk V.	29
Gavrilenko K. S.	92, 113, 117	Metelytsia L.	26
Gavrylko T. A.	107	Mickevičius S.	130
Gnatyshyna L.	29, 30, 33	Mikheenko V. M.	39
Gorbenko G. P.	46	Mishura A. M.	92, 105
Gordienko O.	69	Mokhir A.	44
Gryniukova A.	26	Mokhir A. A.	48
Hedjazi M.	21	Mys'kiv M. M.	70
Hordieieva I. O.	34	Nikolenko M. V.	127
Ivakh S.	15	Nikonchuk A.	29
Kachmaryk V. V.	101	Njoh R. A.	180
Kakhramanov N. T.	168	Nytka V. V.	56
Kapitanov I. V.	37, 39	Omelian I. V.	113
Karakurkchi G. V.	152	Ozivska I. O.	180
Khalyavka T.	121	Pariiska O. O.	113
Khalyavka T. A.	107	Pavlyuk V. V.	56, 68, 72
Khamar O. O.	120	Permyakov V.	121
Khoma V.	29, 30, 33	Pirko Y. V.	46
Khutko M.	69	Plotytsya S.	15
Khyzhun O.	121	Povalchuk S. V.	104
Kolosov M. O.	92	Radio S. V.	60
Kolotilov S. V.	88, 92, 113, 117	Reshetnyak O. V.	171
		Rogalskiy S.	26

Rozantsev G. M.	60	Zacik U.	33
Ryabukhin S. V.	88, 113	Zaraska L.	105
Rydochuk M.	15	Zelinska O. Ya.	72
Sakhnenko M. D.	152	Zelinskiy A. V.	171
Selin R. O.	67	Zelinskyu A. V.	72
Serdyuk A. A.	37, 39	Zhytniakivska O. A.	46
Shapovalova M.	121	Zosenko O. O.	34
Shcherban N.	121	Авдієнко Т. М.	143, 147
Shcherban N. D.	107	Авина С. И.	126
Shebeko S.	30	Авраменко В. Л.	192
Shendrik A. N.	34	Аксiментьева О.	184
Shevchenko J. R.	34	Аніщенко В. М.	74, 98
Shumeiko A. E.	37, 39	Аніщенко Г. В.	74
Shvets E. H.	92	Антрашцева Н. М.	16, 62, 71, 159
Shvets O. V.	104	Афанасенко Е. В.	50
Shymanovska V. V.	107	Байрамов Е.	154
Sidorenko M.	130	Бакаєва О. Д.	45
Slominskii Yu.	44	Бакалiнська О. М.	95
Slominskii Yu. L.	48	Балог І. М.	82
Slyvka Yu. I.	70	Бараняк О. Г.	158
Sotnik S. O.	88, 117	Бахалова Є. А.	76, 84
Stetskiv I. A.	68	Бегаль М. М.	16
Stoliar O.	29, 30, 33	Бельская Т. Г.	24
Subota A. I.	88	Белякова Л. О.	96, 119
Sydoruk T.	69	Биков О. І.	116
Syniugin A. R.	48	Бичко І. Б.	109, 112
Syniugina A. T.	48	Бiла Г. М.	159
Tamen A.-E.	19	Бiлогубка В. М.	12, 20
Tarabara U. K.	46	Бован Л. А.	128
Tarasiuk I. I.	56, 68	Бойко А. О.	25
Titov T.	69	Бондарєва А. І.	129
Trusova V. M.	46	Борiсенко Л. М.	179
Tur Yu. I.	152	Брагина Л. Л.	131
Turchenko V. A.	46	Бричка А. В.	95
Vasylenko V.	130	Бутенко С.	75
Ved` M. V.	152	Бутенко С. В.	115
Verba A. Yu.	169	Бухонська Я. К.	28
Vereshchagin O. M.	171	Бушуєв А. С.	150
Vetsner Yu. I.	132	Вакулюк П. В.	47, 191
Vishnikin A. B.	19, 21	Варгалюк В. Ф.	41
Vlad Kh. I.	171	Варениченко С. А.	79, 85
Volochnyuk D. M.	88, 113	Варжель Н. Р.	51
Voloshin Y. Z.	67	Варлан К. С.	195
Vus K. O.	46	Василенко К. В.	133, 148
Yarmoluk S.	44	Васильєв Р. В.	182
Yarmoluk S. M.	48	Ветвицкая С. А.	131
Yatsyshyn M. M.	171	Вiслогузова Т. В.	170
Yermolenko I. Yu.	152	Волкова Л. К.	38, 93
Yunko K.	33	Воронов Г. К.	146

Author Index

Гаврилук Ю. В.	182
Гавронська М. О.	12, 20
Гайдай А. Р.	47
Гайдай С. В.	114
Галатенко Н. А.	183
Гамова О. О.	142
Гембарук В. В.	76
Гес Н. Л.	94
Гладирь І. І.	183
Гладков С. С.	77, 86
Голеус В. І.	149
Голово-Камошенкова О. М.	80
Голуб Л. С.	173, 196
Гордєєва І. О.	25, 31, 110, 161
Гордієнко О. А.	57
Горенко Ю. В.	155
Горяїнова Ю. А.	162
Грайворонская И. В.	155
Гринь Г. И.	126
Гринько А. М.	95
Гринюк Е. В.	197
Гросу О. К.	133
Гусаревич Л. В.	134
Давітадзе Д. З.	135
Даценко В. В.	63
Дев'ятова Н. Б.	136
Дем'яненко С. М.	47
Демидов О. О.	77
Демчина О. І.	172, 175
Дерев'янчук М. В.	28
Деріус Д. В.	186
Деркаченко Д. О.	137
Дзязько М. О.	96
Дикун О. М.	97, 98
Димура В. В.	173
Діденко Н. О.	57
Діль К. В.	78
Діхтярук Є. В.	193
Діюк Н. В.	52
Діюк О. А.	52
Дмухайло А. В.	13
Должиков С. С.	147
Драпак О. С.	138
Дремлюга А. В.	53
Дубенська Л. О.	13
Дуванова Е. С.	53, 65
Дуднік О. В.	108, 116, 123
Дяченко А. Г.	114
Євдокименко Н. М.	182
Євчук І. Ю.	172, 175
Єгорова Л. М.	99

Авторський покажчик

Єрмоїна К. А.	177
Єсіпенко О. А.	89
Єфімова І. В.	97
Жигайло М. М.	175
Жильцова С. В.	100, 176
Зажигалов В. О.	52
Зайцева І. М.	114
Залогіна С. М.	99
Игнатенко М. И.	156
Іванов О. В.	54
Іващук О. О.	100
Ільницька Г. Д.	114
Ільчук О. Р.	64
Іщенко О. В.	181
Калініченко С. В.	177
Кальченко В. І.	89
Карандашов О. Г.	192
Картель М. Т.	95
Кіосе О. О.	178
Кінаш М. С.	133
Клюгвант А. А.	62
Ковалюк З. Д.	118
Ковтун А. В.	79
Ковшун Л. О.	165
Козакевич Р. Б.	47, 191
Козачук Т. В.	71
Козлова Г. А.	183
Коломієць О. В.	58, 139, 189
Комендра В. С.	102
Компанець М. О.	110
Коновалова Н. Д.	103
Кордиш О. М.	53
Коречко С. А.	16
Коріненко Б. В.	57
Корман Т. С.	102
Корнілович Б. Ю.	129
Корогодська А. М.	136, 142
Король Н. І.	80
Короляничук Д. Г.	58, 139
Косевич Е. В.	140
Кравець В. С.	28
Кравченко Н. В.	103
Кравчук А. В.	81
Кроніковський О.	18
Кулинич А. І.	12, 20
Купряшов А. В.	141
Кусяк А. П.	64
Кусяк Н. В.	64

Кут Д. Ж.	82
Кут М. М.	82
Кучма А. Ю.	162
Куц О. В.	25, 31, 110
Лабяк О. В.	134, 138
Лакиза С. М.	106
Лебедев В. В.	179
Левадна С. В.	142
Лендел В. Г.	82
Леонова Н. Г.	176
Лесишина Ю. О.	102
Лендич С. С.	179
Лисенков Е. А.	176
Литвин Р.	75
Лобанов В. В.	47
Лобунець Т. Ф.	122
Луцкевич А. О.	195
Ляшок І. О.	181
Ляшок М. О.	181
Мажуга О. В.	185
Мазченко М. В.	179
Майорова О. Р.	160
Максимович І.	75
Макудера А. О.	106
Малецька Ю. В.	17
Малихіна А. В.	187
Манвелян А. А.	77
Марек І. О.	108
Марійчак О. Ю.	100
Марков В. І.	79, 85
Марценюк Н. С.	83
Марчишин М. М.	22
Марчук Л. С.	84
Марчук О. В.	61
Матковський О. К.	45, 193
Мелах І.	116
Мельниченко В. І.	31, 42, 161
Мельничук В. М.	109
Мельнікова А. М.	100, 110
Милін А. М.	94
Миргородська В. Д.	143
Мисюк О.	18
Мірошніченко Д. В.	179
Міщенко А. О.	84
Міщук А. О.	161
Мороз В. О.	162
Мороз О. В.	150
Мосіна Т. В.	116
Мошаренкова О. В.	111
Мощенко А. С.	40
Мощенко І. М.	144

Мурланова Т. В.	47, 193
Нагорна Т. І.	149
Науменко С. Ю.	145
Неділько С. А.	54
Нестерова К. А.	165
Нетреба О. О.	145
Ніколенко М. В.	133, 143, 148
Новосолова Л. О.	146
Новохатько А. О.	93, 172
Носач В. В.	112
Обломей С. О.	62
Обушак М.	75
Овчаренко В. І.	58, 139
Овчаров В. І.	190
Оковитий С. І.	78
Олексюк А. Г.	63
Олишевець І. П.	51
Онисько М. Ю.	82
Опейда Й. О.	93, 100
Опейда Л. І.	38, 172
Орлецький І. Г.	118
Осокін Є. С.	41
Павленко А. А.	182
Паєнтко В. В.	45, 193
Паллаг О. В.	80
Панченко В. А.	165
Паньковська А. Г.	31
Папейкін О. О.	135
Пастернак О. М.	38
Перехристюк М. М.	64
Петросова Г. Р.	114
Печаліна Є. І.	65
Підгорна Л. П.	192
Піддубна К. Ю.	150
Піткович Х.	75
Поджарський М. А.	137, 151
Подорожко В. Г.	147
Покрова Я. О.	146
Поліщук Л. М.	191
Полонський В. А.	41
Пономарьов В. К.	115
Походило Н.	75
Примушко С. О.	183
Пришляк Х.	184
Пунько І. С.	148
Рагуля А. В.	122
Радіо С. В.	53, 65, 100
Рассоха О. М.	185, 186, 187
Редькіна А. В.	103

- Редько А. М.74, 98
 Редько В. П.106, 108
 Рибаченко В. І.74, 98
 Ридчук П. В.20, 22
 Роговик М.75
 Родигін К. М.163
 Родигін М. Ю.163
 Рожнова Р. А.170, 183
 Розанцев Г. М.53, 65
 Роїк Н. В.96
 Рубан О. К.108, 116, 123
- Саберова В. О.66
 Саввова О. В.146, 154
 Савин С. Н.178
 Савченко Д. О.179
 Саїк Н. А.22
 Салей Ан. А.145, 149
 Сачук О. В.52
 Свєрдлікoвська О. С.188
 Сергієнко Я. О.189
 Симонова Н. А.32
 Синявський С. В.151
 Сінолуп О. О.25
 Скрипкіна М. Д.190
 Сливка М. В.80
 Сметанін М. В.85
 Смирнова О. В.97
 Смирнова-Замкова М. Ю.116
 Смітюх О. В.61
 Сніжко А. Д.86
 Соколова Л. О.190
 Соколовський Д. А.87
 Солудчик О.75
 Стаднічук Н.18
 Старкова Г. М.25
 Степаненко Г. Д.149
 Стоянова В. С.86
 Стрельцова Є. В.150
 Сухий К. М.189
- Тараненко І. В.151
 Тітов Т. С.57
 Ткачук І. Г.118
 Тобілко В. Ю.129
 Токарева С. В.85
 Томина А.-М. В.177
 Трибрат О. О.89
 Трофимчук І. М.119
 Тумко А. В.191
 Туриця О. О.164
- Тьортих В. А.47, 191
 Уколова М. В.12, 20
- Фарат О. К.79, 85
 Фарманд К. Ф.193
 Фатєєв А. І.153
 Федішин О. С.12
 Фесенко О. І.154
 Фесич І. В.54
 Філіпова П. О.71
 Фуртат І. М.47, 191
- Хацинська А. В.192
 Хижан О. І.165
 Хижан О. І.165
 Хоботова Э. Б.155, 166
 Хутько М. В.57
- Циба М. М.128
 Цыба Н. Н.103
- Чепелева Л. В.86
 Черваков О. В.188
 Червонченко І. Д.90
 Черкашина Г. М.185, 186, 187
 Чигиринець О. Е.40, 144
 Чудінович О. В.122
- Шабанова Г. М.136, 142
 Шапкін В. П.150
 Шаповалов С. А.111, 115
 Швед О. М.76, 81, 83, 84, 87, 90
 Шевцова К. Р.195
 Шевчук Л. М.22
 Шендрік О. М.25, 31, 42, 110
 Шендрік Т. Г.128, 153
 Шепарович Р. Б.172
 Шибєка Л. А.24, 140
 Широков О. В.122
 Шищенко О. С.196
 Шкумбатюк Х. М.22
 Шмибельський В. Б.123
 Шмирко О. В.42
 Шуляковская М. Б.197
 Шунков В. С.45
- Ютілова К. С.81, 83, 87, 90
- Янова К. В.76
 Яровой Я. К.156

**CONTENTS /
3MICT**

ANALYTICAL CHEMISTRY / АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ	11
1-[5-(3-НІТРОБЕНЗИЛ)-1,3-ТІАЗОЛ-2-ІЛ]ІЗОНАФТАЛЕН]-2-ОЛ – НОВИЙ ФОТОМЕТРИЧНИЙ РЕАГЕНТ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ Pd(II) <i>Гавронська М. О., Уколова М. В., Білогубка В. М., Кулинич А. І., Федішин О. С.</i>	12
ДОСЛІДЖЕННЯ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧНОЇ ПОВЕДІНКИ АЗОРУБІНУ НА ТВЕРДОМУ АМАЛЬГАМНОМУ ЕЛЕКТРОДІ, МОДИФІКОВАНОМУ РТУТНИМ МЕНІСКОМ <i>Дмухайло А. В., Дубенська Л. О.</i>	13
POLAROGRAPHIC DETERMINATION OF NICOTINE, IN THE FORM OF N-OXIDE, IN SPRAY «NICORETTE» <i>Dushna O. M., Dubenska L. O.</i>	14
VOLTAMMETRIC DETERMINATION OF COCCIDIOSTAT ROBENIDINE IN ANIMAL FEED <i>Ivakh S., Dubenska L., Rydchuk M., Plotycya S.</i>	15
ПРО ВИЗНАЧЕННЯ ВІМІСТУ МАГНІЮ І ЦИНКУ В СКЛАДІ ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ ГІДРАТОВАНИХ ДИФОСФАТІВ <i>Коречко С. А., Антрапцева Н. М., Бегаль М. М.</i>	16
КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ ГОЛЬМІУ У NiIn <i>Малецька Ю. В.</i>	17
КОМПЛЕКСООУТВОРЕННЯ ТА ЕКСТРАКЦІЯ ЛАНТАНОЇДІВ З КРАУН-ЕТЕРАМИ <i>Кроніковський О., Мисюк О., Стаднічук Н.</i>	18
IN-VESSEL HEADSPACE LIQUID PHASE MICROEXTRACTION COUPLED TO SPECTROPHOTOMETRY FOR IODATE DETERMINATION <i>Tamen A.-E., Vishnikin A. B.</i>	19
ФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ НІКЕЛЮ(II) З ВИКОРИСТАННЯМ 5-(2-ГІДРОКСИ-НАФТАЛЕН-1-ІЛАЗО)-2-МЕТИЛ-3Н-ПІРАЗОЛ-4-ЕТИЛКАРБОКСИЛАТУ <i>Уколова М. В., Гавронська М. О., Білогубка В. М., Кулинич А. І., Ридчук П. В.</i>	20
HIGHLY SENSITIVE SIMULTANEOUS SPECTROPHOTOMETRIC DETERMINATION OF PHOSPHATE AND SILICATE BASED ON FORMATION OF ION ASSOCIATION COMPLEXES BETWEEN ASTRA PHLOXINE AND 12-HETEROPOLYMOLYBDATE ANIONS <i>Hejazi M., Vishnikin A. B.</i>	21
ВИКОРИСТАННЯ 1-(1-МЕТИЛ-1Н-ПІРАЗОЛ-3-ІЛ-АЗО)-НАФТАЛЕН-2-ОЛУ ДЛЯ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ МІКРОКІЛЬКОСТЕЙ Cu(II) <i>Шевчук Л. М., Марчишин М. М., Шкумбатюк Х. М., Саїк Н. А., Ридчук П. В.</i>	22
БИОСHEMISTRY / БІОХІМІЯ	23
БИОТЕСТИРОВАНИЕ ДРЕВЕСНОЙ ЗОЛЫ, КАК ОТХОДА ПРОИЗВОДСТВА И ПОТРЕБЛЕНИЯ <i>Бельская Т. Г., Шибека Л. А.</i>	24
ПОРІВНЯННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ КАТАЛІТИЧНИХ СИСТЕМ ДЛЯ ОКСИДАТИВНОЇ ДЕГРАДАЦІЇ ТЕТРАЦИКЛІНІВ <i>Бойко А. О., Старкова Г. М., Гордєєва І. О., Сінолуп О. О., Куц О. В., Шендрік О. М.</i>	25
ASSESSMENT OF THE SELECTIVE CYTOTOXIC EFFECT OF LONG-CHAIN IONIC LIQUIDS ON HUMAN TUMOR CELL LINES <i>Грунішківа А., Rogalskiy S., Metelytsia L.</i>	26
ВПЛИВ ТЕТРАМЕТИЛПІПЕРІДИНІВ НА АКТИВНІСТЬ ТРАНСПОРТУ ЕЛЕКТРОНІВ У ДИХАЛЬНОМУ ЛАНЦЮЗІ РОСЛИНИ ARABIDOPSIS THALIANA L. У ВІДПОВІДЬ НА ДІЮ ПЕПТИДУ FLG22 ТА БАКТЕРІЙ PSEUDOMONAS SYRINGAE <i>Дерев'яничук М. В., Бухонська Я. К., Кравець В. С.</i>	28
THE EVALUATION OF THE EFFECT OF MICROPLASTIC ON BIVALVE MOLLUSK IN THE SINGLE AND COMBINE WITH IBUPROFEN EXPOSURES <i>Martyniuk V., Khoma V., Mackiv T., Nikonchuk A., Kravchuk O., Gnatyshyna L., Stoliar O.</i>	29
THE DISCOVERY OF METALLOTHIONEINS RESPONSE IN THE SYNOVIAL TISSUES OF RATS UNDER THE ACUTE GONARTHROSIS <i>Mackiv T., Lytkin D., Shebeko S., Khoma V., Martynuk V., Formanchuk R., Gnatyshyna L., Stoliar O.</i>	30
ВПЛИВ ОРГАНІЧНИХ РОЗЧИННИКІВ НА АКТИВНІСТЬ ЛАККАЗИ TRAMETES VERSICOLOR <i>Паньковська А. Г., Гордєєва І. О., Мельниченко В. І., Куц О. В., Шендрік О. М.</i>	31
ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ ГЕРБИЦИДУ ЗЕНКОР НА ПРОЦЕСИ ПЕРЕКИСНОГО ОКИСНЕННЯ ЛІПІДІВ <i>Симонова Н. А.</i>	32
THE EFFECT OF COMMON SURFACE WATERS CONTAMINANTS, PESTICIDE ROUNDUP AND DRUG CHLORPROMAZINE, IN THE ENVIRONMENTALLY RELEVANT EXPOSURES ON THE BIVALVE MOLLUSK UNIO TUMIDUS <i>Khoma V., Martynuk V., Mackiv T., Yunko K., Zacik U., Gnatyshyna L., Stoliar O.</i>	33

PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF THE <i>TRAMETES VERSICOLOR</i> LACCASE-DIACETYL OXIME SYSTEM IN THE PROCESSES OF DYE DECOLORIZATION <i>Shevchenko J. R., Zosenko O. O., Kushch O. V., Hordieieva I. O., Shendrik A. N.</i>	34
QUANTUM CHEMISTRY / КВАНТОВА ХІМІЯ	35
THEORETICAL EVALUATION OF THE CHANGE IN DETONATION CHARACTERISTICS OF ENERGETIC AMINES UPON CONVERSION INTO TRIAZENES AND PENTAZOLES <i>Bondarchuk S. V.</i>	36
INFLUENCE OF HEAD GROUP NATURE IN OXIME-FUNCTIONALIZED SURFACTANTS ON OXANOL/WATER PARTITION COEFFICIENT <i>Burakov N. I., Serdyuk A. A., Shumeiko A. E., Kapitanov I. V.</i>	37
ОЦІНКИ МАРШРУТІВ РЕАКЦІЙ <i>n</i> -ГЕКСАНУ В СИСТЕМІ Mn(III)/Mn(II) – H ₂ SO ₄ <i>Волкова Л. К., Опейда Л. І., Пастернак О. М.</i>	38
PREDICTION OF ENVIRONMENTAL TOXICITY FOR SERIES OF AMPHIPHILIC OXIMES USING GUSAR SOFTWARE <i>Mikheenko V. M., Burakov N. I., Serdyuk A. A., Shumeiko A. E., Kapitanov I. V.</i>	39
МОДЕЛЮВАННЯ МОЛЕКУЛЯРНОЇ СТРУКТУРИ І РОЗРАХУНОК ФІЗИКО-ХІМІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОНЕНТІВ РОСЛИННОЇ СИРОВИНИ МЕТОДОМ КХР <i>Мошченко А. С., Чигиринець О. Е.</i>	40
МОДЕЛЮВАННЯ РЕАКЦІЇ ДИСПРОПОРЦІОНУВАННЯ ІОНІВ КУПРУМУ В ПРИСУТНОСТІ МАЛЕЇНОВОЇ КИСЛОТИ У ВОДНОМУ РОЗЧИНІ <i>Осокін Є. С., Варгалюк В. Ф., Полонський В. А.</i>	41
ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ DFT ДЛЯ ОПТИМІЗАЦІЇ ГЕОМЕТРІЇ РАДИКАЛУ І МОЛЕКУЛИ <i>N</i> -ГІДРОКСИФТАЛІМІДУ <i>Шмирко О. В., Мельниченко В. І., Шендрик О. М.</i>	42
MEDICINAL AND PHARMACEUTICAL CHEMISTRY / МЕДИЧНА ТА ФАРМАЦЕВТИЧНА ХІМІЯ	43
HIGH-SENSITIVE MONOMETHINE CYANINE DYES AS FLUORESCENCE PROBES FOR NUCLEIC ACID DETECTION AND VISUALIZATION <i>Aristova D., Kosach V., Chernii S., Slominskii Yu., Yarmoluk S., Mokhir A., Kovalska V.</i>	44
ГЛИНИ ЯК АКТИВНА СКЛАДОВА КОСМЕТИЧНИХ ЗАСОБІВ <i>Бакаєва О. Д., Паєнтко В. В., Матковський О. К., Шунков В. С.</i>	45
FLUORESCENCE STUDY OF THE EFFECT OF SILVER NANOPARTICLES ON INSULIN AMYLOID FIBRIL FORMATION <i>Vus K. O., Tarabara U. K., Gorbenco G. P., Zhytniakivska O. A., Trusova V. M., Pirko Y. V., Turachenko V. A.</i>	46
ВЗАЄМОДІЯ ОРНІДАЗОЛУ З НАТИВНИМ ТА ФУНКЦІОНАЛІЗОВНИМИ КРЕМНЕЗЕМАМИ <i>Гайдай А. Р., Дем'яненко Є. М., Фуртат І. М., Вакулук П. В., Козакевич Р. Б., Мурланова Т. В., Лобанов В. В., Тьортих В. А.</i>	47
MEROCYANINES AS FLUORESCENT PROBES FOR THE DETECTION IN MICROSCOPY <i>Chernii S. V., Syniugina A. T., Syniugin A. R., Losytskyy M. Yu., Slominskii Yu. L., Yarmoluk S. M., Mokhir A. A., Kovalska V. B.</i>	48
INORGANIC CHEMISTRY / НЕОРГАНІЧНА ХІМІЯ	49
СИНТЕЗ ТА СТЕРЕОХІМІЧНІ ОСОБЛИВОСТІ ТАРТРАТОСТАННАТІВ 1,10-ФЕНАНТРОЛІНОВИХ КОМПЛЕКСІВ Fe(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II) <i>Афанасенко Е. В.</i>	50
СИНТЕЗ ТА СПЕКТРАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ БІАДЕРНИХ КОМПЛЕКСІВ ЛАНТАНОЇДІВ З БІС-ХЕЛАТУЮЧИМ САФ ЛІГАНДОМ ТА ФЕНАНТРОЛІНОМ <i>Варжель Н. Р., Олишевцев І. П.</i>	51
СИНТЕЗ ФАЗИ α -ZnMoO ₄ : ПОРІВНЯННЯ ТРАДИЦІЙНОГО ТА УЛЬТРАЗВУКОВОГО МЕТОДІВ <i>Діюк Н. В., Сачук О. В., Діюк О. А., Зажигалов В. О.</i>	52
СИНТЕЗ ПАРАВОЛЬФРАМАТУ Б-КАДМІЮ <i>Дремлюга А. В., Дуванова Е. С., Кордиш О. М., Радіо С. В., Розанцев Г. М.</i>	53
ВИВЧЕННЯ ПРОЦЕСІВ ФАЗОУТВОРЕННЯ В ТВЕРДИХ РОЗЧИНАХ НА ОСНОВІ ZnAl ₂ O ₄ ІЗ СТРУКТУРОЮ ШПІНЕЛІ <i>Іванов О. В., Фесич І. В., Неділько С. А.</i>	54
THERMAL BEHAVIOUR OF COBALT(II) DIHYDROGENPHOSPHATE TETRAHYDRATE <i>Korechko S. A., Antraptseva N. M.</i>	55
ELECTROCHEMICAL HYDROGENATION OF THE Tb ₂ Ni ₅ LiMg PHASE <i>Kordan V. M., Nytko V. V., Tarasiuk I. I., Pavlyuk V. V.</i>	56
СИНТЕЗ ЗМІШАНОЛІГАНДНИХ КООРДИНАЦІЙНИХ СПОЛУК КУПРУМУ(II) ІЗ ЗАМЩЕНИМИ ГЕТЕРОЦИКЛІЧНИМИ ТІОАМІДАМИ <i>Гордієнко О. А., Діденко Н. О., Тітов Т. С., Корієнко Б. В., Хуцько М. В.</i>	57
ЕЛЕКТРОЛІТ ДЛЯ ЕЛЕКТРООСАДЖЕННЯ Ni-P ПОКРИТТІВ <i>Короляничук Д. Г., Коломієць О. В., Овчаренко В. І.</i>	58

SYNTHESIS OF THE PRACTICALLY IMPORTANT ZEOLITE – PHILLIPSITE ON A NATURAL BASIS <i>Mamedova G. A.</i>	59
NEW Lu(III)-CONTAINING HETEROPOLY SALT WITH PEACOCK-WEAKLEY TYPE ANION Na ₉ [Lu(W ₅ O ₁₈) ₂]-42H ₂ O: SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE <i>Mariichak O. Yu., Rozantsev G. M., Radio S. V.</i>	60
КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА CeSm _{0,75} Er _{0,25} PbSi ₂ S ₈ <i>Марчук О. В., Смітюх О. В.</i>	61
ОСОБЛИВОСТІ СПІЛЬНОГО ОСАДЖЕННЯ КАТІОНІВ МАГНІЮ І ЦИНКУ ДИФОСФАТ-ЙОНОМ <i>Обломей С. О., Антрапцева Н. М., Клюгвант А. А.</i>	62
КРИТЕРИЙ ОЦЕНКИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ГАЛЬВАНИЧЕСКОГО ШЛАМА В СТРОИТЕЛЬНОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ <i>Даценко В. В., Олексюк А. Г.</i>	63
ХАРАКТЕРИСТИКА КИСЛОТНО-ОСНОВНИХ ЦЕНТРІВ ПОВЕРХНІ НАНОРОЗМІРНОГО МАГНЕТИТУ <i>Перехрестюк М. М., Кусяк Н. В., Кусяк А. П., Ільчук О. Р.</i>	64
ВЗАЄМОДІЯ В РОЗЧИНІ Cu ²⁺ – WO ₄ ²⁻ (Z = 1,17) – H ⁺ /OH ⁻ – H ₂ O, (C _w = 0,01 моль/л) <i>Печаліна Є. І., Дуванова Е. С., Радюк І. С., Розанцев Г. М.</i>	65
ЭФФЕКТИВНОСТЬ ТЕПЛООВОГО УДАРА ПРИ ЛУЖНОЙ КОНВЕРСИИ ВУГЛЯ В НАНОПОРИСТЫ МАТЕРИАЛЫ <i>Саберова В. О.</i>	66
SYNTHESIS OF NEW IRON(II) BIS- α -DIOXIMATE OF CHUGAEV'S TYPE AND OF ITS MACROCYCLIC DERIVATIVE AS THE REACTIVE PRECURSOR OF POLYAROMATIC CLATHROCHELATES <i>Chernii S. V., Selin R. O., Chernii V. Y., Voloshin Y. Z.</i>	67
SYNTHESIS AND ELECTROCHEMICAL HYDROGENATION OF THE Tb ₂ Co ₁₆ Mg _{0,5} Al _{0,5} PHASE <i>Stetskiy I. A., Kordan V. M., Tarasiuk I. I., Pavlyuk V. V.</i>	68
XRD STUDIES OF THE COMPLEX COMPOUND OF COPPER(II) WITH SUBSTITUTED HETEROCYCLIC THIOAMIDES <i>Gordienko O., Sydoruk T., Titov T., Korinenko B., Khutko M.</i>	69
UNEXPECTED OXIDATIVE C-H ALCOHOL FUNCTIONALIZATION OF 2-THIOHYDANTOINE DERIVATIVE DURING ELECTROCHEMICALLY ASSISTED CuCl π -COMPLEX FORMATION WITH Fe(III)/Cu(0) SOURCE OF Cu(I) <i>Fedorchuk A. A., Slyvka Yu. I., Mys'kiv M. M.</i>	70
СИНТЕЗ ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ ГІДРАТОВАНИХ КОБАЛЬТ(II) І МАНГАН (II) ФОСФАТІВ <i>Філіпова П. О., Антрапцева Н. М., Козачук Т. В.</i>	71
SOLUBILITY OF MANGANESE IN THE BINARY La–Zn AND Gd–Zn INTERMETALLICS <i>Chorna N. O., Kordan V. M., Zelinska O. Ya., Zelinsky A. V., Pavlyuk V. V.</i>	72
ORGANIC CHEMISTRY / ОРГАНІЧНА ХІМІЯ	73
КАТАЛІТИЧНИЙ СИНТЕЗ ЗМІШАНИХ АНГІДРИДІВ БЕНЗОЙНОЇ ТА АЛІФАТИЧНИХ КИСЛОТ <i>Аніщенко В. М., Редько А. М., Рибаченко В. І., Аніщенко Г. В.</i>	74
ДОСЛІДЖЕННЯ РЕАКЦІЇ ЙОДАРИЛЮВАННЯ МЕТИЛПРОПАРГІЛСУЛЬФОНУ ТА ПРОПАРГІЛОВОГО СПИРТУ <i>Бутенко С., Роговик М., Максимович І., Солудчик О., Піткович Х., Походило Н., Литвин Р., Обушак М.</i>	75
ВПЛИВ ТЕТРАЕТИЛАМОНІЙ ЙОДИДУ НА РЕАКЦІЮ БЕНЗОЙНОЇ КИСЛОТИ З ЕПІХЛОРГІДРИНОМ В ТЕТРАГІДРОФУРАНІ <i>Гембарук В. В., Бахалова Є. А., Швед О. М., Янова К. В.</i>	76
СИНТЕЗ НОВИХ ПОХІДНИХ ХРОМОНУ ТА ВИВЧЕННЯ ЇХ КОМПЛЕКСОУТВОРЕННЯ <i>Демидов О. О., Манвелян А. А., Гладков Є. С.</i>	77
ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕРМІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ПЛІВОК, УТВОРЕНИХ НА ОСНОВІ КОМПОЗИЦІЙ УРОНАНТИХ ПОЛІСАХАРИДІВ МЕТОДОМ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНОЇ СКАНУЮЧОЇ КАЛОРИМЕТРІЇ <i>Діль К. В., Оковитий С. І.</i>	78
ПЕРЕГРУПУВАННЯ СПРОПОХІДНИХ 1,3-НАФТОДІОКСИН-1-ОНІВ ПІД ДІЄЮ РЕАГЕНТУ ВІЛЬСМАЙЄРА-ХААКА <i>Ковтун А. В., Варениченко С. А., Фарат О. К., Марков В. І.</i>	79
БІОАКТИВНІСТЬ ПРЕНІЛ-АЛКІЛЬОВАНИХ БІС-ТРИАЗОЛІВ <i>Король Н. І., Головка-Камошенкова О. М., Паллаг О. В., Сливка М. В.</i>	80
СУМІСНИЙ ВПЛИВ ТЕМПЕРАТУРИ І ПОЛЯРНОСТІ РОЗЧИННИКА НА РЕАКЦІЙНУ СИСТЕМУ «ЕПІХЛОРГІДРИН – ПРОПІОНОВА КИСЛОТА – ТЕТРА- <i>n</i> -БУТИЛАМОНІЙ ЙОДИД» <i>Кравчук А. В., Югілова К. С., Швед О. М.</i>	81

СИНТЕЗ ТА ЕЛЕКТРОФІЛЬНА ЦИКЛІЗАЦІЯ 2-АЛІЛІТО-3-МЕТИЛ(ФЕНІЛ)-7-ТРИФЛУОРОМЕТИЛХІНАЗОЛІН-4(3 <i>H</i>)-ОНІВ	
<i>Кут Д. Ж., Кут М. М., Онисько М. Ю., Балог І. М., Лендел В. Г.</i>	82
КАТАЛІЗ РЕАКЦІЇ АЦЕТОЛІЗУ 2-(ХЛОРМЕТИЛ)ОКСИРАНУ СОЛЯМИ ТЕТРААЛКІЛАМОНІЮ	
<i>Марценюк Н. С., Югілова К. С., Швед О. М.</i>	83
АЦІДОЛІЗ ХЛОРМЕТИЛОКСИРАНУ 3-МЕТИЛБЕНЗОЙНОЮ КИСЛОТОЮ В ПРИСУТНОСТІ ТЕТРАБУТИЛАМОНІЙ ЙОДИДУ	
<i>Марчук Л. С., Міщенко А. О., Бахалова С. А., Швед О. М.</i>	84
МОЛЕКУЛЯРНИЙ ДОКІНГ БІОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ ПОХІДНИХ ГІДРОАКРИДИНІВ (ХІНОЛІНІВ)	
<i>Сметанін М. В., Токарева С. В., Варениченко С. А., Фарат О. К., Марков В. І.</i>	85
СИНТЕЗ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ФОТОІЗОМЕРИЗАЦІЇ ДІАРИЛІДЕНЦИКЛОАЛКАНОНІВ	
<i>Сніжко А. Д., Стоянова В. С., Гладков Є. С., Чепелева Л. В.</i>	86
СИНТЕЗ КОМПЛЕКСНИХ СПОЛУК НА ОСНОВІ САЛЕНОВИХ ЛІГАНДІВ ЯК ПЕРСПЕКТИВНИХ КАТАЛІЗАТОРІВ РЕАКЦІЇ НУКЛЕОФІЛЬНОГО РОЗКРИТТЯ ОКСИРАНОВОГО ЦИКЛУ	
<i>Соколовський Д. А., Югілова К. С., Швед О. М.</i>	87
Cu-CATALYZED FORMATION OF PYRIDINES FROM PROPARGYLAMINE AND CYCLOALKANONES	
<i>Sotnik S. O., Subota A. I., Lytvynenko A. S., Kolotilov S. V., Ryabukhin S. V., Volochnyuk D. M.</i>	88
ПРОПІОКСИ-ДИБЕНЗОІЛОКСИ-КАЛІКС[4]АРЕН ЯК ПРЕКУРСОР ДЛЯ ДИЗАЙНУ ВНУТРІШНЬОХІРАЛЬНИХ КАЛІКСАРЕНІВ	
<i>Трибрат О. О., Єсипенко О. А., Кальченко В. І.</i>	89
СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНИЙ МОНИТОРИНГ СТАНУ ТРИОКТИЛАМІНУ В РЕАКЦІЇ ЕПІХЛОРГІДРИНУ З ОЦТОВОЮ КИСЛОТОЮ	
<i>Червонченко І. Д., Югілова К. С., Швед О. М.</i>	90
PHYSICAL CHEMISTRY / ФІЗИЧНА ХІМІЯ..... 91	
CATALYTIC OXIDATION OF HETEROCYCLIC KETONES BY HYDROGEN PEROXIDE AT PRESENCE OF Cu(II) AND Fe(III) POROUS COORDINATION POLYMERS	
<i>Abdullaev E. N., Kolosov M. O., Shvets E. H., Mishura A. M., Gavrilenko K. S., Kolotilov S. V.</i>	92
ПРО МЕХАНІЗМИ РЕАКЦІЙ <i>n</i> -АЛКАНІВ У СІРЧАНОКИСЛИХ РОЗЧИНАХ ФОРМАЛЬДЕГІДУ Й МАРГАНЦІЮ(III)	
<i>Волкова Л. К., Новохатько А. О., Опейда Й. О.</i>	93
ОДЕРЖАННЯ ЛЕВУЛІНОВОЇ КИСЛОТИ НА СУПЕРКИСЛОТНОМУ ЗМІШАНОМУ ZrO ₂ -SiO ₂ -SnO ₂ КАТАЛІЗАТОРІ	
<i>Гес Н. Л., Милін А. М.</i>	94
ВИЗНАЧЕННЯ ЕНЕРГІЇ АКТИВАЦІЇ РЕАКЦІЇ РОЗКЛАДАННЯ ПЕРОКСИДУ ВОДННО НАНОКОМПОЗИТАМИ ГАЛОЗИТНИ НАНOTРУБКИ/НАНОРОЗМІРНИЙ ОКСИД ЦЕРІЮ	
<i>Гринько А. М., Бричка А. В., Бакаліньська О. М., Картель М. Т.</i>	95
ВПЛИВ ЖОВЧНОЇ КИСЛОТИ НА ФОРМУВАННЯ МЕЗОПОРИСТОЇ СТРУКТУРИ MSM-41	
<i>Роїк Н. В., Белякова Л. О., Дзязько М. О.</i>	96
ВПЛИВ ГУМІНОВИХ КИСЛОТ НА КІНЕТИКУ ОКСИДЕННЯ КУМОЛУ В ПРИСУТНОСТІ АСКОРБІНОВОЇ КИСЛОТИ	
<i>Дикун О. М., Смирнова О. В., Єфімова І. В.</i>	97
СУЛЬФОНІЛОВАННЯ ГОСИПОЛУ ТОЗИЛХЛОРИДОМ В ПРИСУТНОСТІ 4-МЕТОКСИПІРИДИН N-ОКСИДУ	
<i>Дикун О. М., Аніщенко В. М., Редько А. М., Рибаченко В. І.</i>	98
ХІМІЧНА ІОНІЗАЦІЯ СПЛАВУ БрБ2 В РОЗЧИНАХ РІЗНИХ ЕЛЕКТРОЛІТІВ	
<i>Єсорова Л. М., Залогіна С. М.</i>	99
ВПЛИВ ПОЛІОКСОМЕТАЛАТІВ НА ЕФЕКТИВНІСТЬ РЕАКЦІЇ ФЕНТОНА У ДЕКОЛОРИЗАЦІЇ СИНТЕТИЧНИХ БАРВНИКІВ	
<i>Івашук О. О., Мельнікова А. М., Жильцова С. В., Марійчак О. Ю., Радіо С. В., Опейда Й. О.</i>	100
MOLECULAR MODELING OF INTERACTION BETWEEN MACROMOLECULES OF POLYVINYL ALCOHOL AND POLYANILINE	
<i>Kashmaryk V. V., Dutka V. S., Kovalskyi Ya. P.</i>	101
АНТИОКСИДАНТНИЙ ПОТЕНЦІАЛ ВОДНО-ЕТАНОЛЬНИХ ЕКСТРАКТІВ З ПОРОШКІВ ВИЩИХ ГРИБІВ	
<i>Комендра В. С., Корман Т. С., Лесинина Ю. О.</i>	102
ВЛИЯНИЕ СВЧ ОБРАБОТКИ НА ПОРИСТУЮ СТРУКТУРУ ЦІРКОНІЙСИЛІКАТНИХ ГІДРОГЕЛЕЙ	
<i>Кравченко Н. В., Редькина А. В., Коновалова Н. Д., Цыба Н. Н.</i>	103
Cs-, Mg-, Zn-CONTAINING HIERARCHICAL ZEOLITES AS EFFECTIVE CATALYSTS FOR 2-AMINOTIOPHENES PRODUCTION BY GEWALD REACTION	
<i>Kurmach M. M., Konysheva K. M., Lozovytska O. I., Povalchuk S. V., Shvets O. V.</i>	104

DEVELOPMENT OF COMPOSITES OF NICKEL NANOPARTICLES WITH ANODIC NANOPOROUS ALUMINA	
<i>Kurmach M. M., Mishura A. M., Lytvynenko A. S., Brzózka A., Zaraska L.</i>	105
НОВІ ТЕПЛОБАР'ЄРНІ ПОКРИТТЯ НА ОСНОВІ КОМПЛЕКСНО ЛЕГОВАНОГО ZrO ₂	
<i>Макудера А. О., Редько В. П., Лакиза С. М.</i>	106
SURFACE MODIFICATION EFFECT BY Fe IONS ON PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF ANATASE AND RUTILE	
<i>Manuilov E. V., Shymanovska V. V., Khalyavka T. A., Gavrylko T. A., Shcherban N. D.</i>	107
СТІЙКІСТЬ МАТЕРІАЛІВ СИСТЕМИ ZrO ₂ – Y ₂ O ₃ – CeO ₂ , ДО ПРОЦЕСУ СТАРІННЯ	
<i>Марек І. О., Рубан О. К., Редько В. П., Дуднік О. В.</i>	108
СТВОРЕННЯ НОВИХ КАТАЛІЗАТОРІВ «ПАЛАДІЙ НА ВУГЛІЛ»	
<i>Мельничук В. М., Бичко І. Б.</i>	109
РЕАКЦІЙНА ЗДАТНІСТЬ АРИЛЗАМІЩЕНИХ ФТАЛІМІД- <i>N</i> -ОКСИЛЬНИХ РАДИКАЛІВ У РЕАКЦІЯХ ВІДРИВУ <i>N</i> -АТОМА ВІД α -С-Н ЗВ'ЯЗКІВ БЕНЗИЛОВИХ СПИРТІВ	
<i>Мельникова А. М., Гордєєва І. О., Компанець М. О., Куш О. В., Шендрік О. М.</i>	110
ЕНЕРГЕТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ АСОЦІАТИВ БАРВНИКІВ З ІОННИМИ ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНИМИ РЕЧОВИНАМИ	
<i>Шаповалов С. А., Мошаренкова О. В.</i>	111
КАТАЛІТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НАНЕСЕНОГО ОКСИДУ ГРАФЕНУ НА ОКСИД АЛЮМІНІУ В РЕАКЦІЇ ГІДРУВАННЯ ЕТИЛЕНУ	
<i>Носач В. В., Бичко І. Б.</i>	112
CATALYTIC REDUCTIVE AMINATION <i>p</i> -МЕТОХУБЕНЗАЛДЕГІДУ WITH DI- <i>ISO</i> -PROPYLAMINE AT PRESENCE OF Co-CONTAINING COMPOSITE	
<i>Asaula V. M., Omelian I. V., Gavrilenko K. S., Pariiska O. O., Ryabukhin S. V., Volochnyuk D. M., Kolotilov S. V.</i>	113
ВПЛИВ ОБРОБКИ НОСІЯ НА КАТАЛІТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ Co-Fe СИСТЕМИ КАТАЛІЗАТОРІВ, НАНЕСЕНОЇ НА УЛЬТРАДИСПЕРСНІ АЛМАЗИ, В РЕАКЦІЇ МЕТАНУВАННЯ CO ₂	
<i>Петросова Г. Р., Дяченко А. Г., Гайдай С. В., Льницька Г. Д., Зайцева І. М.</i>	114
ДОСЛІДЖЕННЯ ІОННОЇ АСОЦІАЦІЇ БАРВНИКІВ З ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНИМИ РЕЧОВИНАМИ У ВОДНИХ РОЗЧИНАХ	
<i>Шаповалов С. А., Пономарьов В. К., Бутенко С. В.</i>	115
ФІЗИКО-МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КОМПЗИТИВ СИСТЕМИ Al ₂ O ₃ – ZrO ₂ (Y ₂ O ₃ , CeO ₂)	
<i>Смирнова-Замкова М. Ю., Рубан О. К., Биков О. І., Мєлах І., Мосіна Т. В., Дуднік О. В.</i>	116
KNOEVENAGEL REACTION CATALYZED BY IRON(III) 1,3,5-BENZENETRICARBOXYLATE IN FLOW	
<i>Sotnik S. O., Gavrilenko K. S., Kolotilov S. V.</i>	117
МЕТОДИКА ВИГОТОВЛЕННЯ ФОТОЧУТЛИВИХ ГЕТЕРОСТРУКТУР <i>n</i> -SnS ₂ / <i>p</i> -InSe, З ВОДНИХ РОЗЧИНІВ СОЛЕЙ SnCl ₄ ·5H ₂ O і (NH ₂) ₂ CS МЕТОДОМ СПРЕЙ-ПІРОЛІЗУ	
<i>Ткачук І. Г., Орлецький І. Г., Ковалюк З. Д.</i>	118
ВИВЧЕННЯ СОРБЦІЇ ФЕНОЛУ НА ПОВЕРХНІ ГІБРИДНИХ МСМ-41 КРЕМНЕЗЕМІВ	
<i>Трофимчук І. М., Бєлякова Л. О.</i>	119
POLYMERIC NANOCOMPOSITES BASED ON POLYMETHACRYLIC ACID AND POLYANILINE	
<i>Khatar O. O., Dutka V. S., Kovalskyi Ya. P.</i>	120
INVESTIGATION OF TITANIUM DIOXIDE DOPED BY CARBON AND SULFUR AS PHOTOCATALYST	
<i>Sharovalova M., Khalyavka T., Camyshan S. V., Khyzhun O., Shcherban N., Korzhak A., Permyakov V.</i> 121	
ДОСЛІДЖЕННЯ НАНОПОРОШКІВ ОКСИДНИХ ФАЗ ЗІ СТРУКТУРОЮ ТИПУ ПЕРОВСКІТУ	
<i>Широків О. В., Лобунець Т. Ф., Чуднівнич О. В., Рагуля А. В.</i>	122
КЕРАМІКА ДЛЯ ТЕРМОБАР'ЄРНИХ ПОКРИТТІВ НА ОСНОВІ ZrO ₂ , КОМПЛЕКСНО ЛЕГОВАНОГО ОКСИДАМИ РЗЕ ЦЕРЬЄВОЇ ПІДГРУПИ	
<i>Шмибельський В. Б., Рубан О. К., Дуднік О. В.</i>	123
CHEMICAL ENGINEERING / ХІМІЧНА ІНЖЕНЕРІЯ	125
ПОЛИМЕРИЗАЦІЯ СИНІЛЬНОЇ КИСЛОТИ	
<i>Аєіна С. І., Гринь Г. І.</i>	126
SYNTHESIS OF ALUMINIUM PHOSPHATES BY CHEMICAL PRECIPITATION IN AQUEOUS SOLUTIONS VARYING ACIDITY AND COMPONENT MOLE RATIO	
<i>Aksutiina K. I., Dubenko A. V., Nikolenko M. V.</i>	127
ВПЛИВ ТИПУ АКТИВАЦІЇ НА ПОРИСТІСТЬ ТА СОРБЦІЙНО-МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ СОРБЕНТІВ З КОМПОЗИЦІЙНОЇ СИРОВИНИ	
<i>Бован Л. А., Циба М. М., Шендрік Т. Г.</i>	128
СИНТЕЗ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ КЕРАМІЧНИХ МАТЕРІАЛІВ	
<i>Бондарєва А. І., Тобілко В. Ю., Корнілович Б. Ю.</i>	129

MODELING OF DEACTIVATION SYSTEM FOR DIMETOATE <i>Vasylenko V., Sidorenko M., Mickevičius S.</i>	130
ПРИМЕНЕНИЕ ДЕКОРИРОВАННОГО СТЕКЛА В АРХИТЕКТУРЕ И СТРОИТЕЛЬСТВЕ <i>Ветвицкая С. А., Брагина Л. Л.</i>	131
UREA PHOSPHATE AS A COMPONENT OF COMPLEX NPCa-FERTILIZERS <i>Vetsner Yu. I.</i>	132
СИНТЕЗ ХІМІЧНО ЧИСТИХ ФОСФАТІВ АМОНІУ, НАТРІУ ТА КАЛІУ НА ОСНОВІ ЕКСТРАКЦІЙНОЇ ОРТОФОСФОРНОЇ КИСЛОТИ <i>Гросу О. К., Кінаш М. С., Василенко К. В., Ніколенко М. В.</i>	133
РОЗРОБКА АРОМАКОМПОЗИЦІЙ ДЛЯ КОСМЕТИЧНИХ ВИРОБНИЦТВ <i>Гусаревич Л. В., Лабяк О. В.</i>	134
СИНТЕЗ ДОВГОЛАНЦЮГОВИХ ЕСТЕРІВ ЖИРНИХ КИСЛОТ НА ОСНОВІ ТЕХНІЧНИХ ЖИРІВ <i>Давидадзе Д. З., Папейкін О. О.</i>	135
ВАЖКІ ТАМПОНАЖНІ ЦЕМЕНТИ НА ОСНОВІ ВІДХОДІВ ХІМІЧНОЇ ГАЛУЗІ ПРОМИСЛОВОСТІ <i>Дев'ятова Н. Б., Корогодська А. М., Шабанова Г. М.</i>	136
НЕЙТРАЛІЗАЦІЯ КИСЛИХ ВОДНИХ СТОКІВ В РЕАКТОРІ З ПОЛІМЕРНОГО МАТЕРІАЛУ <i>Деркаченко Д. О., Поджарський М. А.</i>	137
РОЗРОБКА СКРАБУ ДЛЯ ТІЛА З ВИКОРИСТАННЯМ АБРАЗИВУ НАТУРАЛЬНОГО ПОХОДЖЕННЯ <i>Драбак О. С., Лабяк О. В.</i>	138
ВПЛИВ СПОСОБУ ОТРИМАННЯ НА ФОРМУ АГЛОМЕРАТІВ ПОРОШКІВ СРІБЛА <i>Корольчук Д. Г., Коломієць О. В., Овчаренко В. І.</i>	139
СОРБЦИОННАЯ ОЧИСТКА СТОЧНЫХ ВОД ОТ ИОНОВ ЦИНКА ДРЕВЕСНЫМИ ОТХОДАМИ <i>Косевич Е. В., Шибика Л. А.</i>	140
ОТРИМАННЯ НАНОГЛОБУЛЯРНОГО ВУГЛЕЦЮ В ЕЛЕКТРИЧНОМУ ПОЛІ <i>Куряшов А. В.</i>	141
ДОСЛІДЖЕННЯ КЛІНКЕРІВ КОБАЛЬТВИСНИХ ЦЕМЕНТІВ <i>Левадна С. В., Гамова О. О., Корогодська А. М., Шабанова Г. М.</i>	142
ХРОМАТОГРАФІЧНИЙ АНАЛІЗ КРОХМАЛЮ ТА ЙОГО ПОХІДНИХ <i>Миргородська В. Д., Авдієнко Т. М., Ніколенко М. В.</i>	143
ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСУ УТВОРЕННЯ КОМПЛЕКСІВ В АНТОЦЯНОВИХ БАРВНИКАХ <i>Мощенко І. М., Чигиринець О. Е.</i>	144
ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕРМОСТІЙКИХ СКЛОКРИСТАЛІЧНИХ МАТЕРІАЛІВ <i>Нетребя О. О., Науменко С. Ю., Салей Ан. А.</i>	145
РОЗРОБКА ЗНОСТОСТІЙКИХ ПРОТЕКТОРНИХ ПОКРИТТІВ ДЛЯ КЕРАМОГРАНІТУ <i>Новосолова Л. О., Саввова О. В., Воронов Г. К., Покроєва Я. О.</i>	146
ХІМІЧНА МОДИФІКАЦІЯ КАРТОПЛЯНОГО КРОХМАЛЮ НЕОРГАНІЧНИМИ ОКИСНИКАМИ <i>Подорожко В. Г., Должиков С. С., Авдієнко Т. М.</i>	147
СИНТЕЗ ФОСФАТІВ МАГНІУ ДЛЯ ВИКОРИСТАННЯ В ХАРЧОВІЙ ПРОМИСЛОВОСТІ <i>Пунько І. С., Василенко К. В., Ніколенко М. В.</i>	148
СКЛОМЕТАЛІЧНІ ПОКРИТТЯ ДЛЯ ЗАХИСТУ ХРОМОНІКЕЛЕВИХ СПЛАВІВ ВІД ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО ОКИСЛЕННЯ <i>Степаненко Г. Д., Нагорна Т. І., Голєус В. І., Салей Ан. А.</i>	149
УСОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ СИНТЕЗА АЦЕМИДОФЕНА <i>Бушув А. С., Шапкін В. П., Мороз О. В., Стрельцова С. В., Піддубна К. Ю.</i>	150
ПРОМИСЛОВЕ ОСУШЕННЯ ОРГАНІЧНИХ РОЗЧИННИКІВ В ЦЕОЛПТОВИХ УСТАНОВКАХ <i>Тараненко І. В., Синявський С. В., Поджарський М. А.</i>	151
MECHANICAL PROPERTIES OF GALVANIC METALOXIDE Fe-Co-MoO _x COATING <i>Tur Yu. I., Sakhnenko M. D., Ved' M. V., Yermolenko I. Yu., Karakurkchi G. V.</i>	152
ФОРМУВАННЯ ТУГОПЛАВКИХ СПОЛУК ПРИ СПІЛЬНОМУ СПАЛЮВАННІ ВУГІЛЛЯ РІЗНОГО МЕТАМОРФІЗМУ І СОЛОНОСТІ <i>Шендрік Т. Г., Фатєєв А. І.</i>	153
ІННОВАЦІЙНІ НАПРЯМКИ РОЗРОБКИ СКАФФОЛДІВ ДЛЯ ЗАМІЩЕННЯ КІСТКОВОЇ ТКАНИНИ <i>Фесенко О. І., Саввова О. В., Байрамов Е.</i>	154
СОРБЦИОННАЯ АКТИВНОСТЬ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ШЛАКОВ <i>Хоботова Э. Б., Грайворонская И. В., Горенко Ю. В.</i>	155
ЗАГРЯЗНЕНИЕ ТЯЖЕЛЫМИ МЕТАЛЛАМИ ПОЧВ ВБЛИЗИ ТЭС <i>Яровой Я. К., Игнатенко М. И.</i>	156
СHEMICAL EDUCATION / ХІМІЧНА ОСВІТА	157
ВИКОРИСТАННЯ ІННОВАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ НА ЗАНЯТТЯХ АНАЛІТИЧНОЇ ХІМІЇ <i>Бараняк О. Г.</i>	158

ЕЛЕМЕНТИ ІГРОВИХ ТЕХНОЛОГІЙ ЯК ЗАСІБ ПІДВИЩЕННЯ ЯКОСТІ НАВЧАННЯ З ХІМІЇ <i>Біла Г. М., Антрапцева Н. М.</i>	159
ОСНОВНІ ПРОБЛЕМИ У ВИКЛАДАННІ ХІМІЇ ОНЛАЙН <i>Майорова О. Р.</i>	160
РОЗРОБКА КУРСУ «ХІМІЧНА КІНЕТИКА» НА ПЛАТФОРМІ ДИСТАНЦІЙНОГО НАВЧАННЯ MOODLE <i>Мицук А. О., Гордєєва І. О., Мельниченко В. І.</i>	161
ОСОБЛИВОСТІ ТА ТРУДНОЩІ ВИКЛАДАННЯ ХІМІЧНИХ ДИСЦИПЛІН В ПЕРІОД КАРАНТИННИХ ОБМЕЖЕНЬ <i>Мороз В. О., Кучма А. Ю., Горяїнова Ю. А.</i>	162
НАФТОХІМІЧНІ УЯВЛЕННЯ В «НАТУРФІЛОСОФІЇ» ТЕОФАНА ПРОКОПОВИЧА <i>Родигін К. М., Родигін М. Ю.</i>	163
ІННОВАЦІЙНИЙ ПОТЕНЦІАЛ ВИКЛАДАЧІВ ХІМІЧНИХ ДИСЦИПЛІН <i>Туриця О. О.</i>	164
АНАЛІЗ ОСОБЛИВОСТЕЙ ВИКОРИСТАННЯ ЕЛЕКТРОННОГО НАВЧАЛЬНОГО КУРСУ З ДИСЦИПЛІНИ ХІМІЯ <i>Хижан О. І., Панченко В. А., Ковшун Л. О., Нестєрова К. А., Хижан О. І.</i>	165
МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОПОДГОТОВКИ БАКАЛАВРОВ ПО ДИСЦИПЛИНЕ «ХИМИЯ» В ТЕХНИЧЕСКОМ ВУЗЕ <i>Хоботова Э. Б.</i>	166
CHEMISTRY OF POLYMERS AND COMPOSITES / ХІМІЯ ПОЛІМЕРІВ І КОМПЗИТІВ	167
SYNERGETIC EFFECT OF HAZELNUT SHELLS AND BENTONITE ON THE PROPERTIES OF HYBRID POLYETHYLENE BIOCOMPOSITES <i>Arzumanova N. B., Kakhramanov N. T.</i>	168
DEVELOPMENT AND APPLICATION OF THE MICROEMULSION COMPOSITE MATERIALS WITH BIOBASED ADDITIVES <i>Vodachivska L.Yu., Verba A. Yu.</i>	169
СИНТЕЗ І ВЛАСТИВОСТІ ПНОПОЛІУРЕТАНОВИХ КОМПОЗИЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ З АЛЬБУЦИДОМ <i>Віслогузова Т. В., Рожнова Р. А.</i>	170
UTILIZATION OF Cr (VI) BY COMPOSITES CELLULOSE/POLYANILINE <i>Vlad Kh. I., Vereshchagin O. M., Yatsyshyn M. M., Zelinskiy A. V., Reshetnyak O. V.</i>	171
СИНТЕЗ НАНОСТРУКТУРОВАНИХ КАТАЛІЗАТОРІВ ДЛЯ ОКИСНЕННЯ ВУГЛЕВОДНІВ ПО С-Н ЗВ'ЯЗКАХ <i>Новоухатко А. О., Демчина О. І., Шепарович Р. Б., Опейда Л. І., Євчук І. Ю.</i>	172
РОЗРОБКА ЛАКОФАРБОВОЇ КОМПОЗИЦІЇ З ПІДВИЩЕНОЮ ВОЛОГОСТІЙКІСТЮ <i>Димура В. В., Голуб Л. С.</i>	173
CHEMICAL SYNTHESIS OF POLY(2-AMINOTRIAZOLE) IN THE PRESENCE OF GRAPHENE OXIDE <i>Dibenska L.</i>	174
ВПЛИВ КОМПОНЕНТІВ ПОЛІМЕРНОЇ МАТРИЦІ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ ГІБРИДНИХ ПРОТОНПРОВІДНИХ МЕМБРАН <i>Жигайло М. М., Демчина О. І., Євчук І. Ю.</i>	175
ВПЛИВ ТИПУ ПРЕКУРСОРУ НА СТРУКТУРНУ ОРГАНІЗАЦІЮ ЕПОКСИДНО-СИЛОКСАНОВИХ НАНОКОМПЗИТІВ АНГІДРИДНОГО ТВЕРДНЕННЯ, ОТРИМАНИХ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ МЕТОДОМ <i>Жильцова С. В., Леонова Н. Г., Лисенков Е. А.</i>	176
ІНФРАЧЕРВОНИЙ СПЕКТРАЛЬНИЙ АНАЛІЗ ВУГЛЕПЛАСТИКІВ НА ОСНОВІ ПОЛІТРИФТОРХЛОРЕТИЛЕНУ <i>Калініченко С. В., Томіна А.-М. В., Єрємїна К. А.</i>	177
ПОЛУЧЕНИЕ СОПОЛИМЕРОВ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ПОЛИГЛИКОЛЬМАЛЕИНАТФТАЛАТОВ НА ОСНОВЕ КОМПОНЕНТОВ С ОГРАНИЧЕННОЙ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ СОВМЕСТИМОСТЬЮ <i>Киосе О. О., Савин С. Н.</i>	178
ДОСЛІДЖЕННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ ПОЛІМЕРНИХ ГІДРОГЕЛІВ, МОДИФІКОВАНИХ ГУМІНОВИМИ КИСЛОТАМИ <i>Лебедев В. В., Мірошніченко Д. В., Савченко Д. О., Мазченко М. В., Лендич С. С., Борісенко Л. М.</i>	179
THERMAL SYNTHESIS OF METAL-CARBON NANOCOMPOSITES BASED ON SYNTHETIC HUMIC SUBSTANCES <i>Litvin V. A., Njoh R. A., Ozivska I. O.</i>	180
СОРБЦІЙНІ ВЛАСТИВОСТІ КРІОГІДРОГЕЛІВ НА ОСНОВІ ЕКСТРАКТУ РОМАШКИ <i>Ляшок М. О., Іщенко О. В., Ляшок І. О.</i>	181
ПРОГНОЗУВАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ ГУМИ, ЯК МАТРИЧНОЇ СТРУКТУРИ <i>Павленко А. А., Гаврилук Ю. В., Васильєв Р. В., Євдокименко Н. М.</i>	182

СИНТЕЗ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ НОВИХ ПОЛІУРЕТАНСЕЧОВИН, ЯКІ МІСТЯТЬ ЯК ПОДОВЖУВАЧ МАКРОЛАНЦЮГА 3,6-ДІОКСООКТАН-1,8-ДІАМІН <i>Примушко С. О., Козлова Г. А., Гладирь І. І., Рожнова Р. А., Галатенко Н. А.</i>	183
ХІМІЧНИЙ СИНТЕЗ ПОЛІІНДОЛУ <i>Пришляк Х., Аксіментьєва О.</i>	184
ЗАСТОСУВАННЯ ПРИНЦИПІВ «ЗЕЛЕНОЇ ХІМІЇ» ПРИ ПРОЕКТУВАННІ ВИРОБНИЦТВ СИНТЕЗУ ВИСОКОМОЛЕКУЛЯРНИХ СПОЛУК <i>Рассоха О. М., Черкашина Г. М., Мажуга О. В.</i>	185
ОПТИМІЗАЦІЯ ПАРАМЕТРІВ ТЕХНОЛОГІЧНОГО ПРОЦЕСУ ВИРОБНИЦТВА ПОЛКАПРОАМІДУ <i>Рассоха О. М., Черкашина Г. М., Деріус Д. В.</i>	186
УДАРОСТІЙКІ ФУРАНО-ЕПОКСИДНІ ЗАХИСНІ АНТИКОРОЗІЙНІ ПОКРИТТЯ <i>Рассоха О. М., Черкашина Г. М., Малихіна А. В.</i>	187
ПОЛІМЕРНІ ІОННІ РІДИНИ ТА ІОННІ РІДИНИ НА ОСНОВІ ПОХІДНИХ ТЕТРАГІДРО-1,4- ОКСАЗИНУ ТА 1,2-ЕПОКСИ-4,7-ДІОКСОНОНЕН-8 <i>Свердліковська О. С., Черваков О. В.</i>	188
ВПЛИВ УЛЬТРАЗВУКУ НА ШВИДКІСТЬ ГЕЛЕУТВОРЕННЯ ПРИ СИНТЕЗІ КОМПОЗИТУ ТИПУ «СИЛКАГЕЛЬ – Na ₂ SO ₄ » <i>Сергієнко Я. О., Коломієць О. В., Сухий К. М.</i>	189
ОРГАНІЧНИЙ СКЛАДНИК СУПУТНОГО ПРОДУКТУ ПРОЦЕСУ ОТРИМАННЯ СОНЯШНИКОВОЇ ОЛІЇ ЯК ІНГРЕДІЄНТ ЕЛАСТОМЕРНИХ КОМПОЗИЦІЙ <i>Скрипкіна М. Д., Соколова Л. О., Овчаров В. І.</i>	190
СИНТЕЗ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ КОМПОЗИТНИХ МАТЕРІАЛІВ АНТИБАКТЕРІАЛЬНОЇ ДІЇ НА ОСНОВІ КРЕМНЕЗЕМУ ТА ПОЛІМОЛОЧНОЇ КИСЛОТИ <i>Тумко А. В., Фуртат І. М., Вакулук П. В., Козакевич Р. Б., Поліщук Л. М., Тьортих В. А.</i>	191
ДОСЛІДЖЕННЯ ХІМІЧНОГО ОПОРУ ЕПОКСИДНИХ СКЛОПЛАСТИКІВ <i>Хацінська А. В., Карандашов О. Г., Авраменко В. Л., Підгорна Л. П.</i>	192
СИНТЕЗ ТА СТРУКТУРА ГІДРОГЕЛІВ ПОЛВІНІЛОВОГО СПИРТУ ТА ЖЕЛАТИНУ, ОДЕРЖАНИХ МЕТОДОМ КРІОСТРУКТУРУВАННЯ <i>Фарманд К. Ф., Мурланова Т. В., Діхтярук С. В., Матковський О. К., Паєнтко В. В.</i>	193
CRYSTALLIZATION BEHAVIOR OF IRRADIATED POLY-L-LACTIDE AND ITS COMPOSITES WITH BIOCIDE <i>Fedorenko A. A., Krul L. P., Butovskaya G. V.</i>	194
ДОСЛІДЖЕННЯ ПОЛІМЕРНИХ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ ПОЛІСАХАРИДІВ ТА ІХТІОКОЛАГЕНУ <i>Варлан К. Є., Шевцова К. Р., Луцкевич А. О.</i>	195
РОЗРОБКА АЛКІДНО-УРЕТАНОВОЇ КОМПОЗИЦІЇ З ПІДВИЩЕНОЮ ЗНОСОСТІЙКІСТЮ <i>Шищенко О. С., Голуб Л. С.</i>	196
ПОЛУЧЕНИЕ ПОЛИАКРИЛАМИДА И ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТНЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ЕГО ОСНОВЕ МЕТОДОМ ФРОНТАЛЬНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ В НЕПРЕРЫВНОМ РЕЖИМЕ <i>Шуляковская М. Б., Гринюк Е. В.</i>	197
AUTHOR INDEX / АВТОРСЬКИЙ ПОКАЖЧИК	199
CONTENTS / ЗМІСТ	205
CONFERENCE PARTNERS	214



УкрХимАнализ

ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ В УКРАИНЕ

Компания «УкрХимАнализ» специализируется на проведении химического анализа и независимых химических экспертиз

Основные виды деятельности компании «УкрХимАнализ»:

- ✓ Определение химического состава материалов
- ✓ Разработка рецептур товаров
- ✓ Исследование качества промышленного сырья
- ✓ Экологическая экспертиза жилья и офисных помещений
- ✓ Определение качества воздуха в помещениях
- ✓ Анализ качества питьевой воды
- ✓ Анализ почвы на плодородие и загрязнители
- ✓ Исследование качества топлив, масел и др. ГСМ
- ✓ Анализ сточных вод предприятий
- ✓ Определение тяжелых металлов

Среди наших клиентов известные украинские бренды: Метинвест, Vents, Sport Life, Iveco, Юрия-Фарм, Макрохим, телеканал СТБ, окна Паритет, Vaillant, Баухеми, Наша Ряба

Приглашаем Вас к сотрудничеству!



НАУКОВО-СЕРВІСНА ФІРМА

WWW.OTAVA.UA

Науково-сервісна фірма
«ОТАВА» спеціалізується
в галузі наукових
досліджень
на замовлення
для українських
і зарубіжних
підприємств.

Основні напрями діяльності
НСФ «ОТАВА»:

- проведення складного наукового хімічного аналізу, аналізу природної та хімічної сировини, наукового біологічного аналізу
- визначення важких металів
- комплексний еколого-гігієнічний експрес-аналіз
- екологічна експертиза при купівлі житла та офісних приміщень
- визначення якості повітря в приміщенні
- вимірювання електромагнітного випромінювання
- розробка хімічних товарів, виробництво товарів автохімії, агрохімії, побутової хімії та різних технічних рідин на замовлення
- виявлення фальсифікатів і підробок
- синтез пептидів та хімічний синтез на замовлення




ОТАВА – колектив професіоналів, які здатні виконати замовлення будь-якого ступеня складності.

Співпрацюючи з нами, Ви отримujete якість, справедливi ціни та максимально короткі строки виконання замовлення!

Контактна інформація:

Науково-сервісна фірма «ОТАВА»
03680, м. Київ, вул. Акад. Заболотного, 150
Тел.: +38 044 221 72 30
e-mail: info@otava.ua
www.otava.ua



**вул. Олесь Гончара, 65, м. Київ
01054, Україна**

+38 (044) 580-80-08

**apcsu@apcsu.ua
www.apcsu.ua**

Асоціація «Парфумерія та Косметика України» – це об'єднання підприємств парфумерно-косметичного ринку України задля обміну досвідом, вирішення професійних питань на всеукраїнському та міжнародному рівнях та розвитку галузі як єдиного цілого. АПКУ виступає представником вітчизняної косметично-парфумерної індустрії у відносинах із урядом та на міжнародній арені, приймає активну участь у створенні нормативно-технічної документації, є членом Технічних комітетів галузі, проводить події, спрямовані на розвиток галузі, надає компетентні консультації своїм учасникам.



В Донецькому національному університеті імені Василя Стуса активно розвивається студентське самоврядування, яке є доброю платформою для розвитку студента як особистості та набуття досвіду управління.

Студентська рада – це можливість безпосередньо брати участь в управлінні університетом. Представники студентського самоврядування входять до багатьох органів закладу вищої освіти: Ректорату, Вченої ради, Конференції трудового колективу, Стипендіальної комісії тощо.

Кожен студент, який має бажання та сили, може долучитися до прийняття важливих рішень, які впливають на функціонування й розвиток ДонНУ імені Василя Стуса.

**Донецький національний університет
імені Василя Стуса,
108 каб., вул. 600-річчя, 21,
Вінниця, 21021, Україна
stud-rada.council@donnu.edu.ua**





решения для лабораторий

ООО «ХИМЛАБОРРЕАКТИВ»

ООО «Химлаборреактив» специализируется на комплексном оснащении лабораторий.

Компания предоставляет самый широкий ассортимент продукции для компаний любого профиля и величины:

- аналитическое и лабораторное оборудование;
- лабораторную мебель ТМ «Эксперт»;
- реактивы и питательные среды MERCK KGaA;
- химические реактивы;
- лабораторную посуду.

«Химлаборреактив» – официальный украинский партнер мировых лидеров в области разработки решений для лабораторий. Сотрудничество с производителями такого уровня позволяет компании предоставлять полный комплекс услуг в этой области: предпроектное обследование, внедрение, постановка методик и послегарантийное обслуживание. Кроме того, сертифицированные специалисты проводят обучение, информационную и техническую поддержку пользователей.

Сегодня компания предлагает:

- специализированные решения для отраслевых лабораторий;
- самый широкий ассортимент продуктов для лабораторий – более 300 000 наименований;
- прямые договоры с ведущими мировыми производителями;
- профессиональную команду из 50 менеджеров по продажам и отдел квалифицированных специалистов и отраслевых экспертов для решения задач любого уровня сложности;
- собственный оптимально сформированный склад часто запрашиваемого оборудования и расходных материалов площадью более 12 000 м²;
- доставку по всей Украине собственным транспортом и курьерскими службами;
- действующую на предприятии международную систему качества ISO 9001:2000 в области комплексного обеспечения лабораторий и поставок химического сырья;
- изготовление нестандартных лабораторных изделий из стекла в соответствии с чертежом заказчика;
- гибкость и индивидуальный подход в решении задач клиента.

«Химлаборреактив» заслужил доверие 10 116 крупных предприятий и организаций Украины. Компания открыта к диалогу и сделает все возможное, чтобы задачи лаборатории были решены качественно, профессионально и в максимально быстрые сроки.



В І Н Н И Ц Ь К А ТОРГОВО-ПРОМИСЛОВА ПА Л А Т А

Головне завдання Вінницької ТПП полягає в тому, щоб як найефективніше сприяти розвитку вітчизняної економіки, і перш за все – регіонального бізнесу, налагоджувати і розвивати прямі зв'язки з зарубіжними партнерами, взаємовигідну співпрацю між підприємствами різних форм власності в галузях економіки, науки і торгівлі. Ми займаємо тверді позиції у світі бізнесу, що ґрунтуються на багатому досвіді, бездоганній репутації Палати, глибокій компетентності її фахівців і можливості якнайповніше задовольняти потреби підприємців, пропонуючи їм все ширший спектр професійних послуг.

- ❖ **Комплексне юридичне обслуговування**
- ❖ **Ресстрація, оцінка, захист інтелектуальної власності (торгової марки, винаходи, корисні моделі, промислові зразки, авторське право)**
- ❖ **Експертиза та сертифікація товарів**
- ❖ **Експертна оцінка майна та нерухомості**
- ❖ **Штрихове кодування товарів**
- ❖ **Служба Супроводу Інвесторів (повний спектр послуг з зовнішньо-економічної діяльності)**
- ❖ **Підключення до мережі Інтернет та хостинг**
- ❖ **Іноземні переклади (36 мов)**
- ❖ **Продаж програмного забезпечення**
- ❖ **Організація виставок (expo.vn.ua)**
- ❖ **Туристичні послуги**
- ❖ **Митне оформлення вантажів**
- ❖ **Подільська Школа Бізнесу (psb.vn.ua) (комплексні, спеціалізовані та галузеві програми, семінари, тренінги, Кайдзен-семінари)**
- ❖ **Кінопрокат (cinema.vn.ua)**

Вінницька торгово-промислова палата
вул. Соборна, 67, м. Вінниця, Україна, 21050

Тел.: (0432) 530007, факс: (0432) 530006
<http://cci.vn.ua> e-mail: cci-mail@cci.vn.ua

ПРИВАТНЕ ПІДПРИЄМСТВО «ІНСТРУМЕНТ-СЕРВІС»

- ❖ **Виготовляємо** інструмент з природної та синтетичної сировини, полікристалів, кубічного нітриду бору для металообробної, каменеобробної, ювелірної та годинникової промисловостей, а також інструменти для медичних досліджень.
- ❖ **Приймаємо** замовлення на виготовлення продукції згідно ГОСТ, ISO та індивідуальних технічних завдань.
- ❖ **Надаємо** консультації по підборі інструменту згідно технічного процесу замовника.

Наші партнери:

- великі промислові заводи-виробники України, СНД, Західної Європи, США;
- потужні торгові фірми-постачальники;
- приватні виробничі майстерні та підприємства;
- кінцеві споживачі;



21036, м. Вінниця, вул. Максимовича, 12А
тел./факс: (0432) 52-03-82, 53-08-33, 66-21-95
E-mail: stasiukyv@gmail.com
сайт: www.almaz-inst.com.ua



"АЛСИ-ХРОМ" - Ваш надійний професійний партнер у вирішенні аналітичних завдань лабораторій

Провідна українська компанія "АЛСИ-ХРОМ" здійснює постачання та сервісне обслуговування устаткування Agilent Technologies – світового виробника високоточних аналітичних приладів для хімічного аналізу. Для успішної та безперебійної роботи великого парку встановленого обладнання важливе місце в роботі фірми "АЛСИ-ХРОМ" приділяється забезпеченню замовників необхідними запасними частинами та витратними матеріалами.

Компанія має понад двадцятирічний досвід постачань і обслуговування аналітичного обладнання. Поставка та встановлення приладів, навчання персоналу, консультації, інформаційна та методична підтримка, оперативне, якісне вирішення потреб користувачів обладнання аналітичних лабораторій здійснюється в будь-якій точці України.

Висока ефективність роботи приладів неможлива без правильної установки, своєчасної діагностики та періодичного проведення технічного обслуговування. "АЛСИ-ХРОМ" має все необхідне для надання сервісу світового рівня. Сервісна служба компанії об'єднала в собі знання, досвід і професійні знання фахівців найвищої категорії. Всі сервісні інженери "АЛСИ-ХРОМ" проходять регулярне спеціалізоване навчання і стажування на фірмах-виробниках обладнання. Кваліфікація інженерів підтверджена численними сертифікатами та відгуками вдячних замовників.

Досвід і знання фахівців компанії, широкий спектр послуг, світовий рівень сервісної служби "АЛСИ-ХРОМ" забезпечують замовникам гарантію ефективної роботи аналітичного обладнання та вирішення найскладніших аналітичних завдань лабораторій.

Забезпечення успішної роботи та максимальної продуктивності Вашої лабораторії

**АНАЛІТИЧНЕ ОБЛАДНАННЯ.
ВИТРАТНІ МАТЕРІАЛИ. ЗАПАСНІ ЧАСТИНИ.
ПОСТАЧАННЯ. НАВЧАННЯ. СЕРВІС.**

ТОВ "АЛСИ-ХРОМ"
вул. Івана Кудрі, 22/1, офіс 70, м. Київ, 01042
тел.: (44) 521-95-40, факс: (44) 521-95-35
lab@alsichrom.com
www.alsichrom.com

MixLab

СУЧАСНІ РІШЕННЯ ДЛЯ ЛАБОРАТОРІЙ

Українська компанія "МіксЛаб" спеціалізується на поставках лабораторного обладнання, сучасних аналітичних приладів, а також витратних матеріалів та запасних частин до них. Комплексне вирішення завдань контролю якості продукції в хімічних лабораторіях, задоволення запитів користувачів аналітичних приладів є нашим основним завданням.

Компанія "МіксЛаб" має багаторічний досвід поставок і обслуговування різних видів аналітичного обладнання, надає своїм партнерам повний комплекс послуг, що включає:

- допомогу у виборі обладнання, що найбільш точно відповідає необхідним аналітичним завданням лабораторії;
- своєчасну доставку і митне оформлення обладнання;
- поставку запасних частин, і комплектуючих;
- гарантійні зобов'язання, установку і введення обладнання в експлуатацію;
- оперативне сервісне обслуговування;
- навчання персоналу роботи на приладах;
- кваліфіковану інформаційну та консультативну допомогу протягом всього терміну експлуатації обладнання.

Нашими партнерами є провідні світові компанії такі як: **Analytik Jena, VWR International, Biosolve, SiliCycle.**

Analytik Jena (Німеччина): виробництво високоточного аналітичного обладнання для проведення фізико-хімічних досліджень в наукових і виробничих лабораторіях: УФ-Вид спектрофотометри, атомно-абсорбційні спектрофотометри, оптико-емісійні та мас-спектрометри з індуктивно зв'язаною плазмою, елементні аналізатори та аналізатори загального органічного вуглецю.

VWR International (США): провідний світовий виробник та постачальник загальнолабораторного обладнання, витратних матеріалів для лабораторій різного профілю, один з найбільших і найвідоміших дистриб'юторів лабораторної техніки в світі.

Biosolve (Франція): високочисті розчинники для аналітичних лабораторій та виробництва.

SiliCycle (Канада): продукти на основі силікагелю для аналітичних лабораторій та фармвиробництва: селективні сорбенти, колонки для ВЕРХ, пластини для ТШХ, патрони для ТФЕ, набори QuEhERS.

Наша продукція знаходить своє застосування практично у всіх галузях народного господарства:

- контроль якості фармацевтичних препаратів;
- контроль якості харчових продуктів;
- контроль якості продуктів хімічної, нафтопереробної промисловості;
- контроль за станом навколишнього середовища;
- антидопінгові і наркологічні лабораторії;
- лабораторії ветеринарної служби;
- лабораторії санітарно-епідеміологічної служби;
- митні, криміналістичні та лабораторії судово-медичної експертизи;
- науково-дослідні лабораторії та інші.

ТОВ "МіксЛаб"
вул. Підлісна, 1, м. Київ, 03164
тел./факс: (44) 303-98-68

info@mixlab.com.ua

www.mixlab.com.ua

ТОВ «НАУКОВО-ВИРОБНИЧЕ ПІДПРИЄМСТВО «УКРОРГСИНТЕЗ»

ТОВ «Науково-виробниче підприємство «Укроргсинтез» здійснює наступні види діяльності:

- Виробництво лабораторних меблів;
- Виробництво сушильних шаф і стерилізаторів;
- Виробництво реакторів високого тиску;
- Продаж хімічних реактивів та розчинників;
- Продаж лабораторного обладнання;
- Продаж лабораторного скла і тари;
- Аналіз сполук (ЯМР-аналіз, визначення вологи методом Фішера);
- Замовний синтез.

ООО «НВП «Укроргсинтез» займається виробництвом і продажем лабораторних меблів, витяжних шаф, сушильних шаф, сушильних вакуумних шаф, реакторів високого тиску. Також реалізує хімічну продукцію: органічні реактиви, розчинники, розчинники для ВЕРХ, дейтеровані розчинники в кількості від грам до тонн.

ООО «НВП «Укроргсинтез» пропонує більше 2000 найменувань органічних реактивів, а також багатотоннажні кількості розчинників зі складу в Києві або під замовлення.

Компанія є офіційним дистриб'ютором і виконує сервісне обслуговування наступних виробників лабораторного обладнання: ІКА (Німеччина), ILMVAC (Німеччина), Berghof (Німеччина), Daihan (Південна Корея), Macherey Nagel (Німеччина).

Наукове видання

**IV Міжнародна (XIV Українська) наукова конференція
студентів, аспірантів і молодих учених**

**ХІМІЧНІ
ПРОБЛЕМИ
СЬОГОДЕННЯ
(ХПС-2021)**

**ЗБІРНИК ТЕЗ ДОПОВІДЕЙ
(українською, англійською та російською мовами)**

Відповідальний редактор О. М. Шендрик

Комп'ютерна верстка С. В. Жильцова

Підписано до друку 02.03.2021 р.
Формат 60×84/16. Папір офсетний.
Друк цифровий.
Друк. арк. 14,00 Умовн. друк. арк. 13,02
Наклад 100 прим. Зам. № 1728/1

Донецький національний університет імені Василя Стуса
21021, м. Вінниця, вул. 600-річчя, 21.

Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи
до Державного реєстру
серія ДК № 5945 від 15.01.2018 р.

Віддруковано з оригіналів замовника.
ТОВ «ТВОРИ».

Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи
до Державного реєстру видавців, виготовлювачів і розповсюджувачів
видавничої продукції серія ДК № 6188 від 18.05.2018 р.
21027, м. Вінниця, вул. Келецька, 51а, прим. 143.
Тел.: 0 (800) 33-00-90, (096) 97-30-934, (093) 89-13-852, (098) 46-98-043.
e-mail: info@tvoru.com.ua
<http://www.tvoru.com.ua>