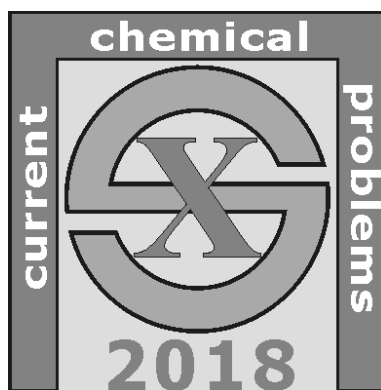


**MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF UKRAINE
NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF UKRAINE
VASYL' STUS DONETSK NATIONAL UNIVERSITY
L. M. LITVINENKO INSTITUTE OF PHYSICAL-ORGANIC
CHEMISTRY AND COAL CHEMISTRY**

CURRENT CHEMICAL PROBLEMS



**I International (XI Ukrainian) scientific conference
for students and young scientists**

BOOK OF ABSTRACTS



By the 100th anniversary of NAS of Ukraine

**March 27–29, 2018
Vinnytsia**

UDC 54(06)
C 95

*Approved by the Academic Council of Vasyl' Stus Donetsk National University
(minutes N 8, 23.02.2018)*

UkrISTEI registration certificate N 89, 14.03.2018

Current chemical problems (CCP-2018): book of abstracts of the I International (XI Ukrainian) scientific conference for students and young scientists, March 27–29, 2018, Vinnytsia / Vasyl' Stus Donetsk National University; editorial board: O. M. Shendrik (editor-in-chief) [et al.]. – Vinnytsia, Nilan-LTD, 2018. – 376 p.

I International (XI Ukrainian) scientific conference for students and young scientists "Current Chemical Problems" (CCP-2018) was held at Vasyl' Stus Donetsk National University on March 27–29, 2018.

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

Conference support:
UkrChemAnalysis Ltd.
Otava Ltd.
"Ukrainian aerosols"
Chemlaborreactive Ltd.
"INSTRUMENT-SERVIS"
"ALSI-Chrom"
"MixLab"
UkrOrgSyntez Ltd.

Editorial board: O. M. Shendrik (ed.-in-ch.)
S. V. Zhyltsova
I. O. Opejda
S. V. Radio
G. M. Rozantsev
O. M. Shved

Editorial board address: 21021, Vinnytsia, vul. 600-richchia, 21, Educational and Scientific Institute of Chemistry of Vasyl' Stus Donetsk National University.

ISBN 978-966-2770-90-2

© Vasyl' Stus DonNU, 2018
© Authors, 2018
© O. M. Shendrik (ed.-in-ch.), 2018
© "Nilan-LTD", 2018

**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



**I Міжнародна (XI Українська) наукова конференція
студентів, аспірантів і молодих учених**

ЗБІРНИК ТЕЗ ДОПОВІДЕЙ



До 100-річчя НАН України

**27–29 березня 2018 р.
м. Вінниця**

*Затверджено Вченою радою Донецького національного університету
імені Василя Стуса (протокол № 8 від 23.02.2018 р.)
Посвідчення про реєстрацію УкрІНТЕІ № 89 від 14.03.2018 р.*

Хімічні проблеми сьогодення (ХПС-2018): збірник тез доповідей І Міжнародної (ХІ Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених, 27–29 березня 2018 р., м. Вінниця / Донецький національний університет імені Василя Стуса; редколегія: О. М. Шендрик (відп. ред.) [та ін.]. – Вінниця, ТОВ "Нілан-ЛТД", 2018. – 376 с.

З 27 по 29 березня 2018 року в Донецькому національному університеті імені Василя Стуса відбулася І Міжнародна (ХІ Українська) наукова конференція студентів, аспірантів і молодих учених «Хімічні проблеми сьогодення» (ХПС-2018).

У збірнику опубліковані результати досліджень, які виконані в навчальних закладах та наукових установах України, Республіки Білорусь, Казахстану, Узбекистану, Азербайджану, Російської Федерації, Польщі, Литви, Словачії, Словенії, Іспанії в галузях аналітичної, квантової, неорганічної, органічної, фізичної, медичної та фармацевтичної хімії, біохімії, хімічної освіти, хімічної інженерії, хімії полімерів і композитів.

Підтримка конференції:

ТОВ «УкрХімАналіз»
Науково-сервісна фірма «ОТАВА»
«Украинские аэрозоли»
ТОВ «Хімлаборреактив»
Приватне підприємство «Інструмент-Сервіс»
ТОВ «АЛСІ-ХРОМ»
ТОВ «МіксЛаб»
ТОВ «НВП «Укроргсинтез»

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

С. В. Жильцова
Й. О. Опейда
С. В. Радіо
Г. М. Розанцев
О. М. Швед

Адреса редколегії: 21021, м. Вінниця, вул. 600-річчя, 21, Навчально-науковий інститут хімії Донецького національного університету імені Василя Стуса.

© ДонНУ імені Василя Стуса, 2018

© Колектив авторів, 2018

© О. М. Шендрик (відп. ред.), 2018

© ТОВ «Нілан-ЛТД», 2018

ISBN 978-966-2770-90-2

PROGRAMME COMMITTEE

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

Vice-chairman, scientific secretary: *Dr. Svitlana Zhyltsova*, 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

Dr. Olga Kushch, Department of Physical Chemistry of Fossil Fuels, L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic Chemistry and Coal Chemistry NAS of Ukraine, Lviv, 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

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, UK

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

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

LOCAL ORGANIZING COMMITTEE

Oleksandr Kalynskyi, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine
Andrii Kapitanchuk, 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
Anastasia Tkach, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine
Olexandr Tsyapalo, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine
Oleg Usachov, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine
Kseniia Yutilova, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine
Dr. Svitlana Zhyltsova, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine
Olha Zosenko, Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

**ANALYTICAL CHEMISTRY /
АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ**

**A NEW METHOD OF QUANTITATIVE DESCRIPTION OF SOLID ELECTRODES
VOLTAMMOGRAMS**

Boguslavskiy V. B., Galimhanova R. V., Maksyutova E. I., Sidelnikov A. V.

Bashkir State University, Ufa

boguslavskiy97@yandex.ru

The phase boundary surface between electrode/solution is under the attention of many researches, working in the electroanalytical chemistry. This surface serves as a specific microreactor in which many temporal and electrochemical processes being under the controlled conditions give useful information about the electrode material, structure of the surface, about the components of the solution reacting in the depth of the solute and near the DEL.

New materials and innovation technologies related to formation of the structural surfaces with the usage of different composites, supramolecular structures etc. require more informative and sophisticated methods for the various electrodes-sensors creation and taking into account other factors that can modify the given electrode in the stage of its production or in the process of its reaction with components of solution under investigation. From one side, a researcher has a variety of different sensitive equipment however, from another side for the mathematical treatment of the data obtained and construction of the informative and effective models, new approaches are necessary. The most vital problem in this attention is related to description and quantitative characterization of the electrode surface in its continuous interaction with solution components. This problem is tightly related to creation of new generation of multisensor systems, which enable to detect all temporal changing in the process of its interaction with the solute under investigation.

When the number of the measurements are rather small there are mathematical methods that take into account the drift of the detected signal in time while for the multi-cycling sensor (the number of the measurement cycles are large, $M \geq 1000$) the mathematical methods related to quantitative monitoring of these sensors in time are not well developed. In this case, the electrode surface is changed significantly and can reflect the different stages of its electrochemical transformations.

The saying above put forward a problem related to new and general mathematical method creation that can control quantitatively the evolution state of the electrode surface and expresses it in terms of the finite number of the given parameters. This method based on the usage of the discrete geometrical invariants (DGI) developed in this paper.

In this paper, we apply the statistics of the fractional moments (SFM) and discrete geometrical sets/invariants (DGI) for explain of the temporal evolution of the electrochemical background. For analysis of this phenomenon, we apply the internal correlation factor (ICF) and proved that integral curves expressed in the form of voltammograms (VAGs) are more sensitive in comparison with their derivatives. For analysis of the VAGs (integral curves), we propose the set of the quantitative parameters that form the invariant DGI curves of the second and the fourth orders, correspondingly. The method of their calculation based on the generalization of the well-known Pythagor's theorem is described. The quantitative parameters that determine these DGI allow monitoring the background of the electrochemical solution covering the period of 1-1000 measurements for two types of electrode (Pt and C) and notice the specific peculiarities that characterize each electrode material.

*This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research,
project № 17-43-020232 r-Povolzh'ye-a.*

ВИЗНАЧЕННЯ ПЛЮМБУМУ В НАФТОПРОДУКТАХ МЕТОДОМ ААС

Бондар Д. К.

ВЦ ПАТ «Укртатнафта»

bondardk@gmail.com

Вступ. В нафтопереробці Плюмбум є важливим навіть в слідових кількостях оскільки викликає отруєння каталізаторів. За цим методом було визначено вміст свинцю в продуктах первинної переробки нафти в діапазоні від 0 до 120 мкг/л.

Матеріали і методи. Для визначення вмісту Плюмбуму методом атомно-абсорбційної спектроскопії використовувались графітові кювети з пін-платформною. Дослідження проводили на приладі ContrAA 700 фірми «Analytical Jena» з графітовим атомізатором з ксеноновою лампою та монохроматором високого розділення. Для стабілізації довжини хвилі в приладі виконується безперервне коригування по лінії неону. Вміст Плюмбуму визначається вимірюванням інтегральної площі піку поглинання при 283,3 нм. Як газ-носіє був застосований аргон чистотою 99,996 %.

Приготування робочих стандартних розчинів. Під час аналізу використовувались реактиви марки Ч.Д.А. З основного стандартного розчину Pb з концентрацією 1000 мг/л у маслі приготували калібрувальний розчин Плюмбуму з концентрацією 150 мг/л у ксилолі. З нього в автоматичному режимі з додаванням паладій-магнієвого модифікатора за програмою була приготовлена серія калібрувальних стандартних розчинів Pb у ксилолі з концентрацією 0; 30; 60, 90; 120 мкг/л, які були проаналізовані згідно параметрів, наведених у Таблиці 1. Виходячи з отриманих даних було побудовано графік залежності інтенсивності інтегрального поглинання робочих стандартних розчинів від вмісту Плюмбуму в мкг/л.

Таблиця 1. Параметри атомізатора для приладу ContrAA700

№ стадії	Температура (°C)	Час (с)	Тип газу	Витрати газу (л/мін)	Зчитування
1	40	2,0	Аргон	3,0	Ні
2	100	10,0	Аргон	3,0	Ні
3	330	13,0	Аргон	3,0	Ні
4	1000	9,0	Ні	3,0	Ні
5	2600	1,0	Ні	0,0	Да
6	2600	2,0	Аргон	0,0	Да
7	2600	2,0	Аргон	3,0	Ні
8	40	16,0	Аргон	3,0	Ні

Пробопідготовка та аналіз. Пробу нафтопродукту перемішали протягом 5 хвилин та відфільтрували для видалення механічних домішок. Автосамплер змішує 10 мкл нафтопродуктів та 4 мкл Pd-Mg модифікатора та вводить у графітову кювету для аналізу за наведеною температурною програмою. Середнє арифметичне трьох вимірів аналіту береться як остаточне значення. З графіку поглинання серії стандартів від концентрації свинцю в мкг/л визначено концентрацію Плюмбуму в пробі.

Таблиця 2. Вміст Плюмбуму за методом ААС та гідридної генерації

Досліджувана проба	Вміст Плюмбуму, мкг/л	
	ААС	гідридної генерації
Бензин А	7	9
Керосин	32	34

Результати. Наведені в Таблиці 2 дані визначення вмісту Pb за методом ААС у графітовій печі та гідридної генерації доводить їх кореляцію та взаємозамінність.

Висновки. Показана можливість визначення вмісту Плюмбуму в органічному розчиннику. Результати отримані за даною методикою співвідносяться з даними отриманими при аналізі у водному розчині.

ХЕМОСЕНСОР/СОРБЕНТ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ РУТЕНІЮ(IV)

*Бондаренко М. А., Худякова С. М.*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара
khudyakova@i.ua

Визначення мікро- та субмікрокількостей йонів Ru в технологічних розчинах представляє труднощі та потребує попереднього концентрування. До початку нашого дослідження було відомо, що 3-метил-2,6-димеркапто-1,4-тіопірон (МДТ) у присутності неіонної повернево-активної речовини (ПАР) – оксиетильованих похідних алкілфенолів (ОП-7 або ОП-10) відновлює Ru(IV) до Ru(III).

У даній роботі вперше встановлено та описано комплексоутворення Ru(IV) з ФДТ за наявності ОП-7 або ЛС. Описано особливості модифікації хіміко-аналітичних властивостей 3-феніл-2,6-димеркапто-1,4-тіопірону (ФДТ) за допомогою аніонної ПАР – натрій лаурилсульфату (ЛС) і на цій основі розроблено нові сорбенти з використанням пінополіуретану (ППУ), МДТ або ФДТ за наявності ОП-7 та ЛС. Встановлено оптимальні умови сорбції реагентів на ППУ: кислотність середовища, молярне співвідношення компонентів-модифікаторів та час сорбції. Отримано сорбенти з різною сорбційною ємністю за реагентом. При рН 3 та за наявності ОП-7 у розчині ФДТ поверхня ППУ забарвлювалась у жовтий колір, а після сорбції адукту ФДТ–ЛС на фоні 3 М НСІ – у жовто-помаранчевий. З метою отримання кращого аналітичного ефекту для наступного визначення Ru(IV) було оптимізовано умови модифікації ППУ – концентрацію реагента у розчині та масу наважки вихідної матриці. При цьому отримано сорбенти з різною сорбційною ємністю за ФДТ або МДТ. У ході сорбції Ru(IV) сорбенти змінювали свій колір в залежності від концентрації даного йону у досліджуваному розчині і, таким чином, виступали у ролі специфічних хемосенсорів. Зміну забарвлення можна було відмітити як візуально, так і оцінити у форматі RGB.

Після сорбції Ru(IV) на ППУ з іммобілізованим ФДТ у присутності ОП-7 колір сорбенту змінювався з жовтого на жовто-коричневий. У даному випадку аналіт прокачували за допомогою шприця через зразок ППУ масою 5 мг. В інтервалі концентрацій 0.1–2.6 мкг/мл в об'ємі проби 5 мл на фоні 2 М НСІ+4 М NaCl практично 100 % Ru(IV) вилучається на ППУ за комплексоутворюючим механізмом. За цих умов залежність інтенсивності G-каналу описується прямою, рівняння якої має вид ($x = c$, мкг/мл): $y = -(27.01 \pm 0.35)x + (153.22 \pm 1.26)$, $R^2 = 0.9947$; межа виявлення ($c_{\min.}$), розрахована за 3s-критерієм, дорівнює 27 нг/мл.

У ході інтенсивного струшування 10 мл розчину Ru(IV) з таблеткою ППУ (10 мг), що містила адукт ФДТ–ЛС, остання змінювала своє забарвлення з жовто-помаранчевого на червоно-коричнєве. В інтервалі 0.005–0.10 мкг/мл рівняння градуального графіку для визначення Ru(IV) має вид ($x = c$, мкг/мл): $y = -898.59 x + 125.26$ ($R^2 = 0.9958$); $c_{\min.} = 0.3$ нг/мл.

Встановлено, що у випадку сорбенту з іммобілізованим адуктом МДТ–ЛС в процесі гетерофазної реакції відбувається відновлення Ru(IV) до Ru(III) подібно до водних розчинів. При цьому зі збільшенням концентрації Ru(IV) забарвлення зразків ППУ змінювалось від насиченого помаранчевого до світло-коричневого. В інтервалі 0.005 – 0.10 мкг/мл Ru(IV) в об'ємі проби 10 мл залежність інтенсивності G-каналу описується рівнянням: $y = (1368 \pm 160.52)x + (101.75 \pm 4.61)$, $R^2 = 0.9732$; $c_{\min.} = 0.4$ нг/мл.

Розроблено комплекс експресних, простих та дешевих методик для візуального тестового та кольорометричного визначення Ru(IV) у водних розчинах, правильність яких перевірено в ході визначення даного елементу в напівпровідникових сплавах з атестованим вмістом компонентів.

МАСКА ДЛЯ ЖИРНОЇ ШКІРИ ОБЛИЧЧЯ*Бухал К. А., Волнянська О. В.*

ДВНЗ “Український державний хіміко-технологічний університет”

ksenia.buxal9@gmail.com

Косметичний догляд – це раціональне застосування косметичних препаратів і процедур, які здійснюють профілактичну, лікувальну і декоративну дію для досягнення позитивного ефекту, при якому нормалізуються і активізуються фізіологічні процеси шкірного покриву.

Маска для обличчя – засіб для догляду за шкірою, який передбачає нанесення на шкіру певний склад речовин, заради досягнення косметичного або лікувального ефекту. Маски сприяють поліпшенню стану шкіри, зволожують і очищають її, прискорюють регенерацію і розгладжують зморшки.

Перші проблеми у власниць жирної шкіри обличчя з’являються вже в підлітковому віці і, як правило, виражаються в появі вугрів, які є наслідком закупорки і запалення пір. Згодом багатьом представницям слабкої статі вдається благополучно позбутися від вугрової висипки, однак проблема жирної шкіри залишається невирішеною. Виражається вона не тільки підвищеною активністю сальних залоз, завдяки чому епідерміс постійно виглядає лискучим, але і в розширених порах, які постійно забиваються пилом і брудом. Саме тому власниці жирної шкіри постійно змушені боротися з прищами і запальними процесами, а також набагато частіше користуватися скрабами, щоб видалити з епідермісу зайвий жир, який також забиває пори, утворюючи пробки, іменовані комедонами.

Втім, відмінним помічником у догляді за жирною шкірою є спеціальні маски, які можна легко приготувати в домашніх умовах. Їхня задача зводиться не тільки до того, щоб нормалізувати роботу сальних залоз і звільнити особу від постійного жирного блиску. У тих, хто регулярно використовує подібні маски, з часом помітно зменшуються пори на шкірі, структура якої стає більш гладкою і рівною.

В якості об’єкту дослідження нами була обрана маска для жирної шкіри обличчя. Метою роботи є розробка рецептури та вивчення існуючих базових рецептур масок для жирної шкіри обличчя та провести аналітичний контроль якості розробленого зразка та порівняти отримані результати з нормами, які наведені в ГОСТах.

Поставленою задачею є детальне вивчення складових компонентів промислових зразків маски для жирної шкіри обличчя; провести повний покомпонентний аналіз для оцінки безпеки косметичного виробу та можливого впливу на організм людини.

До складу базової рецептури маски входять такі компоненти: вода, каолін, бентоніт, тальк, парафін, трагакант, вівсяна мука. В рецептурі були замінені такі компоненти: бентоніт на магній оксид, так як він краще очищує шкіру, не закупорює пори та не викликає алергічні реакції, вода – на гідролат, адже гідролат містить вітаміни необхідні для шкіри. Замість тальку краще використати борну кислоту, яка не сприяє появі запальних процесів, а замість парафіну – масло виноградних кісточок, так як воно більш корисне для шкіри. Для в’язучої дії додали алюмокалієві галуни, а для антисептичної та протизапальної дії – буру. В якості консерванту використали Euxyl PE 9010, який широко використовується в косметичній промисловості завдяки своїй високій ефективності.

Розроблена рецептура маски є ефективним засобом по догляді за жирною шкірою обличчя, яка направлена на виконання конкретної дії. З використанням запропонованих компонентів, вона сприятиме очищенню та підсушуванню жирної шкіри. Буде звужувати пори та вбирати в себе надлишок шкірного сала.

ОДНОЧАСНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ВМІСТУ СУМІШІ СИНТЕТИЧНИХ БАРВНИКІВ E124 І E110 МЕТОДОМ ДОБАВОК "H-POINT STANDARD"

*Волобой А. О., Сидорова Л. П.*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара
voloboy.alin@uayandex.ru

Синтетичні харчові барвники – це органічні сполуки, що не зустрічаються в природі і не ідентифіковані до теперішнього часу в натуральних харчових продуктах, тобто штучно створені. Штучні барвники мають значні технологічні переваги у порівнянні з більшістю натуральних барвників. Останнім часом виникли припущення, що деякі штучні барвники можуть завдати шкоди здоров'ю людини. Так як, вони можуть відновлюватись до токсичних сполук, які є небезпечними. Однак спектри поглинання багатьох барвників перекриваються, і часто потрібні тривалі процедури їх поділу. Тому зростає необхідність визначення харчових барвників при спільній їх присутності.

В даній роботі для визначення вмісту барвників E110 та E124 в суміші без попереднього розподілу використовували метод H-point standard addition (HPSAM). Визначення за його допомогою полягає у вимірюванні оптичної густини суміші барвників, при якому концентрація одного компонента є сталою, а іншого змінюється. Цей метод був створений для дослідження двох спектрів аналізованих речовин, які сильно перекриваються.

Обробка результатів за методом HPSAM проводили таким чином. На спектрі поглинання суміші E110-E124 вибрали дві довжини хвиль, при однаковій оптичній густині, або біля кожної з яких спостерігається зміна світлопоглинання аналіту, а світлопоглинання домішкового компонента залишається постійним. Було обрано такі пари довжин хвиль: 446 і 521 нм (для першої серії розчинів: E110 – аналіт, E124 – домішковий компонент), й 470 і 542 нм (для другої серії розчинів E124 – аналіт, E110 – домішковий компонент). Вимірювання проводилися на спектрофотометрі СФ-46 у кюветі з $l=1\text{ см}$, розчин порівняння дистильована вода.

Результати визначення барвників E110 та E124 у суміші методом H-point standard addition method: для першого випадку (рис. 1) знайдено 0,59 мкг/мл, для другого випадку (рис. 2) знайдено 1,19 мкг/мл досліджуваних барвників.

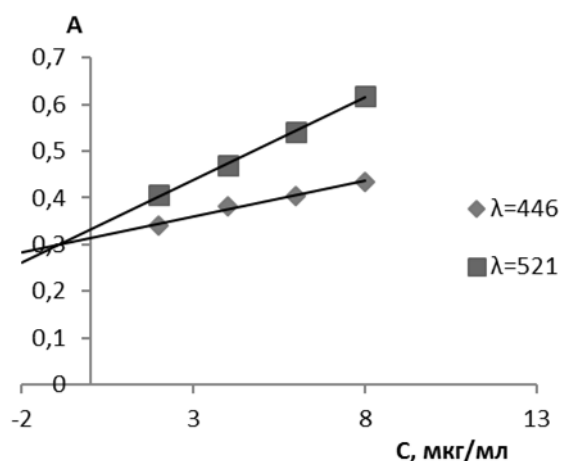


Рис. 1. H-point standard addition method для одночасного визначення фіксованих кількостей E110 і різних кількостей E124 ($C_{E110} = 10$ мкг/мл)

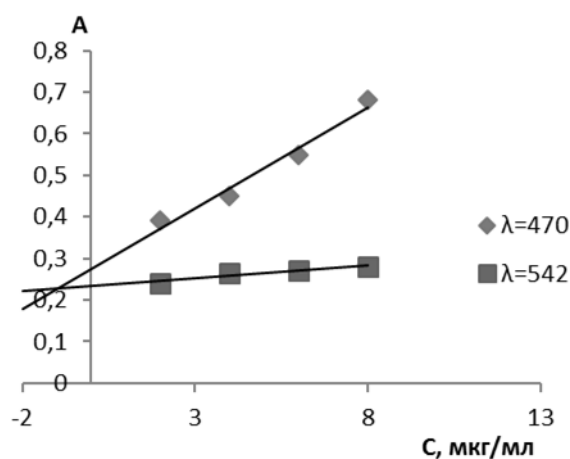


Рис. 2. H-point standard addition method для одночасного визначення фіксованих кількостей E124 і різних кількостей E110 ($C_{E124} = 10$ мкг/мл)

**МУЛЬТИСЕНСОРНАЯ СИСТЕМА ТИПА «ЭЛЕКТРОННЫЙ ЯЗЫК»
НА ОСНОВЕ МНОЖЕСТВЕННОСТИ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИХ
ВРЕМЕННЫХ РЯДОВ**

Галимханова Р. В., Богуславский В. Б., Максютова Э. И., Сидельников А. В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа

reggal1996@mail.ru

Современные инструментальные методы аналитической химии имеют широкие возможности при решении проблем качественного и количественного анализа большого круга различных по природе соединений. Разработка хемометрических методов обработки различных сигналов, в том числе многомерных данных, в последние десятилетия способствовало развитию и методом мультисенсорного химического анализа, которые непосредственно связаны с необходимостью обработки больших массивов данных. Так, например, разрабатываются мультисенсорные системы типа «электронный язык» («электронный нос»).

Мультисенсорная система – это сочетание массива электродов и компьютерной программы обработки многомерных данных, которые позволяют идентифицировать одновременно несколько компонентов при их совместном присутствии в анализируемом растворе или решать более сложные задачи непараметрической оценки свойств растворов без детального количественного анализа (например, оценки вкуса, запаха, выявления фальсификатов и т. д.).

В данной работе была предложена мультисенсорная система на основе электрохимической активации сенсоров и обобщенного метода главных компонент. Сенсорная система не требует использования высокоселективных сенсоров, в основе ее функционирования лежит эффект «памяти электродной поверхности», позволяющий обучать датчик распознаванию многокомпонентных растворов, устанавливать схожесть и различие между сложными по составу растворами. Предложенные в работе новые математические подходы к обработке вольтамперометрических данных показали возможность повышения чувствительности и специфичности сенсоров при распознавании различных БАВ, в том числе и их изомеров.

Была создана мультисенсорная система на основе угольных электродов, функционирующих в непрерывных условиях регистрации вольтамперометрических данных для распознавания лекарственных средств; на примере изомеров триптофана подтверждена высокая чувствительность и специфичность предложенной системы отличать близкие по природе биологически активные вещества.

Мультисенсорная система на основе платинового и графитового электродов апробирована при распознавании лекарственных препаратов различных производителей: метионина (N- и S-содержащая аминокислота) и фолиевой кислоты (витамин B9). При 500 циклах активации сенсоры способны распознавать растворы лекарственных средств, в которых формировалась их чувствительность; получены визуальные «отпечатки» природы лекарственных средств, позволяющие отличить лекарства друг от друга по вольтамперометрическим данным.

Таким образом, предложенные подходы уникальны к формированию многомерных аналитических сигналов: изначально неселективные сенсорные системы в ходе многократной активации становятся чувствительными и специфичными к раствору, в котором происходит "обучение" "электронного языка".

Работа выполнена при поддержке РФФИ: грант №17–43–020232 р-Поволжье-а.

РОЗРАХУНКИ ПАРАМЕТРІВ ГІДРОФОБНОСТІ ІЗОМЕРІВ БЕНЗОПІРЕНУ ДЛЯ ПОШУКУ ОПТИМАЛЬНИХ УМОВ ВИМІРЮВАННЯ ЇХ ВМІСТУ В АТМОСФЕРНІЙ ВОДІ

Дерун Ю. А., Грибова Н. Ю., Нестерова Л. О., Кротенко В. В.

Національний університет біоресурсів і природокористування України
olenakhyzhan@gmail.com

Речовини техногенного походження (полютанти) забруднюють наколишне середовище, але в першу чергу – повітря та атмосферну воду. Атмосферні осаді, наприклад сніг, який створює сніговий покрив і охороняє ґрунт та озимі посіви від промерзання, адсорбує та концентрує до відлиги полютанти. Відомий полютант II класу небезпеки бензо(а)пірен (БаП), через руйнівний вплив на навколишнє середовище та організм людини привернув увагу науковців майже двісті п'ятдесят років тому назад. Разом з тим, через відсутність інструментальних методів контролю, відсутність інформації щодо хімічного складу, вивчати його було складно. В 1952 році відкриття та застосування ефекту Е.В. Шпольського дозволило вивчити як вивільнюються в навколишнє середовище не лише БаП, а і інші поліциклічні ароматичні вуглеводні (ПАВ). Основним джерелом ПАВ сьогодні є процеси згоряння органічних матеріалів техногенного походження. Сніг, що тривалий час перебуває уздовж трас, набуває темного кольору, зумовленого сорбцією продуктів згоряння паливно-мастильних матеріалів. Вимірювання вмісту канцерогену бензо(а)пірену проводиться, на вимогу Сан Пин 2.1.4.1116-02 лише в питній воді першої та вищої категорії на рівні 0,005 мкг/л та 0,001 мкг/л відповідно. Норми щодо забруднення цим канцерогеном поверхневих та атмосферних вод не встановлено. Враховуючи зарубіжний досвід сільського господарства, орієнтованого на збереження і відновлення природних ресурсів задля виживання людства, виникає потреба в нормуванні та лабораторному контролі канцерогенних полютантів, зокрема ізомерів бензопірену.

Бензопірен в навколишньому середовищі, представлений двома структурними ізомерами. Для бензо(а)пірену встановлена канцерогенна активність, а бензо(е)пірен (БеП) є високотоксичним, але не є канцерогеном. Токсикологічна і канцерогенна дія індивідуальних речовин збільшується в їх сумішах. Це говорить про те, що в контролі полютантов необхідно виявляти не тільки канцероген БаП, але і речовини, які проявляючи токсикологічне дію, знижують захисну функцію організму і підсилюють канцерогенну активність бензо(а)пірену. До таких речовин може відноситься і його ізомер бензо(е)пірен.

Метою цієї роботи стало визначення найбільш ефективних умов вилучення та хроматографічного аналізу в атмосферній воді ізомерів бензопірену, створення та апробація методики лабораторного контролю вмісту БеП та БаП в атмосферній воді (сніг).

У роботі використовували модельні системи на основі деіонізованої води і зразки снігу, відібрані поблизу трас і автозаправних станцій, а також зразки снігу, відібрані в сільській місцевості на відстані 50 м від траси. Зразки снігу були переведені при кімнатній температурі в талу воду, яка досліджувалася після термостатування (20 °C). Вимірювання вмісту ізомерів бензопірену проведено методом рідинної хроматографії з ультрафіолетовим детектором.

Розраховано значення гідрофобності молекул ізомерів бензопірену. Параметри гідрофобності було застосовано в роботі для пошуку оптимальних умов екстракційного вилучення з атмосферної води ізомерів бензопірену та хроматографічного розділення бензо(е)пірену і бензо(а)пірену. Встановлено оптимальні умови лабораторного контролю ізомерів бензопірену в атмосферній воді (сніг).

**РОЗРОБКА МЕТОДИКИ КІЛЬКІСНОГО СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНОГО
ВИЗНАЧЕННЯ МЕТОПРОЛОЛУ ТАРТРАТУ***Донченко А. О., Васюк С. О.*Запорізький державний медичний університет
donchenko130791@gmail.com

Серцево-судинні захворювання є одними із найбільш поширених неінфекційних захворювань в багатьох європейських країнах. Впродовж останніх років смертність від хвороб системи кровообігу значно знизилася, однак вони залишаються основною причиною раптової смерті в Україні. У сучасній кардіологічній практиці присутня значна кількість медикаментозних препаратів, що довели свою ефективність як у великих рандомізованих дослідженнях, так і в рутинній практиці мільйонів лікарів у всьому світі. З метою покращення якості лікування фахівцями проводиться розробка нових лікарських засобів. З'являються генеричні препарати, а отже, виникає необхідність розробки сучасних методів аналізу. Саме спектрофотометричний метод є одним з найбільш широко використовуваних, економічних та доступних методів фармацевтичного аналізу для більшості лабораторій контролю якості.

Тому метою нашої роботи стала розробка спектрофотометричної методики кількісного визначення метопрололу тартрату у субстанції та лікарських формах на основі реакції з 2,3-дихлор-1,4-нафтохіноном, який є перспективним та доступним органічним кольорореагентом.

В процесі дослідження підібрані оптимальні умови проведення спектрофотометричного аналізу. Експериментально встановлено, що метопрололу тартрат реагує з 2,3-дихлор-1,4-нафтохіноном при температурі 95 °С у середовищі ДМФА з утворенням забарвленого продукту з максимумом світлопоглинання при 493 нм. Підпорядкування закону Бера перебуває у межах концентрацій 18,00–28,00 мг/100 мл. Значення межі виявлення становить 26,78 мкг/мл.

На підставі отриманих даних розроблено спектрофотометричну методику кількісного визначення метопрололу тартрату, яка успішно застосована для аналізу таких лікарських форм як «Метопролол 50 мг» (ПАТ «Київмедпрепарат», Україна) та «Метопрололу тартрат 50 мг» (ПАТ «Фармак», Україна). Валідацію розробленої методики проведено відповідно до вимог ДФУ, згідно стандартизованої процедури валідації методом стандарту. Встановлено основні валідаційні характеристики, а саме, лінійність, прецизійність, правильність, робастність та діапазон застосування.

Розроблена методика є доступною, простою у виконанні та характеризується прийнятною відтворюваністю в умовах лабораторії, тому може бути рекомендована для аналізу препаратів метопрололу тартрату в лабораторіях Державних служб з лікарських засобів та ВТК хіміко-фармацевтичних підприємств.

ЕКСПРЕС-ВИЗНАЧЕННЯ БЕТАЇНУ ТА ЙОГО ПОХІДНИХ ЗА ДОПОМОГОЮ ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНИХ СЕНСОРІВ

Дорошенко Р. Є., Мироняк М. О., Ніколенко М. В.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет», м. Дніпро
mari_mir@i.ua

Сучасні тенденції розвитку косметичної промисловості та еволюція споживчої думки з кожним роком ставлять все вищі вимоги до якості та безпеки косметичних засобів. Проте орієнтація вітчизняних виробників на масовий ринок ставить жорстке обмеження на використання вартісних компонентів. Чи не єдиним шляхом вирішення подібного протиріччя є використання недорогих, але багатофункціональних компонентів – наприклад, бетаїну та його поверхнево-активних похідних. Ці речовини є не тільки синергістами популярних дешевих сурфактантів, а й виступають в ролі солюбілізаторів інших активних речовин та чинять позитивний вплив на шкіру людини.

Бетаїн (триметилгліцин) широко використовується в косметичній промисловості завдяки своїм зволожуючим, пом'якшуючим, стабілізуючим властивостям, піноутворюючій здатності. Окрім того має властивості підсилювати пінні властивості поверхнево-активних речовин – збільшувати об'єм піни та її стабільність та при цьому значно нейтралізувати подразнюючу дію інших поверхнево-активних речовин (ПАР).

На відміну від бетаїну, який має досить незначні піноутворюючі властивості, його поверхнево-активні похідні (наприклад, кокамідопропілбетаїн) є досить сильними сурфактантами та завдяки своїй амфіфільній природі можуть проявляти властивості як аніонних, так і катіонних ПАР та не чинити подразнюючої дії на шкіру та слизові оболонки. Тому ці речовини затребувані для якісних пінних композицій, зокрема засобів для чутливої дитячої шкіри.

Враховуючи широку галузь застосування цих речовин, виникає необхідність у простих та експресних методиках визначення їх кількісного вмісту в різних типах косметичної продукції. Потенціометричні методики з використанням сенсорів, чутливих до речовини, що визначається, можуть забезпечити необхідну простоту та експресність аналізу при збереженні достатніх метрологічних характеристик.

Було проведено експериментальні дослідження з різними типами гетерополікислот, за результатами яких в якості протиіону для отримання іонного асоціату з бетаїном та кокамідопропілбетаїном було обрано аніон 12-молібдофосфатної гетерополікислоти (МФК). Отримані іонні асоціати є малорозчинними речовинами, тому можливим є їх використання в якості електродноактивних речовин для пластифікованих мембран потенціометричних сенсорів, оборотних до відповідних похідних бетаїну.

Експериментальне дослідження впливу різних чинників на електродні характеристики мембран розроблених потенціометричних сенсорів дозволило обрати оптимальні умови для роботи сенсора: кислотність розчину, що досліджується, природа розчинника-пластифікатора мембрани та іонного асоціату, кількісний вміст електродноактивної речовини в мембрані.

Подальші дослідження будуть спрямовані на ґрунтовне дослідження селективності отриманих потенціометричних сенсорів в присутності різних заважаючих речовин, що також можуть входити до складу промислової продукції та негативно впливати на результати визначення вмісту бетаїну та його похідних.

Розроблені сенсори планується апробувати на зразках різних типів косметичної продукції з метою вдосконалення етапу пробопідготовки, що дозволить суттєво скоротити час аналізу із збереженням достатніх метрологічних характеристик.

ФІЗИЧНИЙ ВПЛИВ НА СТАДІЇ ПРОБОПІДГОТОВКИ РОСЛИННИХ ЗРАЗКІВ ДЛЯ АТОМНО-АБСОРБЦІЙНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ВАЖКИХ МЕТАЛІВ

Дробот В. Є., Смітюк Н. М.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара
drobot@cf.dnu.dp.ua

Відомо, що багато часу в аналізі витрачається на пробопідготовку. Сучасне аналітичне обладнання передбачає високу швидкість виконання вимірювань, тому потрібно скорочення часу на підготовку проби до аналізу. Прискорити процес пробопідготовки можна за рахунок використання різних фізичних полів, зокрема ультразвукового (УЗ) та мікрохвильового (МХВ) впливу

Проведено кислотну мінералізацію рослинних зразків: сої, пшениці та кукурудзи розчином хлоридної кислоти (1:1) при дії різних фізичних полів (ультразвукового та мікрохвильового випромінювання). Проби обробляли ультразвуком протягом 15 хв за допомогою ультразвукового диспергатора УЗДН-1 з частотою 22 кГц та інтенсивністю 3,28 Вт/см² та мікрохвильовим випромінюванням протягом 4 хв в мікрохвильовій пічі Lifetec з потужністю 160-800 Вт та частотою 2450 МГц. Вміст металів визначали атомно-абсорбційним методом в полум'ї ацетилен-повітря на спектрофотометрі С-115 ПКС за градувальник графіком та методом добавок. Результати визначення не містять систематичної похибки та мають високу відтворюваність (табл.).

Таблиця. Вміст важких металів у мінералізатах при використанні фізичного впливу на стадії мінералізації

Методика	Вміст важких металів, мг/кг ($\cdot 10^{-1}$ мг/кг)				
Соя					
	Ni	Pb	Cu	Mn	Fe*
УЗ	1,92	0,00	8,87	15,24	14,54
МХВ	10,25	18,19	19,60	26,75	27,03
Пшениця					
УЗ	2,68	0,00	6,73	25,84	13,01
МХВ	5,47	13,64	10,09	33,39	14,74
Кукурудза					
УЗ	1,92	0,00	4,59	3,34	7,65
МХВ	5,47	13,64	8,07	7,52	9,42

Визначено, що мікрохвильове розкладання порівняно з ультразвуковим скорочує час пробопідготовки в тричі та збільшує ступінь вилучення важких металів майже у 2 рази. Методика ультразвукового розкладання не ефективна для визначення вмісту Плюмбуму у всіх зразках агропромислових культур.

VOLTAMMETRIC SENSORS BASED ON A POLYELECTROLYTE COMPLEX AND CYCLODEXTRINS FOR THE RECOGNITION OF ENANTIOMERS OF METHIONINE

Dubrovsky D. I., Zilberg R. A., Kabirova L. R., Habletdinova A. I.
Bashkir State University, Ufa
du315@mail.ru

As is known, only one of the enantiomers in medicines is biologically active, so the demand for enantiomerically pure preparations is constantly increasing. There are a number of methods for the separation and recognition of enantiomers, such as HPLC, capillary electrophoresis, etc. However, these methods require expensive equipment and considerable time for analysis. An alternative is the voltammetric enantioselective sensors.

Methionine is an essential amino acid and component of proteins, a precursor of a number of biologically active compounds that participates in many biochemical processes. The possibility of selective concentration of methionine enantiomers (Met) on a modified glassy carbon electrode (GCE) was studied.

The modifier was a polyelectrolyte complex of chitosan and chitosan succinamide with α -, β - and γ -cyclodextrin (CS-SCS-CD). The films of these complexes are stable in aqueous solutions and their properties do not change for a long time. Under conditions of cyclic and differential-pulse voltammetry, it was shown that, the peaks on voltammograms for the L-enantiomer of methionine were higher than for D-methionine, which indicated selective concentration at the electrode. Figure shows a graphical diagram of the modification of the GCE/ CS-SCS-CD and performing the analysis.

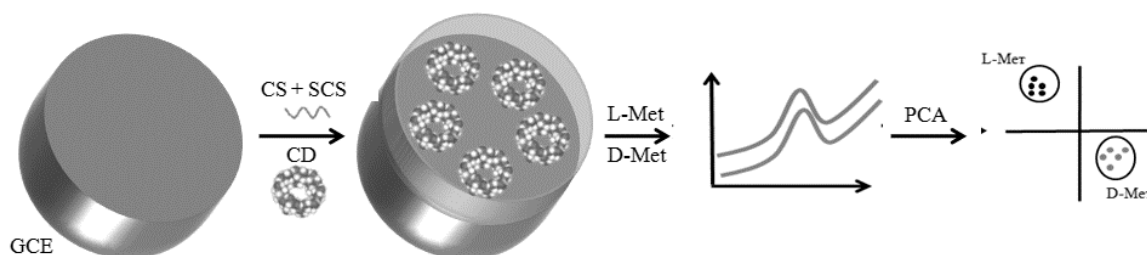


Fig. Graphical scheme for modifying the GCE/CS-SCS-CD and performing the analysis

The analytical characteristics of the proposed electrodes, the conditions for recording voltammograms and applying composites were studied. Cyclic and differential-pulse voltammograms obtained on the GCE modified by a polyelectrolyte complex of CS-SCS-CD in aqueous solutions of L- and D-methionine were processed using the chemometric method-principal component analysis. It was revealed that using a multisensory system based on three electrodes, the percentage of enantiomers recognition increased. Moreover, the proposed method of concentration has been successfully tested on real samples of pharmaceutical preparations and human urine.

This work was supported by the Russian Science Foundation (Grant No. 16-13-10257).

**ЕКОЛОГО-АНАЛІТИЧНИЙ МОНІТОРИНГ СТАНУ ҐРУНТІВ
ОЗОКЕРИТОВОЇ ШАХТИ М. БОРИСЛАВА**

*Жак Т. В.*¹, Рикмас Я. В.², Шевчик Л. З.¹, Романюк О. І.¹, Жак О. В.²

¹Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії та вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка Національної академії наук України

²Львівський національний університет імені Івана Франка, кафедра аналітичної хімії
zhachok46@gmail.com

Найбільш інформативним методом дослідження стану навколишнього середовища є екологічний моніторинг. Моніторинг як система постійних режимних спостережень дає змогу оцінити стан довкілля і в кінцевому результаті передбачає проведення заходів, спрямованих на поліпшення його стану. Одним із основних методів екологічного моніторингу є проведення хіміко-аналітичних досліджень.

Нами проводиться моніторинг екологічного стану ґрунтів озокеритовидобутку, що знаходяться в центральній частині м. Борислава Львівської області і слугують джерелом хронічного забруднення ґрунтових вод та повітря міста. Створено сітку для постійних екологічних спостережень, що включає 25 контрольних ділянок, з яких відібрано проби ґрунту. Здійснено визначення вмісту рухомих сполук важких металів ((Zn (II), Cd (II), Pb (II), Ni (II), Cu (II), Mn (II), Co (II), Fe (III)) за Методикою ДСТУ 4770.1-9:2007. Метод полягає у вилученні рухомих форм іонів важких металів з ґрунту ацетатно-амонійним буферним розчином з рН = 4,8. До розчину при цьому переходить частина обмінних катіонів, відбувається гідроліз сполук, утворюються ацетатні або амонійні комплексні сполуки. Завдяки високій буферній ємності цього розчину реакція середовища під час вилучення важких металів із різних ґрунтів залишається стабільною. Визначення на спектрофотометрі С-115 після атомізації проби в повітряно-ацетиленовому полум'ї ґрунтується на властивості атомів у основному стані поглинати світло визначених і специфічних для кожного типу атомів довжин хвиль. Масову концентрацію важких металів у пробах розраховують за формулою:

$$c_{\text{гр.}} = c_{\text{сп.}} \frac{V \times 1000}{1000 \times m},$$

де $c_{\text{гр}}$ – масова концентрація важких металів у витяжці, отримана за градуальною кривою, мг/дм³; V – об'єм ацетатно-амонійного буферного розчину для готування проби, см³; 1000 – коефіцієнт перерахування г у кг; 1000 – коефіцієнт перерахування см³ у л дм³; m – маса наважки ґрунту, г.

Згідно з отриманими результатами, встановлено, що концентрація Co(II), Cu (II) у досліджуваних ґрунтах перебуває у межах норми, а вміст Pb (II), Zn (II), Mn (II), Ni (II) та Cd (II) перевищує ГДК. Це пояснюється нафтовим забрудненням ґрунтів, у золі бориславської нафти кларкові величини за вмістом перевищують наступні елементи: Pb (II), Ni (II), Cu (II), Mn (II), Co (II), V (II).

Отже, відвальні ґрунти на території озокеритової шахти м. Борислава забруднені важкими металами, нафтою і є джерелом вторинного забруднення повітря, поверхневих та підземних вод. На відміну від інших середовищ, у ґрунтах відсутня можливість їхнього швидкого очищення. Хімічні забруднювачі можуть зберігатися в ньому довгі роки і, включаючись до екологічних ланцюгів, зумовлювати тривалу дію токсикантів. Тому ґрунти потребують тривалого екологічного моніторингу.

**ВОЗМОЖНОСТИ РАЗЛИЧНЫХ МЕТОДОВ ОПРЕДЕЛЕНИЯ
ФАЛЬСИФИКАТА В МАСЛО-ЖИРОВОЙ ПРОДУКЦИИ***Загребельная А. Ю., Вашкевич Е. Ю.*Украинский государственный химико-технологический университет
sasha4297@i.ua

На сегодняшний день встал вопрос по определению качества масло-жировой продукции. Ведь производство сливочного масла, на рынке Украины, становится убыточным. Это происходит из-за недостатка сырья и снижению цен на сухое молоко. Все больше появляется новых видов комбинированного масла. Производители, пользуясь этим, скрывают истинный состав, написав на упаковке «Сливочное масло», а в действительности – всего лишь заменитель молочного жира на растительной основе. Потребитель часто не имеет возможности определить подлинность товара, который он покупает.

Для установления подлинности жира используются химические и физико-химические методы: число Рейхерта-Мейссля, йодное число, показатель преломления, газо-жидкостная хроматография (ГЖХ) и др.

Число Рейхерта-Мейссля характеризует содержание в 5 г жира летучих, растворимых в воде жирных кислот (масляной и капроновой). Метод определения состоит из 3 стадий: омыление, отгонка, титрование. Время проведения опыта около 50 минут. При замене молочного жира растительными маслами число Рейхерта-Мейссля будет уменьшаться и, следовательно, чем больше заменили, тем меньше число. Для примера чистый молочный жир имеет число Рейхерта-Мейссля около $27,5 \text{ см}^3 \text{ NaOH (0,1 моль/л) / 5 г}$, а подсолнечное масло – около $0,55 \text{ см}^3 \text{ NaOH (0,1 моль/л) / 5 г}$. При 10 % замене молочного жира уже можно наблюдать существенное понижение результатов.

Йодное число показывает содержание ненасыщенных кислот в жире. Выражено массой йода (в г), которая может быть связана 100 г жира. Метод определения состоит в растворении жира и последующем его титровании. Время проведения эксперимента – 20 минут. Такое определение не требует специального оборудования. При 20 % замене молочного жира на растительные масла происходит повышение йодного числа. Если йодное число больше $40,1 \text{ г I}_2 / 100 \text{ г}$, значит в масле уже присутствует заменитель молочного жира.

Показатель преломления характеризует способность жира преломлять луч света, который проходит через него. Используя этот показатель в процессе производства масла можно определить изменение состава (за счет изомеризации, окисления, гидрогенизации и др.). С помощью показателя преломления можно идентифицировать некоторые виды жира. Метод состоит в растворении жира и снятии показаний с рефрактометра. Время проведения опыта занимает около 15 минут. При 20 % замене молочного жира на растительные масла происходит повышение показателя преломления. Если показатель преломления больше 1,4560, значит в масле уже присутствует заменитель молочного жира.

Газо-жидкостная хроматография является одним из самых точных методов определения фальсификата в масло-жировой продукции, так как позволяет определить замену молочного жира от 2 %. Метод является трудоемким, длительным и требует специального оборудования.

Подводя итог можно сказать, что каждый из представленных методов имеет свои преимущества: у показателя преломления и йодного числа – экспрессность, число Рейхерта-Мейссля показывает содержание немолочного жира в масло-жировой продукции, ГЖХ – самая точная методика из вышеперечисленных. Какой из методов выбрать – зависит от поставленной задачи, наличия оборудования и реактивов.

A VOLTAMMETRIC SENSORY SYSTEM FOR RECOGNITION OF TRYPTOPHAN ENANTIOMERS BASED ON GLASSY CARBON ELECTRODES MODIFIED BY POLYARYLENEPHTHALIDE COMPOSITES OF α -, β -, AND γ -CYCLODEXTRINS

Zilberg R. A., Maistrenko V. N., Yarkaeva Yu. A., Dubrovsky D. I., Provorova Yu. R.

Bashkir State University, Ufa, 32, Validy st., 450076, Russia

ZilbergRA@yandex.ru

For a human, tryptophan (Trp) is an essential amino acid that enters the body with food proteins or nutritional supplements. The amino acids that make up proteins generally are in the L-configuration, whereas the D-amino acids do not participate in protein synthesis or even have an adverse effect on living organisms. These facts led researchers to develop methods for the recognition and determination of tryptophan enantiomers in medicines and food products.

An enantioselective voltammetric sensory system based on glassy carbon electrodes modified by polyarylenephthalide (PAP) composites of α -, β -, and γ -cyclodextrin was developed for selective detection of tryptophan enantiomers. The system uses the chemometric method of principal component analysis (PCA) and projection to latent structures discriminant analysis (PLS-DA). Results of chemometric processing of voltammograms of only one composite electrode (α -, β -, or γ -CD) not allowing for the reliable recognition of Trp enantiomers. To increase the probability of distinguishing between Trp enantiomers, a sensory system with three indicator electrodes modified by PAP composites of α -, β -, and γ -CD, with a cross sensitivity to the D- and L-enantiomers, was used. In this case, the array of experimental data containing the values of the instantaneous currents obtained during registration of the voltammograms on three indicator electrodes was chemometrically processed. The voltammograms using PCA were transformed into points on the principal component, constructed along the maximum dispersion of experimental data (PC1). Then, the next principal component (PC2) was constructed orthogonal to PC1 and directed along the next largest change in the measurement data, and so on. The number of principal components (from 2 to 5) allowing the structure of the initial array of experimental data and their direction in space was chosen on the basis of the explained variability (90 %). PCA shows that voltammogram clusters on the principal components plane do not intersect each other. Chemometric PLS-DA was then used for recognition of tryptophan enantiomers in real objects. Values of discriminant responses were calculated and the stereoisomer was determined. The closer the enantiomer discriminant response values were to unity, the higher the probability that they belonged to a given stereoisomer. Results were considered positive if an enantiomer was correctly assigned to the test sample and not assigned to the other enantiomer. The reference set and the test set were prepared independently. Use of separate GCEs modified by PAP composites of α -, β -, and γ -CD to recognise the Trp enantiomers resulted in large errors of the second kind (acceptance of the incorrect enantiomer) of up to 50 % in the case of α -CD and 40 % in the case of γ -CD. The smallest errors were observed for GCE modified by PAP composites of β -CD, which is supported by the fact that the binding constants of the tryptophan enantiomers with β -CD differ from each other. Using a sensory system with three GCEs modified by PAP composites of α -, β -, and γ -CD, errors of the first kind (incorrect assignment of the identified enantiomer) were not observed, and errors of the second kind were minimised. In this case, 99 % of samples were correctly recognised. The proposed sensory system, after additional studies, may be used to assess the enantiomeric purity of drugs containing tryptophan, the loss of activity of enantiomers due to improper storage and transportation, and drug expiration.

The authors thank the Russian Science Foundation (Grant No. 16-13-10257) for financial support.

PROJECTION TO LATENT STRUCTURES FOR RECOGNITION OF ATENOLOL BY MANUFACTURERS

Kabirova L. R., Provorova Yu. R., Dubrovsky D. I., Habletdinova A. I., Ganieva L. R.

Bashkir State University

32, Zaki Validi Street, 450074 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia

ganievalianaa@yandex.ru

Atenolol is a selective β_1 -adrenoblocker. It is used in the treatment of cardiovascular diseases, such as arterial hypertension, angina pectoris, acute myocardial infarction, tachycardia, etc. One of the enantiomers of the medicinal product has pronounced pharmacological properties, unlike the other. This stimulates the development of studies on the recognition and determination of atenolol enantiomers in pharmaceuticals. In this work, pharmaceuticals from various manufacturers (Belupo, Pranapharm etc.) were chosen as real samples. The voltammograms were obtained by oxidation of atenolol on glassy carbon electrodes (GCE) modified by composites of polyelectrolyte complexes of chitosan (CS) and chitosan succinamide (SCS) with cyclodextrins (CD).

Projection to Latent Structures (PLS) was used for atenolol recognition by manufacturers. PLS regression is a recent technique that generalizes and combines features from the principal component analysis and multiple regression. It is particularly useful when we need to predict a set of independent variables. PLS regression is a statistical method that finds a linear regression model by projecting the predicted variables and the observable variables to a new space. A PLS model will try to find the multidimensional direction in the X space that explains the maximum multidimensional variance direction in the Y space. Results were considered positive if reference sample was correctly assigned to the test sample. The reference set and the test set were prepared independently. Values of discriminant responses of PLS model for real samples using sensory system based on three GCEs modified by composites of CS-SCS with α -, β - and γ -CD were calculated and it is shown in table. It can be seen that all samples were correctly recognized.

Table. Discriminant responses (RS/TS) of PLS model in percentage (%) for real samples using sensory system based on three GCEs modified by composites of CS-SCS with α -, β - and γ -CD

TS** \ RS*	Sample 1	Sample 2	Sample 3
Sample 1	98.80	0.83	0.38
Sample 2	0.83	98.96	0.21
Sample 3	0.37	0.21	99.42

* RS – reference sample, TS – test sample

Thus, the partial least squares regression method was successfully applied to the recognition of atenolol by the manufacturers, which will allow expressly evaluating the quality of the medicament on its basis.

This work was supported by the Russian Science Foundation (Grant No. 16-13-10257).

**ХРОМАТОГРАФІЧНА ОЦІНКА ЛІПОФІЛЬНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ПОХІДНИХ
10-((1,3,4-ОКСАДІАЗОЛ-2-ІЛ)МЕТИЛ)АКРИДИН-9(10H)-ОНІВ ЯК
ПОТЕНЦІЙНИХ НИЗЬКОМОЛЕКУЛЯРНИХ ІНДУКТОРІВ ІНТЕФЕРОНУ**

Карпенко Ю. В., Омелянчик Л. О., Панасенко Т. В., Кучменко А. Р.

Запорізький національний університет, вул. Жуковського, 66, Запоріжжя
karpenko.y.v@gmail.com

Публікації останніх років свідчать про перспективність пошуку біологічно активних речовин в ряду 10-азолілметилакридонів сполук з антибактеріальною, протимікробною та фунгіцидною активністю. Об'єднання в одній молекулі двох фармакофорних фрагментів – акридонового й азольного гетероциклів, зв'язаних метиленовим або етиленовим містком, може привести до одержання сполук, що проявляють широкий спектр біологічної активності.

Перш ніж ввести в структуру необхідні фармакофори для досягнення певного виду біологічної активності, потрібно визначити та обчислити можливі адсорбційні властивості молекули. Від того наскільки швидкою та ефективною буде транспортна здатність молекули, буде залежати її біодоступність, терапевтична доза, побічна дія, тощо. Саме ліпофільність є одним із важливих чинників, від якого залежить адсорбційна здатність не розчинних у воді речовин. Адже ліпофільність – міра спорідненості органічних речовин до ліпідів. З проаналізованих літературних джерел, було встановлено тісний взаємозв'язок між адсорбційними властивостями сполуки та зростанням показників її біологічної дії. Це, вірогідно, можна пояснити кращим накопичення сполук у жирових тканинах, зростанням швидкості проникнення через шкіру або біологічні мембрани, що за своєю структурою є ліпідами.

Тому доцільно було спочатку обґрунтувати дану залежність з теоретичної точки зору. Для цього було вирішено для сполук розрахувати коефіцієнт ліпофільності та, маючи дані часу утримання на хроматографічній колонці і хроматографічну константу для тонкошарової хроматографії, провести кореляцію отриманих результатів.

Отримані експериментальні результати доводять, що запропоновані умови для аналізу ліпофільності похідних 10-((1,3,4-оксадіазол-2-іл)метил)акридин-9(10H)-онів з використанням методів RP-HPLC та RP-TLC для точного та простого визначення значень logP у порівнянні з методом октанол-вода.

ВИВЧЕННЯ РОЗПОДІЛУ ТРИХЛОРАЦЕТАТНОЇ КИСЛОТИ МІЖ ВОДОЮ ТА ОРГАНІЧНИМИ РОЗЧИННИКАМИ

Комляр К. О., Діденко В. В., Кроніковський О. І.

Національний університет харчових технологій

oleg.kronikovsky@gmail.com

Відомо, що карбонові кислоти можуть виступати ефективними протийоними при екстракції катіонів металів у виді комплексів з макроциклічними та ациклічними поліетерами. Для розуміння та можливості передбачення процесів, що протікають в даних екстракційних системах, необхідно знати, яким чином карбонові кислоти розподіляються між органічними розчинниками і водою, а також дослідити фактори, що впливають на цей процес.

Досить перспективним протийоном при екстракції комплексів металів з поліетерами проявила себе трихлорацетатна кислота (НТХА). В випадку її застосування спостерігається як висока синергетична дія краун-етерів, так і кількісне вилучення ряду металів в широкому інтервалі рН.

Якщо розподіл трихлорацетатної кислоти розглядати як фізичний процес, що характеризується впливом загальної сольватації молекули речовини, яка екстрагується, то можливо очікувати лінійну кореляцію $\lg P$ з параметрами BP^* і E_T , що характеризують здатність розчинника здійснювати таку сольватацію.

Розподіл являє собою одночасне і взаємне розчинення речовини, яка екстрагується, в двох суміжних рідких фазах. Цікавим було прослідкувати залежність константи розподілу НТХА від параметра, що характеризує розчиняючу (а отже і екстрагуючу) здатність розчинника. В якості такого параметра може слугувати параметр розчинності Гільденбранда δ . Розчинність відносно полярних речовин в малополярних розчинниках повинна зростати зі збільшенням значення δ .

Для більшості розглянутих нами розчинників спостерігається гарна кореляція констант розподілу НТХА з параметром BP^* (коефіцієнт кореляції $r = 0,89$), параметром E_T ($r = 0,86$) та параметром δ ($r = 0,89$). Кореляція констант розподілу НТХА з параметрами BP^* , E_T і δ може також слугувати основою для якісної оцінки доцільності використання того чи іншого розчинника в екстракційних системах, які містять трихлорацетатну кислоту.

В розглянутих нами системах із загального ряду розчинників випадає диетиловий етер, який має досить високі значення параметрів BP^* , E_T і δ . Відсутність кореляції для диетилового етеру, ймовірно, можна пояснити його здатністю до взаємодії з НТХА. Це дозволило припустити можливість взаємодії трихлорацетатної кислоти з етерами різної природи, в тому числі можливість утворення в органічній фазі асоціатів НТХА з макроциклічними та ациклічними поліетерами.

Утворення в органічній фазі асоціату трихлорацетатної кислоти з поліетерами кількісно характеризується константою асоціації:



Аналогічно загальноприйнятим константам екстракції металів, константу екстракції кислоти в даній системі можна записати так:

$$K_{ex} = [L \cdot \text{НТХА}]_o / [H^+]_в [\text{ТХА}^-]_в [L]_o$$

Цікаво, що величини K_{ex} , розраховані для абсолютно різних за своїми властивостями розчинників, відрізняються дуже мало. Не проявляється в даному випадку і макроциклічний ефект, навпаки, найбільші значення K_{ac} та K_{ex} спостерігаються для ациклічного поліетера ПЕГ-1500. В даному випадку, ймовірно, більш суттєвим є збільшення числа оксиетиленових груп: 35 в ПЕГ-1500 замість 6 в 18С6.

КОНТРОЛЬ ВМІСТУ АЗОТУ У РОСЛИННИХ ЗРАЗКАХ*Кулішова Ю. О., Смітюк Н. М.*

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

kulishovkayulia@gmail.com

Азот – найбільш широко використовуваний мікроелемент, який збільшує зелену (вегетативну) масу рослин і, як наслідок, врожайність. Серед усіх мінеральних добрив азотні найбільш небезпечні при передозуванні. Надлишковий азот може накопичуватися в рослинах у вигляді нітратів та нітритів, шкідливих для здоров'я людини. Ознаки дефіциту азоту – гальмування росту рослин. Після зав'язування плодів частина їх осипається, а ті, що залишилися, виростають дрібними з щільною м'якоттю.

Визначення вмісту азоту та протеїну проводили в насінні соняшнику, кукурудзи, сої та пшениці. Вміст азоту та протеїну в аналізованих зразках визначали по методу Дюма. Метод полягає в спалюванні нітрогеновмісної речовини, внаслідок чого утворюється вільний азот і суміш кількох оксидів. Газову суміш пропускали через розчин лугу, в якому розчиняються всі складові окрім азоту. Його об'єм вимірювали спеціальним волюметром (азотометром) і на основі цього розраховували вихідний вміст Нітрогену в речовині. Визначення вмісту протеїну проводили за допомогою протеїнового аналізатору Leco FP 628. Розбіжність між паралельними результатами не повинна перевищувала за протеїном 0,5 %. Час аналізу становив 180–190 секунд. Результати визначення цих показників наведено в табл.

Таблиця. Вміст азоту та протеїну у рослинних зразках

Аналізований зразок	Вміст азоту, %	Вміст протеїну, %
Насіння соняшнику	2,2	11,7
Кукурудза	2,3	12,3
Соя	2,7	14,5
Пшениця	2,2	11,5

Встановлено, що найбільший вміст азоту спостерігається у сої 2,7 %, у інших зразках вміст майже на однаковому рівні 2,2–2,3 %. Найбільший вміст протеїну спостерігається у сої 14,5 %, найменший – пшениці 11,5 %.

РОЗІГРІВАЮЧИЙ АНТИЦЕЛЮЛІТНИЙ КРЕМ ДЛЯ ТІЛА*Куцевол А. Є., Волнянська О. В.*

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»

angelina.kutsevol@gmail.com

Целюліт – це локальне збільшення жирових клітин і порушення мікроциркуляції в жировій тканині. Ці клітини перестають виділяти продукти своєї життєдіяльності, проте з подвійною силою накопичують жир, а також рідину, токсини та інше.

Антицелюлітний крем – косметичний засіб, спрямований на боротьбу з проявами целюліту на стегнах, сідницях, животі, руках.

Дія антицелюлітного крему:

- покращує кровообіг і лімфоток;
- стимулює обмінні процеси в клітинах шкіри;
- зміцнює стінки судин;
- стимулює розщеплення жирів;
- стимулює виведення шлаків і токсинів.

Залежно від складу, способу застосування і принципу дії розрізняють кілька основних різновидів цієї категорії засобів: масажний, розігріваючий, охолоджуючий, для обгортання.

В магазинах представлено багато кремів для боротьби з целюлітом. Виробники залучають покупців доступною вартістю, акціями, знижками, розпродажами. Привабливі умови купівлі – важливий критерій при виборі крему, але головне – це якість продукції і її ефективність.

В якості об'єкту дослідження нами був обраний розігріваючий антицелюлітний крем. Метою роботи є розробка рецептури та вивчення існуючих базових рецептур розігріваючого антицелюлітного крему та їх аналіз. Також провести аналітичний контроль якості розробленого зразка та порівняти отримані результати з нормами, які наведені в ГОСТах.

Поставленою задачею є детальне вивчення складових компонентів промислових зразків розігріваючого антицелюлітного крему, провести повний покомпонентний аналіз для оцінки безпеки косметичного виробу та можливого впливу на організм людини.

До складу базової рецептури крему входять такі компоненти: гідролат розмарину, екстракт фукуса пузирчастого, масло ши, масло солодкого мигдалю, вітамін А, ефірне масло грейпфруту, емульгатор Olivem 1000, CO₂-екстракт куркуми, CO₂-екстракт розмарину, консервант. В рецептурі були замінені такі компоненти: масло ши замінено на масло виноградної кісточки, адже воно не тільки надає упругість і еластичність шкіри, а ще й швидко всмоктується, екстракт фукуса пузирчастого – на антицелюлітний комплекс, бо він має більшу дію на позбавлення від целюліту. Для розщеплення підшкірного жиру добавили кофеїн безводний, він активізує мікроциркуляцію, покращує текстуру шкіри та усуває набряклість в проблемних місцях.

Розроблена рецептура розігріваючого антицелюлітного крему покращує мікроциркуляцію, робить шкіру більш щільною і пружною, а целюлітні бугорки менш помітними. Використання запропонованих спеціальних розігріваючих компонентів стимулює обмін речовин і активізує кровообіг. Завдяки цьому відбувається процес розщеплення ліпідів і подальше уповільнення їх накопичення в тканинах. Розроблений засіб м'яко і дбайливо доглядає за шкірою, зміцнюючи, тонізуючи і роблячи її шовковистою.

**ИМПЕДАНСОМЕТРИЧЕСКОЕ ТИТРОВАНИЕ ИОНОГЕННЫХ ПАВ
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ**

Максютова Э. И., Сидельников А. В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа
elzsha@gmail.com

Пути повышения селективности методик определения в аналитической химии, как известно, разнообразны. Например, в потенциометрии разрабатывают мембраны для изготовления ионоселективных сенсоров, во многих других методах селективность повышают экстракцией или сорбцией веществ или сочетанием методов. Важнейшими задачами при этом остаются повышение селективности, чувствительности определения веществ при одновременном улучшении характеристик экспрессности, автоматизации для проведения on-line, in-line и at-line анализа. Первоначально такие задачи необходимо решать при разработке методик определения и контроля загрязнителей, масштабно используемых в промышленности и быту. Одними из таких веществ являются поверхностно-активные вещества. ПАВы нашли широкое применение в производстве косметико-гигиенических препаратов, антистатиков и кондиционеров для тканей, в медицине – в качестве дезинфекционных и антисептических средств, в нефтедобывающей промышленности – в качестве агентов повышения нефтеотдачи.

Одним из современных перспективных методов является метод импедансной спектроскопии, в основе которого лежит измерение зависимости импеданса электрохимической ячейки от частоты переменного тока. Анализируемые объекты различной природы и состава и протекающие на электродах процессы характеризуются разными зависимостями составляющих импеданса (мнимая и действительная части) от частоты переменного тока, что позволяет использовать метод в аналитических целях для определения ПАВ. Важное преимущество метода – высокая чувствительность измерений, отсутствие требований к селективности электродов, присутствию окрашенных компонентов, наличию гетерогенных фаз и др. Важным преимуществом метода импедансного спектроскопического титрования перед кондуктометрическим и потенциометрическим методами является возможность варьирования селективности отклика изменением диапазона частот переменного тока и потенциала электрода. Не менее важна высокая скорость регистрации импеданса ячейки в отличие от потенциометрии, где состояние равновесного потенциала достигается в течение нескольких минут.

С использованием хемометрического метода главных компонент (МГК) в настоящей работе апробирована методика определения катионных и анионных ПАВ методом импедансометрического титрования. С применением распределения Стюдента оценена прецизионность анализа ионогенных ПАВ в присутствии минеральных солей, поликарбиламида, широко используемого в нефтедобывающей промышленности, и разных по составу нефтей. Точность определения ПАВ в предложенном способе определяется точностью заданного объема дозы титранта. Метод позволяет инструментально варьировать чувствительность и избирательность определения ПАВ, экспрессность и точность определений с использованием различных диапазонов частот переменного тока, а также изменения площади и потенциала поляризации рабочего электрода. Таким образом, полученные результаты свидетельствуют о преимуществах метода импедансной спектроскопии перед известными способами количественного определения ионогенных ПАВ в сложных многокомпонентных гомогенных и гетерогенных системах.

Работа выполнена при поддержке РФФИ: грант №17-43-020232 р-Поволжье-а.

FORMATION OF SODIUM HETEROPOLY DECATUNGSTOEUROPATE(III)

 $\text{Na}_9[\text{Eu}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 35\text{H}_2\text{O}$ IN AQUEOUS SOLUTION*Mariichak O. Yu.*, Rozantsev G. M., Radio S. V.

Vasyl' Stus Donetsk National University, Ukraine

o.mariichak@donnu.edu.ua

Lanthanide containing materials are receiving increasing attention due to their wide range of potential applications. To investigate the reaction of formation of Eu(III)-containing heteropoly anion individual aqueous solutions of $\text{Eu}(\text{NO}_3)_3$ ($C = 0.01 \text{ mol/L}$) and $\text{Na}_9[\text{Eu}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 35\text{H}_2\text{O}$ (with $C(\text{Eu}^{3+}) = 0.01 \text{ mol/L}$) were prepared. The synthesis of sodium heteropoly decatungstoeuropate(III) $\text{Na}_9[\text{Eu}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 35\text{H}_2\text{O}$ from acidified up to $Z = \nu(\text{H}^+)/\nu(\text{WO}_4^{2-}) = 0.80$ aqueous solution of sodium tungstate with a ratio of $\nu(\text{Eu}):\nu(\text{W}) = 1:10$ was done. Using FT-IR and Raman spectroscopy it was shown that heteropoly anion contained in the isolated salt belong to Peacock–Weakly structure. The structure of $\text{Na}_9[\text{Eu}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 35\text{H}_2\text{O}$ was determinsd by Single Crystal X-ray analysis.

The spontaneous formation of $\text{Na}_9[\text{Eu}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 35\text{H}_2\text{O}$ through a simple ionic self-assembly method and the influence of different values of the temperature were investigated by using UV-Vis spectroscopy (Fig.).

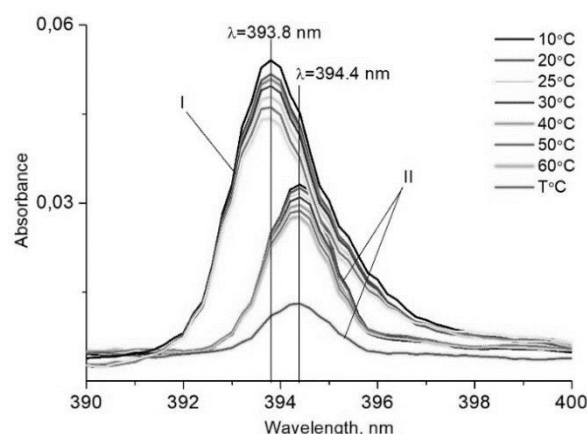


Fig. Electronic absorption spectra of the solutions:

I – $\text{Eu}(\text{NO}_3)_3$ ($C = 0.01 \text{ mol/L}$); II – $\text{Na}_9[\text{Eu}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 35\text{H}_2\text{O}$ ($C(\text{Eu}^{3+}) = 0.01 \text{ mol/L}$),
 $T^\circ\text{C}$ – measurement was done at 25°C after 24 hours of $\text{Na}_9[\text{Eu}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 35\text{H}_2\text{O}$ boiling

The presence of hypochromic shift in the heteropoly salt solution was established that is caused by the change in coordination polyhedron of Eu(III) ion during transition from aqua complex to Peacock-Weakley heteropolyanion with coordination towards the heteroatom of lacunar pentatungstate anions, $\text{W}_5\text{O}_{18}^{6-}$, in the form of square antiprisms. There are two maxima peaks at 393.8 nm and 394.4 nm, which belong to europium nitrate and sodium heteropoly decatungstoeuropate(III), respectively. There is the directly proportional dependence between absorbance values and temperature. It shows that the absorbance decreases with the temperature from 10 to 60°C in case of $\text{Eu}(\text{NO}_3)_3$, and $\text{Na}_9[\text{Eu}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 35\text{H}_2\text{O}$. The absorbance of decatungstoeuropate(III) at 25°C after 24 hours of sample's boiling is noticeably lower. This suggests that the concentration of the compounds in the samples became lower. Also, a large ligand peak was observed in europium nitrate around the 290–310 nm, and in the case of sodium decatungstoeuropate(III) solution there is a big plato in the range of 200–320 nm.

Acknowledgements. The study was carried out within the Fundamental Research Program funded by the Ministry of Education and Science of Ukraine (Project No. 0116U002521).

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ВМІСТУ БІНАРНИХ СУМІШЕЙ ХАРЧОВИХ БАРВНИКІВ «ЗАХІД СОНЦЯ» (E110) ТА «АЗОРУБІН» (E122)

Медведева Д. Д., Засва А. С., Сидорова Л. П.

Діпровський національний університет імені Олеся Гончара

dasha521309@gmail.com

Синтетичні барвники широко використовують в сучасній харчовій промисловості. Для створення різних відтінків у харчові продукти додають суміші барвників, спектри яких значно перекриваються, що ускладнює їх безпосереднє визначення. Для визначення вмісту індивідуальних харчових барвників E110 «Сонячний захід» та E122 «Азорубін» при спільній присутності використали метод Фіордта.

Метод Фіордта дозволяє аналізувати багатокомпонентні системи в умовах перекривання спектрів окремих компонентів і, таким чином, також служить для підвищення селективності. В основі метода Фіордта лежить закон адитивності оптичної густини. Метод полягає в вимірі оптичної щільності суміші при декількох довжинах хвиль і складанні системи рівнянь, що включають невідомі концентрації компонентів суміші.

Для двохкомпонентної системи: він заснований на незалежному визначенні сумарної концентрації компонентів суміші, зокрема на використанні точки перетину спектрів поглинання компонентів. Спектри поглинання компонентів E110 та E122 суміші можуть мати спільну точку перетину кривих 1 і 2 (Рис.). В цьому випадку $\varepsilon_1\lambda_1 = \varepsilon_2\lambda_1$. Довжину хвилі λ_2 вибирають в області найбільшої різниці в спектрах поглинання 550 нм.

$$\begin{cases} A_{\lambda_1} = \varepsilon_{1\lambda_1}(C_1 + C_2) \\ A_{\lambda_2} = \varepsilon_{1\lambda_2}C_1 + \varepsilon_{2\lambda_2}C_2 \end{cases}$$

$$C_1 = (A_{\lambda_2} - A_{\lambda_1} \varepsilon_{2\lambda_2} / \varepsilon_{1\lambda_1}) / (\varepsilon_{1\lambda_2} - \varepsilon_{2\lambda_2})$$

$$C_2 = (A_{\lambda_2} - A_{\lambda_1} \varepsilon_{1\lambda_2} / \varepsilon_{1\lambda_1}) / (\varepsilon_{2\lambda_2} - \varepsilon_{1\lambda_2})$$

$$C_{E110} = (A_{550} - A_{505} \varepsilon_{E122(550)} / \varepsilon_{E110(505)}) / (\varepsilon_{E110(550)} - \varepsilon_{E122(550)}) =$$

$$= (0,41 - (1,03 \times 3771,712 / 5062,035)) / (297,7667 - 3771,712) = 1,02 \cdot 10^{-4} \text{ моль/л}$$

$$C_{E122} = (A_{550} - A_{505} \varepsilon_{E110(550)} / \varepsilon_{E110(505)}) / (\varepsilon_{E122(550)} - \varepsilon_{E110(550)}) =$$

$$= (0,41 - (1,03 \times 297,7667 / 5062,035)) / (3771,712 - 297,7667) = 1,01 \cdot 10^{-4} \text{ моль/л}$$

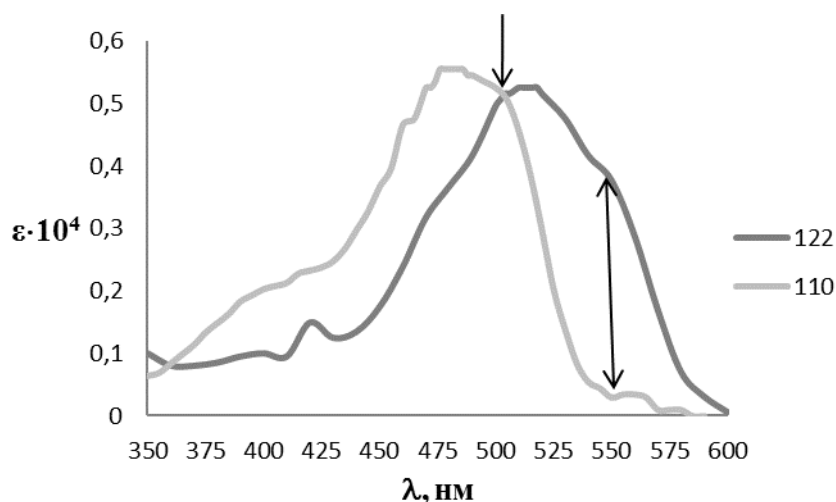


Рис. Графік залежності коефіцієнта світлопоглинання від довжини хвилі для барвників E110 та E122 ($C_{E122} = 10 \text{ мкг/мл}$, $C_{E110} = 10 \text{ мкг/мл}$)

СЕЛЕКТИВНЕ ВИЗНАЧЕННЯ НЕІОНОГЕННИХ ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНИХ РЕЧОВИН

Медяна Д. В., Мироняк М. О., Ніколенко М. В.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»
d.v.medyana@gmail.com

До неіоногенних поверхнево-активних речовин (ПАР) належать сполуки амфіфільної будови, в яких гідрофільна частина молекули не дисоціює на іони, а отже не має заряду. В косметичних засобах у порівнянні з іншими поверхнево-активними речовинами ці сполуки мають найбільш м'яку дію, широко застосовуються як загущувачі та стабілізатори піни, оскільки добре поєднуються з іншими речовинами косметичних рецептур та є біорозкладними.

Одним з найбільш розповсюджених неіоногенних ПАР у різних піномиючих засобах є кокамід діетаноламіну – амід жирної кислоти кокосового масла. Його основними технологічними властивостями є емульгування, стабілізація емульсій, загущення, антистатичний ефект. Кокамід діетаноламіну (кокамід ДЕА) набув широкого використання у складі шампунів, пін для ванн, гелів для душу, зубних паст, гелів та лосьйонів для обличчя тощо. Ця речовина при індивідуальному застосуванні має слабку піноутворюючу здатність, тому часто для підсилення піномиючих властивостей засобів додають інші аніонні або амфотерні поверхнево-активні речовини, що володіють більш жорсткою дією.

Використання кокаміду ДЕА в складі піномиючих композицій надає їм багато переваг, таких як здатність пінитись у жорсткій воді, підвищення в'язкості, стабілізація консистенції засобів, пом'якшення волосся та запобігання утворенню статичного електричного заряду на волоссі після миття, закріплення запахів ароматизаторів в засобах. Проте незважаючи на всі переваги, кокамід діетаноламіну має і недоліки – може викликати алергічні реакції та за деякими дослідженнями може мати токсичну та канцерогенну дію. Тому необхідним є обов'язковий контроль кількісного вмісту цієї речовини у косметичних засобах.

Наразі для визначення вмісту даної речовини використовуються наступні методи: газова хроматографія та високоефективна ріднинна хроматографія. Проте ці методи складні у дослідженні та пробопідготовці, а також не є експресними. Тому розробка альтернативних, більш простих та експресних методик визначення кількісного вмісту цієї речовини в косметичних засобах є актуальним питанням.

В якості методу визначення вмісту кокаміду діетаноламіну у складі косметичних засобів нами пропонується застосовувати метод прямої потенціометрії з використанням мембранних потенціометричних сенсорів, оборотних до кокаміду ДЕА. Як свідчать попередні експериментальні дослідження, пряма потенціометрія з використанням сенсорів, чутливих до певного типу або класу речовин є дуже зручним, швидким та досить чутливим методом визначення різних органічних речовин, отже може дозволити проводити визначення кокаміду діетаноламіну швидко, без використання складних стадій пробопідготовки, коштовного обладнання та токсичних реагентів.

**VOLTAMMETRY OF TRYPTOPHAN ENANTIOMERS ON GLASSY CARBON
ELECTRODES MODIFIED BY POLYARYLENEPHTHALIDE COMPOSITES
OF α -, β -, AND γ -CYCLODEXTRINS**

Murzina K. A., Zilberg R. A., Khabletdinova A. I.

Bashkir State University, Ufa, 32, Validy st., 450076, Russia

ZilbergRA@yandex.ru

Tryptophan (Trp) or 2-amino-3-(1H-indol-3-yl)-propionic acid is known to be irreversibly oxidised in phosphate buffer solution on modified glassy carbon electrodes (GCE)s with the transfer of two electrons.

In the investigated potential range the enantiomers of Trp in phosphate buffer solution on polyarylenephthalide (PAP)-modified GCE were oxidised with formation of corresponding peaks. Analytical signals of the Trp enantiomers differed slightly from each other. When a modifier (α -, β - or γ -CD) is added to the PAP, PAP composites are deposited on GCE surfaces. The differential pulse voltammograms of the Trp enantiomers on these electrodes differ among themselves. This is due to the fact that molecules of CDs can form inclusion complexes with Trp, which act as chiral selectors. To determine the optimum experimental conditions, the effect of the pH of the analysed solution, the potential sweep rate, the electrode holding time in the analysed solution, the concentration of Trp enantiomers on the current values, and the shape of the voltammograms were studied. Criteria of optimization were sensitivity, standard deviation, and correlation coefficients of calibration plots. Electrochemical and analytical characteristics of differential pulse voltammograms of Trp enantiomers on the GCEs modified by PAP composites of α -, β - or γ -CD in concentration range 4–70 μ M are shown in Table.

Table. Characteristics of DPVs of D- and L-enantiomers of Trp (0.035 mM) oxidizing on the GCEs modified by PAP composites of α -, β - and γ -CD in phosphate buffer solution (pH 6.86) at a scan rate of 20 mVs⁻¹

Electrode	E_p , V		I_p , μ A		$\Delta I_p / \Delta C$, μ A μ M ⁻¹		C_{min} , μ M
	D-Trp	L-Trp	D-Trp	L-Trp	D-Trp	L-Trp	
GCE/PAP/ α -CD	0.58	0.57	7.46	7.72	0.057	0.065	4.0
GCE/PAP/ β -CD	0.65	0.66	7.39	8.75	0.084	0.098	4.0
GCE/PAP/ γ -CD	0.65	0.66	7.42	8.83	0.063	0.072	7.0

The standard calibration plots show that GCEs modified by PAP composites of α -, β - and γ -CD exhibited enantioselective discrimination of Trp enantiomers over this concentration range. The most significant differences between the Trp enantiomer responses are observed on the electrodes modified by PAP composites of β - and γ -CD. Thus, modified by PAP and CDs electrodes can be used in the electrochemical determination of Trp enantiomers.

The authors thank the Russian Science Foundation (Grant No. 16-13-10257) for financial support.

ГАЗОХРОМАТОГРАФІЧНИЙ АНАЛІЗ ЖИРНО-КИСЛОТНОГО СКЛАДУ ВЕРШКОВОГО МАСЛА

Мінаєва Ю. А., Сидорова Л. П.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара
Sidorova_LP@i.ua

Коров'яче масло, мабуть, є самим фальсифікованим на сьогодні продуктом. Магази́ни завалені різного роду «м'якими», «легкими», «полегшеними» маслами. За різними оцінками, 60–80 % продукції, що продається під видом масла, насправді являють собою жирові суміші. В зв'язку з цим особливої актуальності набуває встановлення фальсифікації масложирової продукції. Найбільш достовірними показниками, що характеризують якість масложирової продукції, є жирно-кислотний і тригліцеридний склади, а також параметри стеаринової фракції, які встановлюють хроматографічними методами.

Найбільш вивчений вміст в жирах лауринової (C12:0), міристинової (C14:0), пальмітинової (C16:0), стеаринової (C18:0), олеїнової (C18:1), лінолевої (C18:2) кислот. Тому саме ці кислоти багато авторів розглядають як критерії ідентифікації натуральності молочного жиру. Нами встановлено, що різниця за вмістом цих кислот в натуральних і фальсифікованих продуктах не перевищує 10 %, тому переважно провести ідентифікацію по бутановій кислоті (C4:0).

Визначення жирно-кислотного складу (ЖКС) проводили на газо-рідинному хроматографі Shimadzu 14В з полум'яно іонізаційним детектором на скляній капілярній колонці з рідкою нерухомою фазою карбовакс 20 М довжиною 80 м, внутрішнім діаметром 0,35 мм, товщиною шару покриття фази 0,2 мкм. Температура інжектора становила 280 °С, детектора – 300 °С, термостата колонки в ізотермічному режимі – 190 °С. При програмованому режимі початкова температура – 80 °С, витримка при початковій температурі – 5 хв, швидкість підйому температури 8 °С/хв, кінцева температура – 190 °С, тиск газу-носія на вході в інжектор – 0,1 МПа, розподіл потоку на вході в колонку – 1/10 (скидання в атмосферу – 9/10 потоку на виході з інжектора). Газ носій – азот. Для якісної ідентифікації метилових ефірів жирних кислот використовували стандартний розчин корпорації SUPELCO, в який входить 37 метилових ефірів жирних кислот (Кат. № 47885). Для кількісної оцінки використовували метод внутрішньої нормалізації.

Пробопідготовка проби для визначення ЖКС масложирової продукції заснована на лужному гідролізі тригліцеридів і отриманням метилових ефірів жирних кислот (ЖК) реакцією естерифікації. Розрахунки проводилися за допомогою програми мультіхром. Використовувався метод внутрішньої нормалізації. Масову частку кожної кислоти масла X_i розраховували за формулою: $X_i = (A_i / \sum A) \cdot 100 \%$, де A_i – площа піку, яка відповідає i -му компоненту, $\sum A$ – сумарна площа піків. Результати кількісного визначення ЖКС вершкового масла наведені у таблиці.

Таблиця. Результати вмісту (%) ЖК у вершковому маслі.

ЖК	C4:0	C6:0	C8:0	C10:0	C10:1	C12:0	C14:0	C16:0	C18:0	C18:1	C18:2	C18:3	C20:0	C22:0
(%)	3,1	1,9	1,2	2,5	0,2	2,9	10,9	30,9	13,3	27,6	3,1	0,4	1,2	0,3

Вміст масляної кислоти (C4:0) в пробі занижений ($3,1 \pm 0,3 \%$), і не входить в інтервал концентрацій (мас.%), характерних для молочного жиру (4,7–6,5 %), що свідчить про фальсифікацію аналізованого вершкового масла.

Для встановлення фальсифікації вершкового масла визначення жирно кислотного складу методом газової хроматографії може використовуватися тільки за умови кількісного визначення бутанової (C4:0), або пентадеканової (C15:0) кислот із застосуванням внутрішнього стандарту, що можливо зробити тільки використовуючи високоефективні капілярні колонки.

МЕТОД ФІРОРДТА ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ СУМІШІ ХАРЧОВИХ БАРВНИКІВ ЖОВТОГО «ЗАХІД СОНЦЯ» (E110) ТА ПОНСО 4R (E124)

Пльонсак П. П., Сидорова Л. П.

Діпровський національний університет імені Олеся Гончара
plionsak0224@gmail.com

Синтетичні барвники – це харчові барвники, отримані методами синтезу і не зустрічаються в природі. Синтетичні барвники володіють значними технологічними перевагами в порівнянні з більшістю натуральних барвників, вони дають яскраві, кольори, які легко відтворити і менш чутливі до різних видів впливу, яким піддається матеріал в ході технологічного процесу.

Метод Фіордта дозволяє спростити багатокомпонентний аналіз. Він може бути використаний лише при дотриманні закону Бугера–Ламберта–Бера для обох компонентів і принципа адитивності для їх суміші.

Перший випадок для двохкомпонентної системи: заснований на незалежному визначенні сумарної концентрації компонентів суміші, зокрема на використанні точки перетину спектрів поглинання компонентів.

Спектри поглинання компонентів E110 та E124 двокомпонентної суміші можуть мати спільну точку перетину. В цьому випадку $\varepsilon_{1\lambda_1} = \varepsilon_{2\lambda_1}$. Довжину хвилі λ_2 вибирають в області найбільшої різниці в спектрах поглинання (530 нм).

$$\begin{cases} A_{\lambda_1} = \varepsilon_{1\lambda_1}(C_1 + C_2) \\ A_{\lambda_2} = \varepsilon_{1\lambda_2}C_1 + \varepsilon_{2\lambda_2}C_2 \end{cases}$$

$$C_1 = (A_{\lambda_2} - A_{\lambda_1} \varepsilon_{2\lambda_2} / \varepsilon_{1\lambda_1}) / (\varepsilon_{1\lambda_2} - \varepsilon_{2\lambda_2})$$

$$C_2 = (A_{\lambda_2} - A_{\lambda_1} \varepsilon_{1\lambda_2} / \varepsilon_{1\lambda_1}) / (\varepsilon_{2\lambda_2} - \varepsilon_{1\lambda_2})$$

$$C_{E110} = (A_{530} - A_{490} \varepsilon_{E124(530)} / \varepsilon_{E110(490)}) / (\varepsilon_{E110(530)} - \varepsilon_{E124(530)}) = (0,806 - (1,52 \times 35006,05 / 35278,15)) / (9271,83 - 39842,81) = 2,29 \cdot 10^{-5} \text{ моль/л}$$

$$C_{E124} = (A_{530} - A_{490} \varepsilon_{E110(530)} / \varepsilon_{E124(490)}) / (\varepsilon_{E124(530)} - \varepsilon_{E110(530)}) = (0,806 - (1,52 \times 9271,82 / 40507,86)) / (35006,05 - 1582,99) = 1,32 \cdot 10^{-5} \text{ моль/л}$$

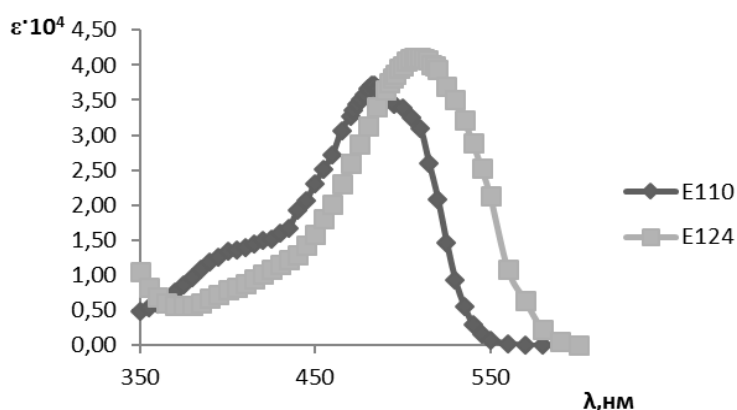


Рис. Графік залежності коефіцієнта світлопоглинання від довжини хвилі для барвників E110 та E124 ($C_{E110}=10$ мкг/мл, $C_{E124}=10$ мкг/мл)

Другий випадок: базується на виборі довжин хвиль з однаковими молярними коефіцієнтами світлопоглинання у одного або декількох комплексів (з використанням «перерізу» спектра). При аналізі двокомпонентних систем зручно вимірювати оптичну густину при довжинах хвиль з однаковими молярними коефіцієнтами світлопоглинання одного з компонентів. Так можемо знайти концентрацію барвників за формулою:

$$C = (A_{\lambda_1} - A_{\lambda_2}) / (\varepsilon_{\lambda_1} - \varepsilon_{\lambda_2})$$

$$C_{E110} = (A_{470} - A_{505}) / (\varepsilon_{E110(470)} - \varepsilon_{E110(505)}) = (0,721 - 0,72) / (32609,68 - 32564,45) = 2,21 \cdot 10^{-5} \text{ моль/л}$$

$$C_{E124} = (A_{490} - A_{525}) / (\varepsilon_{E124(490)} - \varepsilon_{E124(525)}) = (0,602 - 0,612) / (36396,61 - 37001,21) = 1,65 \cdot 10^{-5} \text{ моль/л}$$

**PRINCIPAL COMPONENT ANALYSIS FOR SELECTIVE VOLTAMMETRIC
RECOGNITION OF ATENOLOL ENANTIOMERS**Zilberg R. A., *Provorova Yu. R.*, Kabirova L. R., Habletdinova A. I.

Bashkir State University

32, Zaki Validi Street, 450074 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia

provorova-96@mail.ru

Atenolol (ATN) is a drug that helps to fight the diseases of the cardiovascular system. It has antiarrhythmic, antianginal, hypotensive biological actions. Biological activity of drugs is associated with one of the enantiomers. For atenolol, the S-enantiomer is usually 50–500 times more effective than the R-enantiomer.

In this study, voltammetric sensors based on glassy carbon electrodes (GCE) modified by composites of polyelectrolyte complexes of chitosan and chitosan succinamide (CS-SCS) with cyclodextrins (CD) for the recognition of ATN enantiomers have been developed. For more reliable recognition of enantiomers and their racemic mixtures, the obtained voltammograms were chemometrically processed using the principal component analysis (PCA). Chemometric processing of experimental data arrays by PCA allows to represent the ATN voltammograms in the form of points, grouping into ellipsoids or spheres in the new coordinate system X, Y, Z, etc., where the coordinate axes are the vectors of the main components. In this case, the main components should be considered as the directions of the greatest change in the space of the variables X, Y or Z. The graph on which the projections on the plane of the main components and parts of the explained data variance for each principal component are expressed as a percentage is usually called the chart of accounts. It describes the relative position of the voltammograms of the samples under study in the space of new coordinates and makes it possible to estimate the efficiency of the "compression" of the experimental data. Each point in the chart of accounts corresponds to a specific voltammogram, and the totality of nearby points and the space they occupy will correspond to the ATN enantiomers.

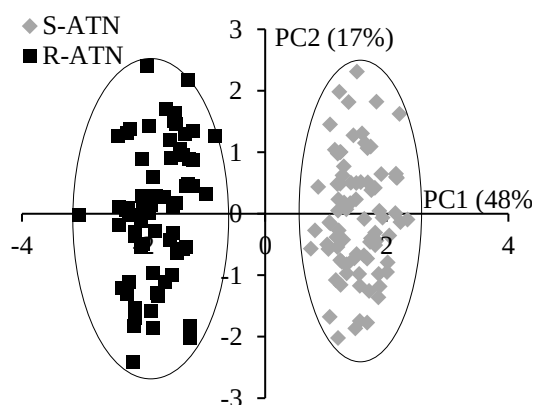


Fig. Score plot of PCA modelling of voltammograms obtained by differential pulse voltammetry for 0.5 mM solutions of ATN enantiomers using of sensory system with three GCEs electrodes modified by CS-SCS composites of CDs

Thus, the results of PCA modeling show the better specificity of voltammetric sensors based on glassy carbon electrodes modified with composites of polyelectrolyte complexes of chitosan and chitosan succinamide with cyclodextrins for recognition of ATN enantiomers.

This work was supported by the Russian Science Foundation (Grant No. 16-13-10257).

**VOLTAMMETRIC DETERMINATION OF ATENOLOL ENANTIOMERS USING
POLYELECTROLYTE COMPLEXES OF CHITOSAN AND CHITOSAN
SUCCINAMIDE WITH CYCLODEXTRINS**

Provorova Yu. R., Kabirova L. R., Zilberg R. A.

Bashkir State University

32, Zaki Validi Street, 450074 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia

provorova-96@mail.ru

Nowadays, the number of people with cardiovascular diseases is dramatically increasing. Especially popular are tachycardia, arterial hypertension, etc. Pharmaceuticals based on atenolol have antiarrhythmic, antianginal, hypotensive effects. Atenolol, designated chemically as 4-(2-hydroxy-3-isopropylaminopropoxy)-phenylacetamide, is a cardio selective β -adrenoblocker. In connection with the important role of atenolol, different methods of its recognition and determination have been used, such as gas chromatography coupled with mass spectrometry, spectrophotometry and flow injection analysis, etc. The use of these methods requires expensive tools and equipment, long preparation and thorough cleaning of samples. An alternative to the methods listed above is the electrochemical methods of analysis, in particular the voltammetry. Voltammetric sensors based on glassy carbon electrodes (GCE) modified by composites of polyelectrolyte complexes of chitosan and chitosan succinamide with cyclodextrins for enantioselective analysis and determination of atenolol enantiomers were studied using cyclic voltammetry (CV), and differential pulse voltammetry (DPV).

Atenolol enantiomer solutions were prepared by dissolving an accurately weighed quantity in 100 ml of borate buffer solution (pH 9.18). Solutions of lower concentrations were prepared by serial dilution of the stock solutions. A 20 ml test solution was placed in an electrochemical cell. CV were measured by the potential range of 0.8 to 1.6 V with a potential sweep rate of 100 mVs⁻¹ after the electrolyte solution for 30 s with vigorous mixing and $E = 0$. The DPV experiments were carried out a potential range of 0.8 to 1.2 V with an amplitude of 50 mV, an interval time of 0.25 s, a modulation time of 0.025 s, and a potential sweep rate of 20 mVs⁻¹. One parallel measurement included recording five voltammograms. Each voltammogram included from 80 (DVP) to 160 (CV) instantaneous currents (in increments of 5 mV) at different potentials. The proposed sensors exhibited selectivity towards the atenolol enantiomers and had cross-sensitivity, so they can be used to create a multi-sensor system.

Thus, the system of these sensors based on glassy carbon electrodes modified by composites of polyelectrolyte complexes of chitosan and chitosan succinamide with cyclodextrins can be successfully applied for the recognition of atenolol enantiomers through a multi-sensory system.

This work was supported by the Russian Science Foundation (Grant No. 16-13-10257).

COMPARATIVE ANALYSIS OF MERCURY DETERMINATION IN RAW MATERIALS AND PRODUCTION OF HEAVY INDUSTRY ENTERPRISES*Tselik M. S.*

Donetsk National Technical University, Pokrovsk, Ukraine
margarita.tzelik@gmail.com

For quite some time in Ukraine and near abroad, one of the most serious and obvious pollution of the environment is the emissions of metallurgical enterprises. A significant number of metallurgical enterprises, whose emissions have a negative effect on the entire environment, are in the Donetsk region. The most dangerous components of emissions of metallurgical enterprises are highly toxic mercury compounds. Since, during enrichment of coal, Hg is almost completely converted to the gas phase, analysis of the Hg content in coals is the primary task for environmental protection. To reduce the harmful impact of emissions of metallurgical enterprises on the environment, careful monitoring of contained toxins in the raw materials and products of these enterprises is needed, which proves the relevance of this master's work.

Object of the master's study: raw materials and products of metallurgical and by-product coke industries, fuel, coke, ores, fluxes, etc.

The subject of the master's scientific research: mercury and its compounds in the composition of fuel, ores, fluxes, etc.

In connection with this, the objectives of the master's work can be formulated as follows:

1. Study and systematization of theoretical studies on the chemical properties of mercury, study of the processes of mercury compounds entering the emissions of metallurgical enterprises.

2. Investigation of the possibility of using the method of atomic-absorption determination of mercury content in raw materials and products of blast-furnace production.

3. Comparative analysis of experimental data on the content of mercury in raw materials and production products for 5 years.

At enrichment of coals in concentrates 50–60 % Hg passes. Mercury in concentrates is represented by organic Hg_{org} and micromineral pyrite – Hg_p. These two forms of mercury are dominant; their ratio determines the distribution of Hg in coal.

With large volumes of blast-furnace production, this can be a significant source of mercury releases to the environment.

Bibliography:

1. Вредные вещества в промышленности. Справочник для химиков, инженеров и врачей. Изд. 7-е, пер. и доп. В трех томах. Т. 3. Неорганические и элементоорганические соединения. Под ред. Лазарева Н.В. и Гадалкиной И.Д. – Л.: Химия. – 1977. – 608 с.

2. Симонова Л.М., Брускина И.М., Иванов В.М. Концентрирование ртути при выделении ее в объектах окружающей среды. Обзор. // Журн. аналит. химии. – 1989. – 44, № 4.-С. 582.

3. Аналитическая атомно-абсорбционная спектроскопия: А48 Учебное пособие / Алемасова А.С., Рокун А.Н., Шевчук И.А. – Севастополь: «Вебер», 2003. – 327 с.

4. Эльевич Я.Ю., Петровна М.К. Ртуть в углях – серьезная экологическая проблема. Режим доступа: <http://www.biosphere21century.ru/articles/183>

IMPEDANCE CHARACTERISTICS OF VOLTAMMETRIC ENANTIOSELECTIVE SENSORS BASED ON POLYARYLENEPHTHALIDES AND CYCLODEXTRINS*Sharipov D. R., Kabirova L. R., Dubrovsky D. I.*

Bashkir State University, Ufa

minikor@list.ru

The voltammetric method of analysis introduces rigid requirements to the surface of the working electrode, the state of which directly depends on the reproducibility of the results of the analysis. Nowadays there are popular methods of studying surface morphology, such as AFM, SEM. These methods require highly qualified personnel and expensive equipment. An alternative to surface research is the spectroscopy of electrochemical impedance.

Electrochemical impedance spectroscopy is a highly sensitive method that makes it possible to evaluate the state of the electrode surface in the form of simple equivalent electrical circuits.

In this study, composite voltammetric sensors based on glassy carbon electrodes were studied. As composites were used a conductive polymer film of polyarylenephthalides (PAF) and α -, β - and γ -cyclodextrins (CD). Composite modifiers based on cyclodextrins under voltammetry conditions allow to recognize the enantiomers of biologically active substances, such as propranolol, tryptophan, etc. Impedance characteristics of the proposed composites were carried out in a solution of $\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-/3-}$ as in a standard solution. The working conditions for recording the impedance spectra and deposition of polymer films were selected (Fig.).

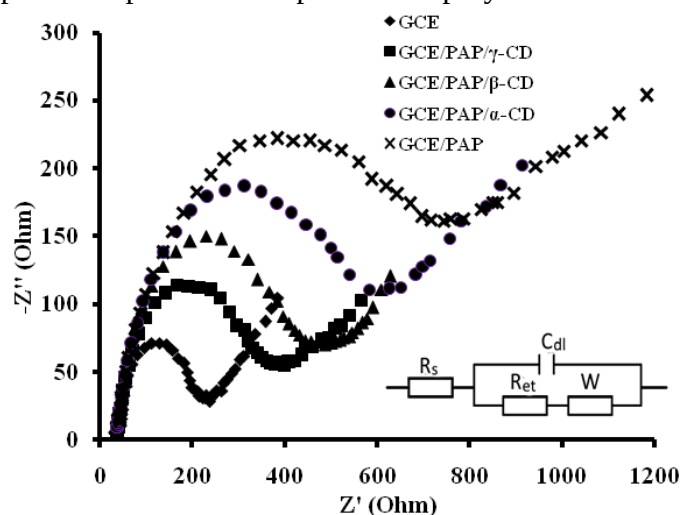


Fig. Impedance spectra recorded on modified GCE in a solution of $\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-/3-}$

As seen from Fig. the lowest resistance of electron transfer was observed on the bare electrode, and the largest - on the electrode covered by PAF. The spectra of electrodes modified by cyclodextrins were located between them, and the resistance to electron transfer decreased from gamma to alpha. We assume that this is possibly associated with different cavity sizes in the structure of cyclodextrins.

This work was supported by the Russian Science Foundation (Grant No. 16-13-10257).

ТЕСТ-МЕТОД ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ РОДІЮ(III)

Швиденко А. Р., Худякова С. М.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

shvydenko@cf.dnu.dp.ua

Збільшення попиту на платинові метали пов'язано з розвитком сучасних хімічних технологій, використанням наноматеріалів в різних сферах, включаючи медицину. Родій застосовується в електроніці і електротехніці у вигляді різних сплавів, а також зносостійких і корозійностійких покриттів; у гомогенному і гетерогенному каталізі, у тому числі в каталітичних фільтрах-нейтралізаторах вихлопних газів автомобілів; при виробництві скла (сплав платина-родій – фільтри для скляних ниток) для рідкокристалічних екранів і дзеркал для потужних лазерних систем, а також для виробництва дифракційних ґраток спектральних приладів.

У ході роботи з продуктами переробки вторинної сировини часто доводиться стикатися з сульфатними розчинами, в яких метали платинової групи існують у вигляді кінетично інертних сульфатних комплексів, що особливо характерно для Родію. Спосіб переведення Rh(III) в реакційноздатний стан багато в чому залежить від типу реагента, що використовується у різних методах визначення даного йону і в сорбційних методах зокрема. Відомо, що у розчинах сульфату родію(III) в залежності від концентрації кислоти та Rh(III) останній може утворювати різноманітні хімічні форми, серед яких є як моноядерні, у тому числі аніонні, так і дуже стійкі полімерні аквагідроксосульфати. Аналіз літератури підтверджує доцільність застосування поверхнево-активних речовин (ПАР) як для активації інертних хімічних форм родію(III), так і для підвищення чутливості його спектрофотометричного визначення.

У даній роботі як вихідну матрицю використовували пінополіуретан (ППУ), таблетку якого масою 10 мг модифікували послідовною обробкою 5 мМ лужним розчином 3-метил-2,6-димеркапто-1,4-тіопіроу (МДТ) 1 М HCl, після чого ретельно промивали дистильованою водою, віджимали між аркушами паперового фільтру, висушували до повітряно-сухого стану та зберігали у закритому скляному бюксі. Сорбційну ємність ППУ за МДТ, яка склала 39,5 мкмоль/г, встановлювали за матеріальним балансом після сорбції йонів Ag(I), які у кислому середовищі утворюють комплекс тільки зі співвідношенням Ag(I) : МДТ = 1 : 1. При цьому надлишок несорбованого Ag(I) визначали як методом оборотного титрування з амперометричною індикацією точки еквівалентності, так і атомно-абсорбційним методом.

Встановлено, що у розчинах сульфатних комплексів родію(III) у середовищі хлоридної або сульфатної кислоти сорбент змінював своє забарвлення з жовтого на оранжеве. Оптимальні умови візуального та кольориметричного визначення Rh(III) у форматі RGB було обрано на підставі цифрових зображень поверхні сорбенту, отриманих за допомогою планшетного сканера. Оптимальна кислотність відповідала 1–3 М HCl, час контакту фаз – 10 хв. На підставі атомно-абсорбційного контролю сорбції Rh(III) за цих умов побудовано ізотерму сорбції (С-типу), за якою встановлено сорбційну ємність ППУ за Rh(III) (40 мкмоль/г).

Розроблено тест-шкалу та відповідну методику візуального напівкількісного визначення Rh(III) в сульфатних електролітах після родіювання та промивних водах відповідних гальванопокриттів в інтервалі 0.25–16 мг/л в 10 мл проби наважкою сорбенту масою 10 мг. Запропоновано методику кількісного визначення Rh(III) в інтервалі 0.25–18 мг/л за інтенсивністю R-каналу методом градуального графіку, рівняння якого має вид ($y = R; x = \lg C$): $y = -18.719x + 234$ ($r^2 = 0.9734$). Дана методика була апробована в аналізі реального зразку промивної води гальванопокриттів після родіювання методом електрографії (s_r не перевищувало 0.06).

IMPEDANCE CHARACTERISTICS OF VOLTAMMETRIC ENANTIOSELECTIVE SENSORS BASED ON POLYELECTROLYTE COMPLEXES AND CYCLODEXTRINS

Shirokova E. E., Kabirova L. R., Dubrovsky D. I.

Bashkir State University, Ufa

pyatka-lena@mail.ru

The voltammetric method of analysis is one of the most sensitive in electrochemistry. One of the most important factors affecting both the sensitivity and the correctness of the analysis is the monitoring of the surface of the working electrode. The main methods for evaluating surface morphology are various kinds of microscopy, such as atomic force and scanning electron microscopy, however this equipment is expensive and requires special sample preparation. An alternative method for estimating the surface in electrochemistry is the spectroscopy of electrochemical impedance.

Electrochemical impedance spectroscopy is a highly sensitive analytical method capable of quite informative assessment of the surface state of a working electrode in the form of simple electrical equivalent circuits. In this paper, the characteristics of voltammetric sensors based on the glassy carbon electrodes (GCE) modified by composites of polyelectrolyte complexes of chitosan (CS) and chitosan succinamide (SCS) with cyclodextrins (CD) were demonstrated. These sensors, due to the structure of the applied composite, are able to selectively interact with the enantiomers of biologically active substances, such as atenolol, methionine, etc. The working conditions for recording the impedance spectra and applying a composite coating to the working electrode surface were established in the course of this study.

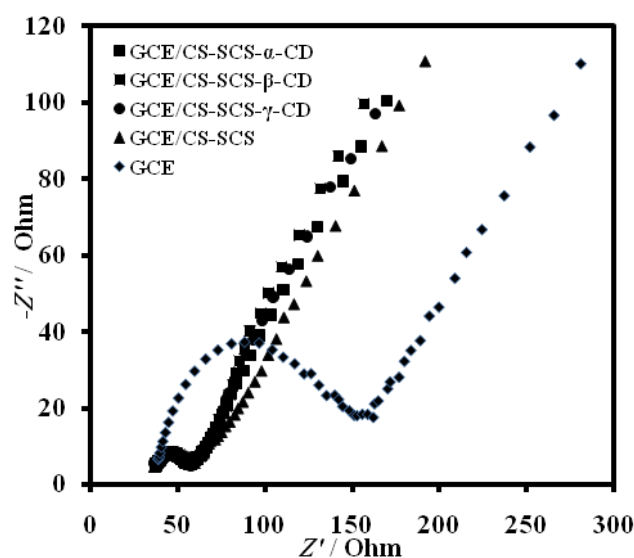


Fig. Impedance spectra for GCE/CS-SCS-CD

It can be seen from the figure that the resistance of electron transfer was much less for GCE, modified by CS-SCS-CD composite film compared to the bare GCE, perhaps this is related to the structure of the CS-SCS polyelectrolyte complex. It can also be noted that there is no difference in the resistance of electron transfer between the modified electrodes.

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (Grant No. 17-43-020232 p_a).

**VOLTAMMETRIC SENSOR SYSTEM FOR THE RECOGNITION
OF ENANTIOMERS OF PROPRANOLOL IN PHARMACEUTICAL FORMS**

Yarkaeva Yu. A., Zilberg R. A., Khabletdinova A. I., Provorova Yu. R.

Bashkir State University Russia, Republic of Bashkortostan, 450076. Ufa, Zaki Validi, 32
julijajarkaeva05@gmail.com

With the development of ideas about the role of stereoisomers in biochemical processes and the widespread use of drugs on their basis, it became clear that along with the simplicity of sample preparation, availability and cheapness of devices, analysis time, the applicability of analytical methods will largely depend on their ability to recognize the optical isomers of active substances.

In this paper, we studied the possibility of using voltammetric sensors and a sensor system based on glassy carbon electrodes modified with polyarylenephthalide composites with melamine, cyanuric acid and β -cyclodextrin to recognize the enantiomers of propranolol in dosage forms containing auxiliary substances. Using the chemometric method of principle components analysis it was shown that in order to reliably recognize the enantiomers of propranolol, it is necessary to take into the entire voltammetric curve.

The possibilities of a voltammetric sensor system based on polyarylene phthalide modified with composites with melamine, cyanuric acid and β -cyclodextrin of glass-carbon electrodes for express recognition of propranolol R- and S-enantiomers in pharmaceutical forms with various auxiliary substances content (lactose, sucrose, starch, talc and calcium stearate). The influence of the content of the main component and auxiliary substances, the conditions for recording voltammograms on their characteristics, the probability of recognition of the enantiomers of propranolol in pharmaceutical forms is estimated.

To study the sensitivity of the developed sensors, measurements were made in a series of solutions of enantiomers of propranolol with a known concentration in the range 0.005–1.350 mM. The calibration function was linear in most cases in the range from 0.021 to 0.675 mM, the detection limit in solutions of enantiomers $(5.28\text{--}8.37) \cdot 10^{-6}$ M, in pharmaceutical forms $(1.17\text{--}5.37) \cdot 10^{-5}$ M.

Thus, the developed enantioselective voltammetric sensors based on polyarylene-phthalide composites of α -, β -cyclodextrins, melamine and cyanuric acid are sensitive to enantiomers of propranolol in multicomponent solutions containing auxiliary substances of ready-made pharmaceutical forms. It has been experimentally proved that the use of an array of cross-sensitive chemical sensors in combination with chemometric data processing makes it possible to recognize the enantiomers of propranolol with a probability of not less than 90 %. This allows them to be used for the rapid analysis of dosage forms without separating the constituents of their ingredients, which is preferable, as this reduces the losses of the analytes, reduces the number of operations, the analysis time and the consumption of reagents.

This work was supported by the Russian Science Foundation: Grant No. 16-13-10257.

**BIOCHEMISTRY /
БІОХІМІЯ**

СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ N-КОНЦЕВОГО ДОМЕНА ФАКТОРА ЭЛОНГАЦИИ ТРАНСЛЯЦИИ eEF1B β

*Бондарчук Т. В.¹, Шалак В. Ф.¹, Ложко Д. М.¹, Фатальска А.²,
Щепановский Р. Г.³, Капустян Л. М.¹*

¹Институт молекулярной биологии и генетики НАН Украины, г. Киев, Украина

²Институт молекулярной и клеточной биологии ПАН, г. Варшава, Польша

³Институт биохимии и биофизики ПАН, г. Варшава, Польша

t.v.trosiuk@gmail.com

Фактор элонгации трансляции eEF1B β – это характерный для многоклеточных организмов белок, который входит в состав макромолекулярного комплекса eEF1B. Его функцией является обмен гуанинового нуклеотида и, соответственно, восстановление активной ГТФ-формы фактора элонгации трансляции 1A (eEF1A), который в свою очередь связывает и доставляет аминокислотированную т-РНК к А сайту рибосомы. Структура каталитического С-концевого домена eEF1B β была определена с помощью ЯМР. Однако структура N-концевого домена, который вовлечен в белок-белковые взаимодействия с партнерами в комплексе eEF1B, остается неизвестной.

Целью нашего исследования было изучение структурных особенностей и построение пространственной модели N-концевого домена eEF1B β .

N-концевой домен eEF1B β , включающий аминокислоты 1-77 (eEF1B β (1-77)), был синтезирован в бактериях, очищен с помощью аффинной хроматографии и гель-фильтрации. Полученный белок был охарактеризован при помощи гель-электрофореза в денатурирующих условиях, аналитической гель-фильтрации и аналитического ультрацентрифугирования. Для получения информации о вторичной структуре белка использовали метод кругового дихроизма. Для оценки компактности третичной структуры eEF1B β (1-77) был проведен масс-спектрометрический анализ кинетики водородно-дейтериевого обмена. Моделирование 3D структуры eEF1B β (1-77) было проведено с помощью программы I-TASSER и ModRefiner. На основании экспериментальных данных и компьютерного моделирования мы сделали вывод, что eEF1B β (1-77) имеет динамичную пространственную структуру, состоящую из трёх α -спиральных и двух неупорядоченных участков. Таким образом, N-концевой домен eEF1B β обладает лабильной пространственной организацией, которая может обеспечивать универсальное взаимодействие с многосисленными трансляционными и нетрансляционными партнерами этого белка в клетке.

АКТИВНІСТЬ АМІНОКСИЛЬНИХ РАДИКАЛІВ В РЕАКЦІЯХ ВІДРИВУ АТОМА ВОДНЮ ВІД α -С-Н ЗВ'ЯЗКІВ У СПИРТАХ

Гордєєва І. О.¹, Куш О. В.², Компанець М. О.³, Шендрик О. М.¹, Опейда Й. О.²

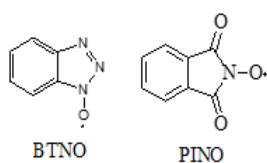
¹Донецький національний університет імені Василя Стуса

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

³Відділення фізико-хімії горючих копалин ІнФОВ ім. Л. М. Литвиненка НАН України
i.hordieeva@donnu.edu.ua

Селективне окиснення спиртів молекулярним киснем з використанням *N*-гідроксиімідних органічних каталізаторів лежить в основі багатьох ефективних методів «зеленої» хімії з отримання карбонільних сполук. Механізми цих радикальних процесів є багатостадійними і відбуваються за участю аміноксильних радикалів, які є ключовими активними інтермедіатами. Для опису механізму, моделювання і проектування таких перетворень необхідне дослідження їх елементарних реакцій, а також встановлення зв'язку «структура реактантів - реакційна здатність».

У даній роботі вивчено кінетику реакцій відриву Н-атома аміноксильними радикалами від α -С-Н зв'язків бензилових спиртів з електронодонорними і електроноакцепторними замісниками в ароматичному кільці. Радикали бензотріазол-*N*-оксид (BTNO) та фталімід-*N*-оксид (PINO) генерували за реакцією окиснення відповідних *N*-гідроксиімідів 1-гідроксибензотріазолу (НВТ) і *N*-гідроксифталіміду (NHPI) йодбензол діацетатом (PhI(OAc)₂) в ацетонітрилі та слідували за їх концентрацією за характерними смугами поглинання в УФ-видимій області спектру. При взаємодії аміноксильних радикалів з бензиловими спиртами відбувається утворення алкільних радикалів з регенерацією *N*-гідроксиімідів.



Константи швидкості реакції відриву Н-атома аміноксильними радикалами від α -С-Н зв'язків бензилових спиртів з електроноакцепторними (4-NO₂, 4-Cl) та електронодонорними (4-CH₃, 4-CH₃O, 3,4-(MeO)₂) замісниками (k_{obs} , s⁻¹) було виміряно за умов псевдо першого порядку методом УФ-спектроскопії при $\lambda_{\text{max}} = 474$ нм для BTNO та $\lambda_{\text{max}} = 382$ нм для PINO. Абсолютні константи швидкості реакції другого порядку відриву Н-атома (k_{H} , M⁻¹×s⁻¹) були розраховані із залежностей k_{obs} від концентрацій субстратів з використанням 7-8 значень k_{obs} (див. рис.).

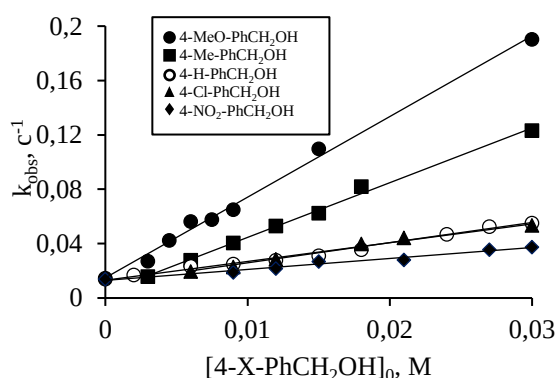


Рис. Залежність спостережуваної константи швидкості реакції BTNO з заміщеними бензиловими спиртами від концентрації останніх. ([НВТ]₀ = 3×10⁻³ М, [PhI(OAc)₂]₀ = 3×10⁻⁴ М, [4-Х-PhCH₂OH]₀ = 0.003÷0.03 М).

Реактивність бензилових спиртів в реакціях відриву атома водню аміноксильними радикалами зростає в ряді: 4-NO₂PhCH₂OH < 4-ClPhCH₂OH < PhCH₂OH < 4-MePhCH₂OH < 4-MeOPhCH₂OH < 3,4-(MeO)₂PhCH₂OH. Отримані результати демонструють хорошу кореляцію Гаммета (lg k_{H} від σ^+) з від'ємними значеннями ρ , що свідчить про значний вплив полярних структур в перехідному стані реакцій.

Показано, що PINO є значно активнішим в реакціях відриву Н-атома бензилових спиртів порівняно з BTNO, що пояснюється більшою енергією дисоціації О-Н зв'язку в NHPI (88 для NHPI та 85 ккал/моль для НВТ).

СТАБІЛЬНІ ІМІНОКСИЛЬНІ РАДИКАЛИ В РЕАКЦІЯХ ПЕРЕНОСУ Н-АТОМА

Зосенко О. О.¹, Куц О. В.², Компанець М. О.³, Шендрик О. М.¹

¹Донецький національний університет імені Василя Стуса

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

³Відділення фізико-хімії горючих копалин ІнФОВ ім. Л. М. Литвиненка НАН України
o.zosenko@donnu.edu.ua

Актуальність розробки каталітичних систем на основі оксимів, зокрема віолурової кислоти, має особливе значення в контексті окиснювальної деградації лігніну. Цей природний полімер є потенціальним відновлювальним джерелом для промислового отримання цінних хімікатів. Системи на основі оксимів і *N*-гідроксиімідів каталізують перетворення лігніну в низькомолекулярні ароматичні сполуки.

У даній роботі окиснення оксимів - 3-(гідроксиіміно)пентан-2,4-діону (ГПД) та віолурової кислоти (ВК) органічним окисником йодбензол ди(трифторацетатом) в розчині ацетонітрилу отримано відповідні іміноксильні радикали (I) та (II). В УФ-видимій області спектру радикали мають характерні смуги поглинання ($\lambda_{\max} = 410$ нм для I та $\lambda_{\max} = 425$ нм II), які відтворюються без суттєвих змін на протязі декількох годин.

Це вказує на значну стабільність отриманих радикалів, яка пояснюється наявністю мезомерних структур – спінова густина в радикалах розподілена на C=N-O фрагменті. Як донори Н-атому і моделі лігнінових структур використано бензилові спирти з електродонорними та електроакцепторними замісниками в бензольному кільці (X = 3,4-(MeO)₂, 4-MeO, 4-Me, 4-H, 4-Cl, 4-NO₂).

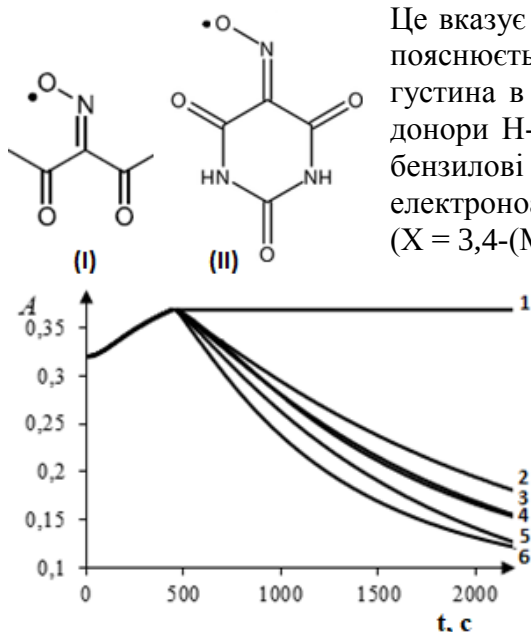
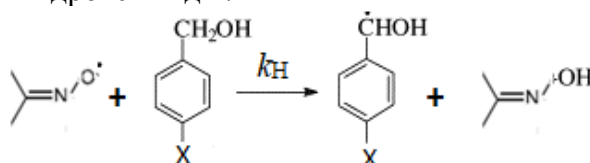


Рис. Кінетичні криві витрачання іміноксильного радикала ВК при 30 °С у відсутності (1) та при додаванні бензилових спиртів 4-X-PhCH₂OH (0,018 М): NO₂ (2); Me (3); H (4); Cl (5); CH₃O (6); кінетику досліджено за зміною величини абсорбції (А) при $\lambda_{\max} = 425$ нм

величиною ρ для реакцій за участю радикала II. Бензилові спирти з донорними замісниками значно швидше реагують з іміноксильними радикалами, ніж спирти з акцепторними замісниками. Цей факт вказує на електрофільний характер досліджуваних радикалів і розділення зарядів у перехідному стані реакції відриву Н-атома.

Методом УФ-спектроскопії визначено константи швидкості (k_H , л/(моль×с)) реакцій відриву атома водню іміноксильними радикалами від С-Н зв'язків бензилових спиртів з утворенням С-центрованих радикалів та регенерацією вихідних оксимів. Така реакція є ключовою в каталітичних процесах окиснення органічних сполук молекулярним киснем за участю оксимів та *N*-гідроксиімідів.



Показано, що полярні ефекти мають важливе значення в досліджуваних реакціях. Про це свідчать задовільна кореляція Гаммета ($\log k_X/k_H = \rho\sigma^+$) з від'ємною

IN VITRO АНТИОКСИДАНТНА АКТИВНІСТЬ РОСЛИННИХ ЕКСТРАКТІВ

Кондратенко К. О.¹, Зосенко О. О.¹, Гордєєва І. О.¹, Куш О. В.²

¹Донецький національний університет імені Василя Стуса

²Відділення фізико-хімії горючих копалин ІнФОВ ім. Л. М. Литвиненка НАН України
kondratenko.k@donnu.edu.ua

В останні роки велика увага приділяється вивченню антиоксидантної активності (АОА) екстрактів лікарських рослин, які знаходять широке застосування в офіційній та народній медицині і косметичі. У багатьох випадках виявлена висока антиоксидантна активність екстрактів рослин, яка може вносити істотний внесок в їх лікувальний ефект. Показано, що АОА екстрактів пов'язана з наявністю в них поліфенолів, у тому числі, танінів і флавоноїдів, які поєднують низьку токсичність зі здатністю ефективно пригнічувати процеси вільнорадикального окислення в живих організмах.

Предметом дослідження даної роботи були антиоксидантні властивості екстрактів лимону, м'яти, чорниці, алое, арніки, лаванди. Для досліджень використовували їх водні і спиртові розчини. На підставі проведених якісних реакцій було встановлено наявність в екстрактах карбонових кислот, флавоноїдів: флавонів, флавонолів, флавононолів, ізофлавонів, флавонолів з вільною 3-ОН групою, флавоноїдів, які мають дві оксигрупи у С-3, С-5, антрохінонів, халконів, ауронів.

Сумарний вміст фенольних сполук визначали спектрофотометричним методом з реактивом Folin-Ciocalteu, який заснований на відновленні екстрактів фосфорновольфрамовою і фосформолібденовою кислотами в лужному середовищі і є основним методом для визначення загального фенольного індексу в лікарській рослинній сировині та харчових продуктах. Кількісне визначення суми поліфенолів проведено в перерахунку на галлову кислоту. Показано що м'ята, арніка та лимон у своєму складі мають найбільшу кількість фенольних сполук. При визначенні вітаміну Р в рослинних екстрактах було показано, що найкращі показники були у м'яти, алое і лаванди.

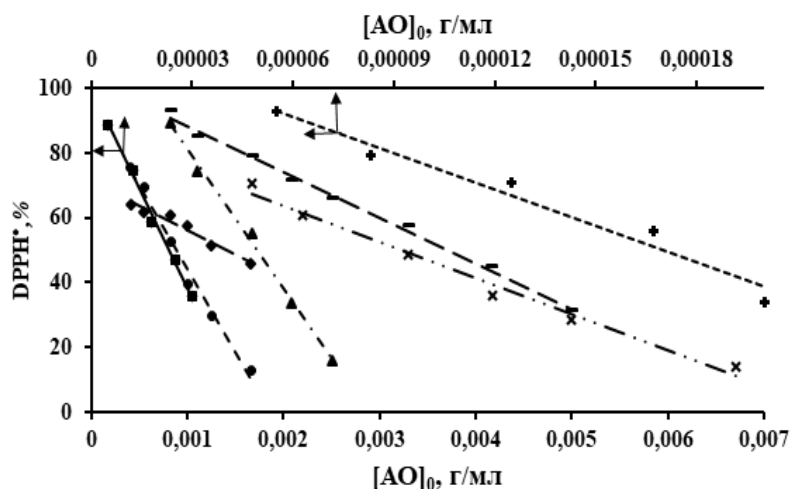


Рис. Залежність глибини перетворення DPPH•, % в перші 30 хв від концентрації антиоксиданта. 1 – аскорбінова кислота, 2 – алое, 3 – арніка, 4 – лаванда, 5 – лимон, 6 – чорниця, 7 – м'ята. $T = 30\text{ }^{\circ}\text{C}$, $\lambda = 517\text{ нм}$

Досліджено антирадикальну активність (АРА) етанольних рослинних екстрактів за реакцією з стабільним радикалом DPPH• (дифенілпікрілгідразил) та отримано значення ефективних концентрацій ЕС₅₀ антиоксидантів (див. рис.). Встановлено, що найбільшу АРА мають екстракти алое та м'яти.

рН-ОПТИМУМ ФЕРМЕНТНОГО ПРЕПАРАТУ «LACCASE FROM TRAMETES VERSICOLOR»

Конкіна Я. С., Лесишина Ю. О., Цяпало О. С., Шендрик О. М.

Донецький національний університет імені Василя Стуса
konkina.i@donnu.edu.ua

Лакказа (КФ 1.10.3.2, *n*-дифенол: кисень оксидоредуктаза) входить до складу лігнолітичного ферментного комплексу дереворуйнуючих грибів. Особливі каталітичні властивості і широка субстратна специфічність лаккази зумовлюють її застосування у різноманітних біотехнологічних процесах. На сьогоднішній день промисловість випускає комерційні препарати лаккази різного ступеню очищення та концентрування, що в свою чергу може відображатись у відмінностях фізико-хімічних властивостей ферменту (його рН-оптимуму, термолабільності, термостабільності тощо).

Мета даної роботи полягала у визначенні рН-оптимуму комерційного ферментного препарату «*Laccase from Trametes versicolor*» (фірми «Sigma», Німеччина).

Вплив рН середовища на активність ферменту досліджували, вивчаючи кінетику реакції лакказного окиснення гідрохінону (ГХ) молекулярним киснем в діапазоні рН 3,0–5,6 одиниць з кроком 0,2 за допомогою методу UV-VIS-спектрофотометрії. Реакцію проводили у цитратній буферній системі, яку одержували змішуванням різних об'ємів 0,1 М розчину лимонної кислоти та 0,1 М тринатрієвої солі лимонної кислоти. ГХ попередньо очищали методом сублімації. Розчини ГХ і лаккази змішували безпосередньо в кюветі спектрофотометру; концентрації ГХ в реакційній суміші в початковий момент часу змінювали в інтервалі від 10^{-5} до 10^{-4} М, концентрація ферменту була постійною і становила 60 мг/л. Зміну концентрації ГХ визначали за зменшенням максимуму поглинання внаслідок окиснення субстрату при 290 нм (ϵ_{290} (ГХ) = 2947 л/моль·см) за атмосферного тиску та температури 35 °С протягом 900 сек.

Початкову швидкість реакції окиснення ГХ визначали як тангенс кута нахилу початкової прямолінійної ділянки кінетичної кривої; максимальну швидкість (V_{max}) та константу Міхаеліса розраховували, виходячи з рівняння Міхаеліса-Ментен, лінеаризованого у подвійних обернених координатах Лайнуівера–Берка.

Залежність V_{max} реакції лакказного окиснення ГХ молекулярним киснем від рН реакційної суміші представлена на рисунку:

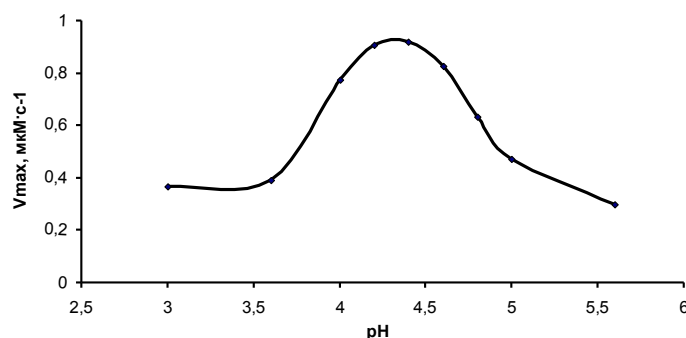


Рис. Залежність максимальної швидкості лакказного окиснення ГХ молекулярним киснем від рН середовища ($T = 35\text{ }^{\circ}\text{C}$)

Як видно з рисунку, крива залежності швидкості лакказного окиснення ГХ молекулярним киснем від рН має дзвоноподібний вигляд, що відповідає літературним даним. рН-оптимум ферментного препарату «*Laccase from Trametes versicolor*» в реакції окиснення ГХ знаходиться в інтервалі 4,2–4,6.

АНТИОКСИДАНТНА АКТИВНІСТЬ ЕКСТРАКТІВ КОМЕРЦІЙНИХ ЧАЇВ

Ляшук О. С.¹, Гордєєва І. О.¹, Зосенко О. О.¹, Куш О. В.²

¹Донецький національний університет імені Василя Стуса

²Відділення фізико-хімії горючих копалин ІнФОВ ім. Л. М. Литвиненка НАН України
olia.shuk@mail.ru

За нормальних умов функціонування організму рівень активних форм кисню, які впливають на загальний стан і тривалість життя, підтримується на оптимальному рівні, завдяки наявності складної, багаторівневої системи антирадикального захисту. Її складовою є антиоксиданти (АО) прямої дії, які регулюють квазістаціонарні концентрації активних радикалів і зменшують утворення агресивних перекисних сполук. Природні антиоксиданти містяться у фруктах, овочах, напоях, у тому числі чаях. Найпоширенішими серед них є: поліфеноли, флаванолі, гідроксил-4-флаванолі, антоціани, флавони, флавонолі та фенольні кислоти, а також кофеїн, теобромін і теофілін, теанін. Характеристичні АО чаїв - це флаванолі, переважно катехіни (флаван-3-ол), кверцетин, кемпферол, мірецетин, вітаміни груп Е, К, А, В.

У даній роботі досліджено антиоксидантну активність шести комерційних екземплярів чорного та зеленого чаїв. Визначено антирадикальну активність (АРА) етанольних екстрактів чаїв в реакції з ДФПГ-радикалом та отримано значення ефективних концентрацій ЕС₅₀ антиоксидантів. Серед досліджених екстрактів найбільшу АРА мають екстракти чаїв – зелений чай «Exclusive Gun Powder» та чорні чаї такі як «Майський», «Чай чорний», «Принцеса Гіта». Визначення поліфенолів чаю (в еквіваленті галлової кислоти) проводили в реакції їх окиснення реактивом Фоліна-Чокальте. Найбільший вміст фенольних сполук виявлено в зеленому чаї «Exclusive Gun Powder», а найменший – в чорному «Перший ряд».

Ці висновки збігаються з даними щодо вмісту вітаміну Р, визначеного методом перманганатометричного титрування. Отримані результати добре узгоджуються між собою і свідчать про те, що найбільший вміст поліфенольних сполук і, відповідно, найбільшу антиоксидантну активність демонструє зелений чай «Exclusive Gun Powder», а чорний чай «Перший ряд» значно відрізняється від усіх представлених досліджуваних екземплярів. Більше значення антиоксидантної активності зеленого чаю зумовлено, в першу чергу, наявністю більшої кількості катехінів та флавоноїдів, на відміну від чорного чаю через особливості обробки чайного листа, а саме – відсутності стадії ферментації.

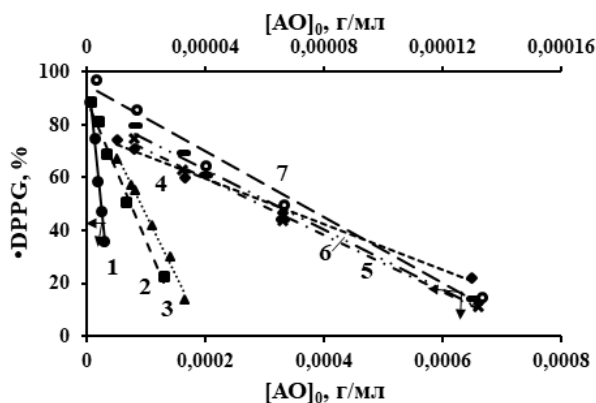


Рис. Залежність глибини перетворення DPPH*, % в перші 30 хв від концентрації антиоксиданта. 1 – аскорбінова кислота, 2 – чай чорний «Чай чорний», 3 – чай зелений «Exclusive Gun Powder», 4 – чай чорний «Гірський цейлон», 5 – чай чорний «Перший ряд», 6 – чай чорний «Майський», 7 – чай чорний «Принцеса Гіта»

PHYSICOCHEMICAL COMPARISON OF CHITIN AND CHITOSAN OBTAINED FROM TWO MUSHROOM SPECIES (*BOLETUS BOVINUS* AND *LACCARIA LACCATA*)

*Oberemko A.*¹, Salaberria A. M.², Baublys V.¹, Labidi J.²

¹Vytautas Magnus University, Department of Biology, Vileikos 8, 44248, Kaunas, Lithuania

²University of the Basque Country (UPV/EHU), Department of Chemical and Environmental Engineering, Biorefinery Processes Research Group, Plaza Europa 1, 20018 Donostia-San Sebastian, Spain

Alona.oberemko@vdu.lt

Chitin is the second most plenteous polysaccharide in nature after cellulose, present as supporting material in exoskeletons of insects, crustacean shells and in the cell wall of mushrooms. The lack of solubility of chitin makes it necessary to modify the molecule for most of its applications. It is known that chitins and chitosans from different sources exhibit different physicochemical properties and these different properties expand the application area of these biomaterials. The aim of present study was to determine and to compare physicochemical properties of chitin and chitosan from two mushroom species (*Boletus bovinus* and *Laccaria laccata*).

Chitin was obtained from the cell wall of two different mushroom species using chemical method which included following steps: 1 – glucan extraction, 2 – demineralization in solution of hydrochloric acid to remove inorganic compounds, 3 – deproteinization in solution of sodium hydroxide, 4 – depigmentation and bleaching. For chitosan production the chitin samples were refluxed with 60 % NaOH at 130 °C for 4 hours under a N₂ atmosphere. The chitins and chitosans were characterized by attenuated total reflectance-Fourier transform infrared spectroscopy (ATR-FTIR), elemental analyses (EA), nuclear magnetic resonance spectroscopy (NMR), thermogravimetric analyses (TGA) and X-ray diffraction (XRD).

The dry weight chitin contents of the mushroom species were determined as 8.5 % for *L. laccata* and 6.2 % for *B. bovinus*. Chitosan yields of the chitins isolated from *B. bovinus* and *L. laccata* were 70.9 % and 64.3 %, respectively. ATR-FTIR spectra analysis demonstrated the characteristic bands of the chitin and chitosan molecules. While, the maximum degradation temperatures of *B. bovinus* and *L. laccata* chitins were found to be 380 °C and 363 °C by TGA, the maximum degradation temperatures of *B. bovinus* and *L. laccata* chitosans were recorded as 317 °C and 309 °C, respectively. The crystallinity index values of *B. bovinus* and *L. laccata* chitins were calculated as 85 % and 78 %, respectively according to the X-ray diffraction analysis results. Degree of acetylation (DA) determined by EA and NMR was found to be 90±5 and 92±4 for chitin from *L. laccata*, 93±5 and 94±4 for chitin from *B. bovinus*, respectively.

Mushroom chitin demonstrated typical patterns of α -chitin with high acetylation degree, but the thermal stability of chitin from *L. laccata* was lower than from *B. bovinus*. The results of this study revealed that *L. laccata* had higher chitin content than *B. bovinus*, and these species may be used as a potential chitin source with appropriate physicochemical properties (chemical structure, thermal stability, crystallinity index, degree of acetylation) for possible biomedical application (for example, chitosan films).

ВПЛИВ СИНТЕТИЧНИХ МИЮЧИХ ЗАСОБІВ НА ВМІСТ МАЛОНОВОГО ДІАЛЬДЕГІДУ В ТКАНИНАХ *CYPRINUS CARPIO L.*

*Симонова Н. А.*¹, Маковійчук Т. В.¹, Іванова Т. Д.²

¹Національний університет "Чернігівський колегіум" імені Т. Г. Шевченка
вул. Гетьмана Полуботка, 53, м. Чернігів, 14013, Україна

²ліцей №15 м. Чернігова
sna_1994@ukr.net

Приріст малонового діальдегіду (МДА) в тканині відображає швидкість перекисного окиснення ліпідів (ПОЛ) [Технічна енциклопедія TechTrend, 2017]. ПОЛ головним чином відбувається в ліпідних структурних мембранах. Ліпіди активно зв'язують вільні радикали та інші перекиси в антиоксидантній системі організму (АОС). Ліпіди є основою всіх внутрішньоклітинних мембран, а також відіграють важливу роль в метаболізмі клітин. Злагоджений перебіг найважливіших процесів в клітині, відображає нормальне функціонування організму, при порушенні гармонійної взаємодії цих процесів, може свідчити про патології або стрес, що діє на організм [Потрохов та ін., 2009]. Поверхнево активні речовини (ПАР) широко застосовуються у господарській діяльності та побуті [Грабовська та ін., 2016]. Синтетичні ПАР є основними компонентами більшості препаратів побутової хімії, особистої гігієни та косметично-парфумерних засобів. Синтетичні миючі засоби (СМЗ) є складними хімічними композиціями, основними інгредієнтами яких є поверхнево-активні речовини (ПАР) [Гуралюк та ін., 2017].

Мета роботи – дослідження впливу синтетичних миючих засобів на вміст малонового діальдегіду в тканинах *Cyprinus carpio L.*

Три основні піддослідні групи були розділені за принципом: контроль, вплив лаурилсульфатвмісного синтетичного миючого засобу без вмісту фосфатів та група фосфатів, концентрація досліджуваних токсичних речовин, відповідає 5 ГДК. У кожній групі по 5 тварин. У дослідженнях використали зразки мозку, зябер, печінки, скелетних м'язів, одержані від дворічок лускатого коропа. Зразки тканин і органів отримували відразу після декапітації виловлених риб, і визначали в них вміст малонового діальдегіду. Концентрацію МДА визначали за методом Uchiyama M., Mihara M. Рівень МДА у тканинах вимірювали за допомогою спектрофотометру при довжині хвилі 532 нм. Дослідження проводили взимку 2017 р., в лабораторії екологічної біохімії Національного університету «Чернігівський колегіум» імені Т. Г. Шевченка.

За результатами отриманих даних встановлено, що вміст продуктів перекисного окиснення ліпідів у досліджуваних органах і тканинах коропа змінюється за таким показником: за дії фосфату, найбільше зазнають впливу білі м'язи, де зміна становить 121 %, найменший показник в даній групі – печінка, відсотковий показник 68 %, дані порівнюються з показниками контрольної групи. Аналізуючи дію безфосфатного лаурилсульфатвмісного токсиканту прослідковуємо схожі показники до групи фосфатів, з точки зору впливу на тканини, а саме: 151 % зміна у білих м'язах, і вона є найбільшою, а найменший показник виявлено у печінці – 88 %. Щодо зябер і мозку, то відсоток змін такий: група фосфату, зміна 105 % та 108 %, без фосфатний СМЗ – 125 % та 110 % порівняно з контролем.

Експеримент з внесенням безфосфатного СМЗ та фосфату уводу акваріумів, у дворічок коропа призводить до зростання вмісту продуктів перекисного окиснення ліпідів та до зменшення показників АОС. Організм риб чітко ілюструє інтенсивність процесів перекисного окиснення ліпідів у білих м'язах, що є найвищою, та у печінці – найнижчою.

КІНЕТИКА ТА МЕХАНІЗМ ЦИКЛІЧНИХ ОКИСНО-ВІДНОВНИХ ПЕРЕТВОРЕНЬ КАТІОН-РАДИКАЛА 2,2'-АЗИНО-БІС- (3-ЕТИЛБЕНЗОТІАЗОЛІН-6-СУЛЬФОНОВОЇ КИСЛОТИ) - ABTS^{•+}

Старкова Г. М., Гордєєва І. О., Шендрік О. М.

Донецький національний університет імені Василя Стуса
starkova.g@donnu.edu.ua

Катіон-радикал (ABTS^{•+}) легко відновлюється фенольними антиоксидантами до вихідного молекулярного стану за механізмом протон-спряженого переносу електрона. Оскільки реакція є рН-залежною, має складний механізм і використовується для кількісного визначення антирадикальної активності інгібіторів окиснення, її кінетичні закономірності є критично важливими для оптимізації робочих методик вимірювання.

З огляду на сказане, у даній роботі було досліджено кінетику накопичення/витрачання ABTS^{•+} шляхом періодичного введення в систему антиоксидантів. Катіон-радикал генерували окисненням ABTS персульфатом калію за його значного надлишку. Як донори Н-атомів було випробувано три різні за активністю антиоксиданти: фенол (ArOH), гідрохінон (QH₂) та аскорбінова кислота (AscH), які періодично вводили в реакційну суміш на максимумі концентрації ABTS^{•+}.

Для гідрохінону та аскорбінової кислоти результати наведено на рис. 1. При додаванні в систему фенолу на максимумі концентрації ABTS^{•+}, радикали, також як і у випадках з аскорбатом і гідрохіноном, швидко зникають, але виходу з лаг-періоду не відбувається, див. рис. 2.

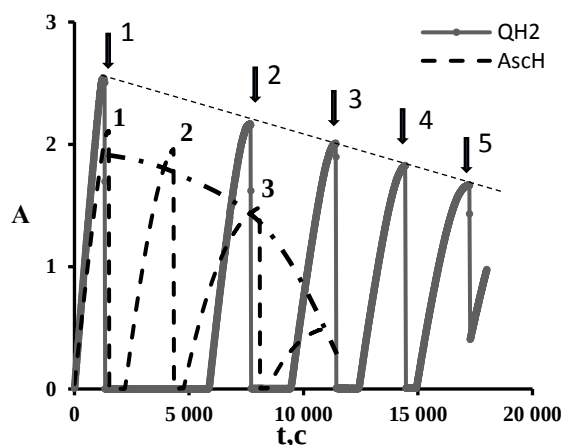


Рис. 1. Кінетика коливальних змін концентрації катіон-радикалу ABTS^{•+} у системі ABTS-K₂S₂O₈ при введенні антиоксидантів.

[AscH]₀ = 1 – 2.0×10⁻⁴; 2 – 1.0×10⁻⁴;
3 – 0.5×10⁻⁴ М;
[QH₂]₀ = 1 – 2.0×10⁻⁴; 2 – 1.0×10⁻⁴;
3 – 0.5×10⁻⁴; 4 – 0.2×10⁻⁴; 5 – 0.1×10⁻⁴ М

Як видно з рис. 1, зміни концентрації катіон-радикалу у системі ABTS-K₂S₂O₈, при додаванні AscH та QH₂, є подібними, але не тотожними. Величини періодів індукції за однакових концентрацій аскорбату та гідрохінону однозначно різні і не лінійно пов'язані як між собою, так і з концентраціями у межах одного АО. По-друге, суттєво різняться максимальні концентрації катіон-радикалу по виходу з лаг-періоду.

Таким чином, процес генерування катіон-радикала ABTS^{•+} і його подальші взаємодії є дуже чутливими до супутніх реакцій із спін-ненасиченими продуктами перетворення як вихідного ABTS, так і антиоксидантів, що потребує їх врахування при визначенні антиоксидантної активності фенольних інгібіторів.

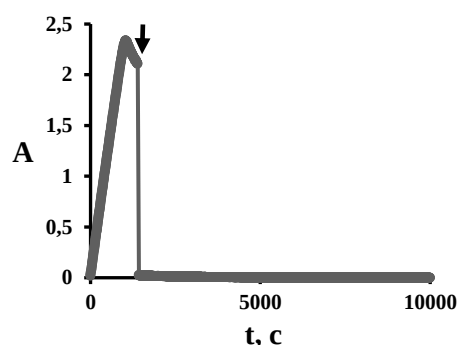


Рис. 2. Кінетика накопичення і витрачання катіон-радикала ABTS^{•+} у системі ABTS - K₂S₂O₈ до і після введення фенолу (позначено стрілкою). T = 25 °C;
[ABTS]₀ = 2.0×10⁻⁴ моль/л;
[K₂S₂O₈]₀ = 2.5×10⁻³ моль

ВМІСТ ЗАГАЛЬНИХ ЛІПІДІВ В ТКАНИНАХ КОРОПА ЛУСКАТОГО (*CYPRINUS CARPIO L.*) ЗА ДІЇ НАТРІЙ ЛАУРИЛСУЛЬФАТУ

Ячна М. Г.¹, Костюк К. К.¹, Майко Г. С.²

¹Національний університет «Чернігівський колегіум» імені Т. Г. Шевченка

²Ліцей № 15 м. Чернігова

m_yachna@ukr.net

Всім представникам живого, а зокрема, тваринного світу, у різноманітних його проявах властивий стан природної зниженої життєдіяльності організму. На шляху своєї еволюції, гідробіонти набули ряд механізмів, що дають їм можливість існувати за несприятливих умов, і таким чином пристосовуватись до зовнішнього середовища [Тимофєєв, 2005]. Значна роль у розвитку процесів адаптації риб до умов екстремального середовища приділяється ліпідам. З урахуванням їх різноманітних функцій в організмі, у тому числі їх залучення в процеси реактивності організму під впливом чинників довкілля. Дослідження ліпідного профілю в органах і тканинах риб, які знаходяться в умовах токсикації є перспективними та актуальними [Ловерн, 1964].

Як одні з основних компонентів біологічних мембран, ліпіди впливають на їх проникність, беруть участь у передачі нервового імпульсу, створюють міжклітинні контакти, виконують функції вторинних месенджерів у передачі сигналів у клітину. Суттєві кількісні та якісні зміни ліпідного складу в організмі дослідних тварин спричиняють також і поверхнево-активні речовини. Встановлено, що в адаптації риб до несприятливих факторів навколишнього середовища зменшення вмісту ліпідів відіграє роль фактора «білкового згущення» мембран клітин, зниження їх проникності та підвищення контролю за проникністю іонів. Саме тому особливий інтерес викликає вивчення особливостей обміну та вмісту індивідуальних класів нейтральних ліпідів в тканинах коропа, як основного промислового виду прісних водойм [Шахмаєв, 1979].

Метою роботи було дослідити вплив натрій лаурилсульфату на вміст загальних ліпідів в тканинах коропа лускатого (*Cyprinus carpio L.*).

Дослідження проводили у листопаді - грудні 2017 р., в лабораторії екологічної біохімії Національного університету «Чернігівський колегіум» імені Т. Г. Шевченка. Як поверхнево-активну речовину обрали натрій лаурилсульфат. Дослідження вмісту загальних ліпідів проводилось на дворічці коропа лускатого. Концентрацію загальних ліпідів визначали за методом [Кейтс, 1975].

Про активність анаболічних процесів і мобілізацію ліпідів у якості джерела енергії свідчить загальний вміст ліпідів. Кількісне значення загальних ліпідів також свідчить про їх використання в адаптивних перебудовах структурних компонентів клітин, тканин та органів. Характер розподілу ліпідів в тканинах і органах коропа залежить від виду, умов середовища, рухової активності, віку тощо [Мехед, 2007].

Як видно з результатів дослідження, загальний вміст ліпідів в печінці та зябрах коропа значно перевищує їх вміст в м'язах та мозку. За дії натрій лаурилсульфату спостерігаються неоднозначні зміни кількості загальних ліпідів у всіх досліджуваних тканинах, зокрема, у білих м'язах, мозку та печінці відмічено збільшення показника (відповідно на 141 %, 71 % та 10 %), а у зябрах – навпаки – зменшення на 45 %.

Виходячи з результатів, можна відмітити, що вміст загальних ліпідів в тканинах та органах коропа в стані активної життєдіяльності суттєво не відрізняється. що дозволяє стверджувати про однаковий рівень накопичення ліпідів в неспецифічних для їх запасання тканин. За вмістом загальних ліпідів ці тканини можна розмістити таким чином: печінка → зябра → м'язи → мозок.

**QUANTUM CHEMISTRY /
КВАНТОВА ХІМІЯ**

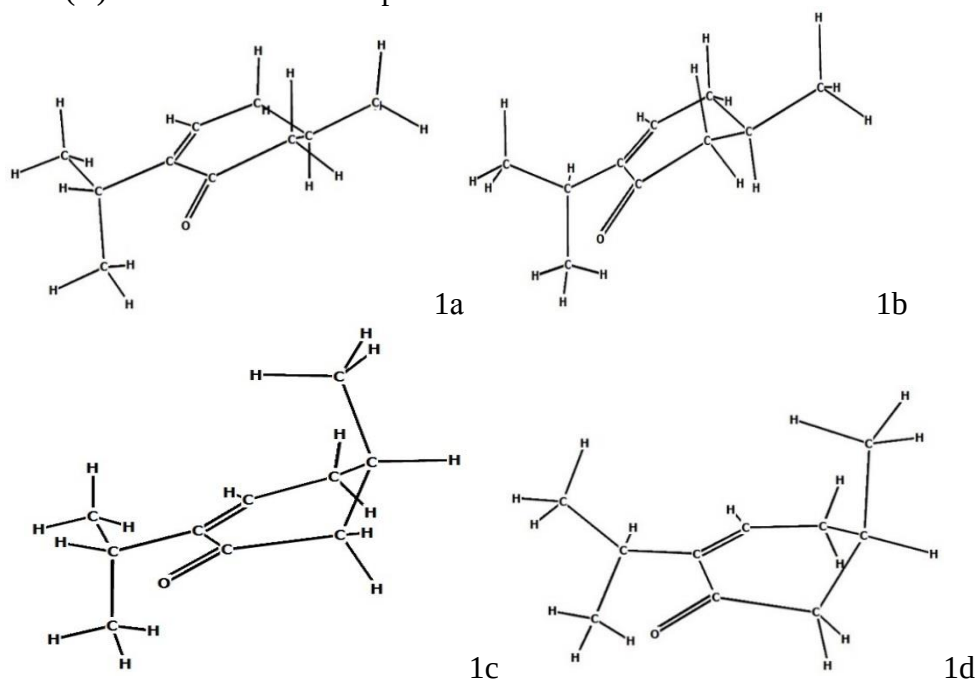
DEPENDENCE OF CONFORMAL STABILITY (R)-4-MENTENONE FROM TEMPERATURE

*Belkina N. V.*¹, *Vakulin I. V.*¹, *Talipova G. R.*¹, *Latypova E. R.*¹, *Vakulina A. I.*²

¹Bashkir state University, Ufa, Russia

²Ural State University of Economics, Yekaterinburg, Russia

According to NMR spectroscopy in ¹³C spectra, the signals of conformers of (R)-4-menthenone are manifested when the temperature is lowered. Therefore, using the quantum-chemical approximation B3LYP / 6-311 ++ G (2d, p), the dependence of the population of conformers (R)-4-menthenone on temperature is considered.



The relative stability of other conformers differs from 1a by not more than 7.97 kJ/mol according to B3LYP / 6-311 ++ G (2d, p). With increasing temperature, the difference in the population of these conformers decreases. First of all, the proportion of conformer 1c in which the methyl group occupies the axial position increases. The proportion of conformers 1b and 1d in which the angle of the isopropyl group is rotated by 180° varies little with increasing temperature (Table).

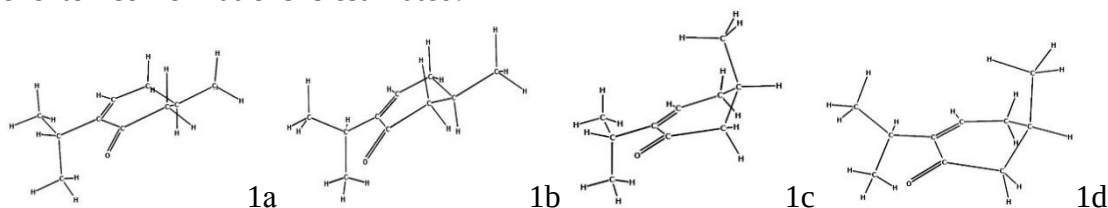
Table

conformer	w, %				
	243	273	298	323	373
1a	67.11	62.69	59.42	56.08	50.47
1b	24.98	26.13	26.65	26.98	26.99
1c	6.74	9.29	11.58	13.56	17.51
1d	1.18	1.90	2.54	3.37	5.03

EVALUATION OF CONFORMAL POPULATION (R)-4-MENTHENONE

Belkina N. V.¹, Vakulin I. V.¹, Talipova G. R.¹, Latypova E. R.¹, Vakulina A. I.²¹Bashkir state University, Ufa, Russia²Ural State University of Economics, Yekaterinburg, Russia

It is shown that (R)-4-menthenone, which is convenient for the synthesis of a whole spectrum of pheromones, has an unusual reactivity in comparison with other enon systems. The unusual behavior of (R)-4-menthenone may be due to the limited rotation of the isopropyl group and its steric effect on the availability of the C = C bond electrons. Using the quantum-chemical non-empirical approximations of different levels of complexity, the relative stability of the (R)-4-menthenone conformations is estimated.



The most stable conformer 1a is characterized by the equatorial orientation of the methyl group at the 4-position and the dihedral angle of the isopropyl group HCCC (= 0) 24°. At this angle, the isopropyl group exerts the greatest screening effect on the C = C bond in the cycle as compared to the conformers 1b and 1d (Table 1).

Table 1

	ΔG^{298} , kJ/mol			
	1c-1a	1d-1b	1d-1c	1b-1a
B3LYP/6-31G(d,p)	5.96	5.88	1.06	1.13
MP2/6-31G(d,p)	2.40	2.27	0.10	0.16
B3LYP/6-311++G(2d,p)	5.41	5.60	2.57	2.37
MP2/6-311++G(d,p)	8.31	8.00	1.54	1.85
G4 (MP2)	4.04	3.79	2.64	2.87

All other conformers are less favorable, but the difference in energy between them is not more than 8.3 kJ/mol, depending on the calculation method used. It is interesting to note that the calculated values obtained in the DFT methods are closest to the results of the high-precision composite method G4 (MP2). Despite the insignificant difference in energies, the populations of these conformers differ markedly. The share of the most stable conformer 1a is almost 2 times larger than the total fraction of all other conformers and 3 times greater than the nearest one in stability 1b, but having a different orientation of the isopropyl group (Table 2).

Table 2

conformer	1a	1b	1c	1d
w (%)	63.4	19.9	12.4	4.3

FEATURES OF CALCULATION OF STANDARD RedOx POTENTIALS BY THE SEMI-EMPIRICAL METHODS AM1, RM1 PM7

Bugaets D. V., Vakulin I. V., Zil'berg R. A.

Bashkir State University

bugaec_dasha@mail.ru

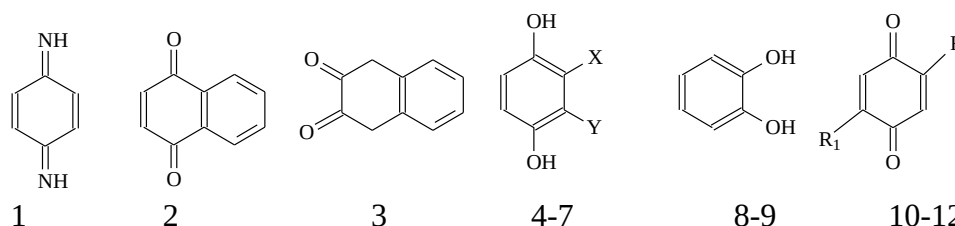
We calculated the standard RedOx potentials the semi-empirical methods AM1, RM1 and PM7. RedOx potential calculation is based on the following equation¹:

$$\Delta G(X_{vs}NHE) = \Delta G_{solv}^0(X^+) - \Delta G_{solv}^0(X) - 4.44 \text{ eV} \quad (1)$$

$$E^0 = -\Delta G/F \quad (2)$$

4.44 eV – change of energy of Gibbs in hydrogen reduction reaction, $F = 1 \text{ eV}$, Faraday constant. Solvation effects was considered by the continual model PCM.

We calculated the standard RedOx potentials for the anylines, quinones and their analogs containing nitrogen (12):



(4) X=Cl; (5) X=Cl; (6) X=Y=CN; (7) X=Y=CN; (10) R=R₁=CH₃; (11) R= CH₃; (12) R=OH, R=OH

Comparison of average absolute errors of calculation of $E_{Red/Ox}$ of the potentials calculated through the total energies (E_{tot}) and heat of formation (ΔH_f^0) is presented in Table.

Table. Accuracy of calculation of $E_{Red/Ox}$ on all set of compounds

Method	MUE	
	$E_{Red/Ox}^{E_{tot}}$	$E_{Red/Ox}^{\Delta H_f}$
AM1	1.39	1.45
RM1	1.24	1.24
PM7	1.56	1.61

All methods approximately on 1B systematically overestimates value Red/Ox potential. The average absolute mistake concerning an experiment is 1.39 V for AM1, 1.56 V for PM7. 1.24 V for RM1. The most precise is the RM1 method. Specified approximations gives an identical average absolute error of calculation for both considered schemes of calculation.

STUDY OF THE FEATURES OF STABILIZATION OF TRANSITION STATES OF THE PRINCE REACTION ON CLUSTERS FROM CARBON AND BORNITRIDE NANOTUBES

Zaytunova G. G.¹, Pasko P. A.¹, Vakulin I. V.¹, Talipova G. R.¹, Vakulina A. I.²

¹Bashkir state University, Ufa, Russia

²Ural State University of Economics, Yekaterinburg, Russia

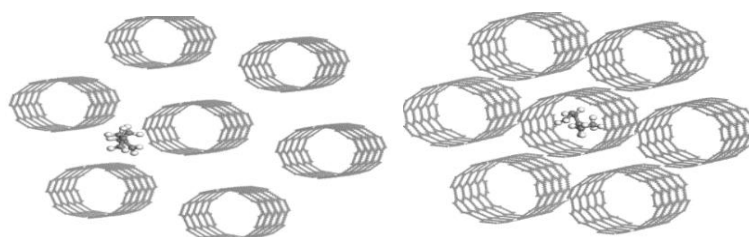
zajtunovag010@gmail.com

An increase in the selectivity of the formation of 1,3-dioxanes can be achieved in the presence of substances with a developed surface containing cavities of a certain section. We considered the stabilization of the TS in clusters of nanotubes, which are characterized by an additional TS stabilization site. To build clusters, we used nanotubes with the optimum diameter found earlier. The table shows the sections of the cavity that arises between the tubes in the cluster at different distances between the walls of the tubes.

Table

d nnt (Å)	L (distance between nanotube walls, Å)							
	0,847	1,5	2,5	3,347	5,847	8,347	10,847	13,347
	D (cavities in a cluster, Å)							
8,89	5,62	5,98	6,56	7,06	8,50	9,94	11,38	12,82
9,49	5,96	6,34	6,92	7,40	8,84	10,29	11,73	13,17
9,52	5,98	6,36	6,94	7,42	8,86	10,31	11,74	13,20
10,18	6,36	6,74	7,32	7,80	9,24	10,70	12,13	13,58
10,24	6,38	6,78	7,34	7,84	9,28	10,73	12,16	13,61
10,85	6,74	7,12	7,70	8,19	9,63	11,08	12,51	13,96
11,53	7,14	7,52	8,10	8,58	10,02	11,46	12,90	14,35
12,20	7,52	7,90	8,48	8,97	10,41	11,85	13,29	14,73
13,58	8,32	8,70	9,28	9,76	11,20	12,64	14,08	15,52

In all cases, stabilization of the transition state inside the tube proves to be more advantageous than stabilization in the cavity between the walls.



It is interesting to note, that the profitability of the stabilization of the transition state between the walls is also of extreme nature, but the maximum of stabilization is achieved at large values of the cavity cross section as compared to the diameter of the nanotube.

This research is supported by the grant № 17-43-020754 of Russian Fund of Basic Researches.

STABILIZATION OF THE TRANSITION STATE OF THE FORMATION OF 1,3-DIOXANES ON THE PRINS REACTION IN THE PRESENCE OF CARBON NANOTUBES

Zaytunova G. G.¹, Pasko P. A.¹, Vakulin I. V.¹, Talipova G. R.¹, Vakulina A. I.²

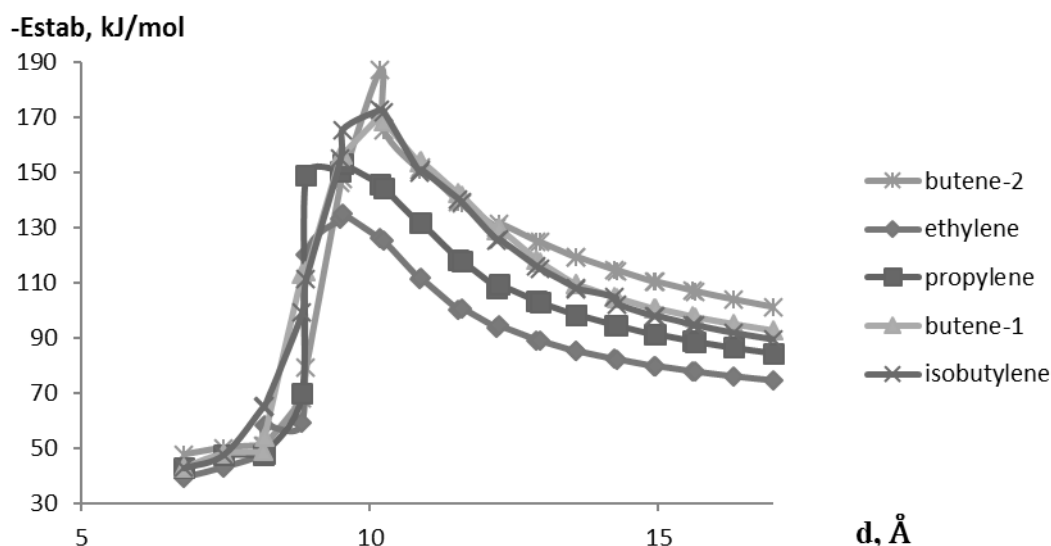
¹Bashkir state University, Ufa, Russia

²Ural State University of Economics, Yekaterinburg, Russia

zajtunovag010@gmail.com

The possibility of increasing the selectivity of the formation of 4,4-dimethyl-1,3-dioxane by the Prins reaction, which is a key intermediate in the synthesis of isoprene by the "dioxane" method, has been studied using quantum chemistry and molecular dynamics. We considered the stabilization of the TS in carbon nanotubes.

Influences of the CNT diameter on the energy of TS stabilization were determined. As model compounds, ethylene, propylene, butene-1, isobutylene and trans-2-butene were considered. In modeling TS adsorption on CNT, we considered nanotubes with diameters from 6 to 17 Å. Below we present the dependence of the stabilization energy TS 1,3-D on the diameter of carbon nanotubes.



The stabilization of the TS of the reaction for the formation of 1,3-dioxane becomes greatest with nanotube diameters from 9.49–12.23 Å. The maximum stabilizing effect is observed when the diameter is 10.18 Å.

This research is supported by the grant № 17-43-020754 of Russian Fund of Basic Researches.

STABILIZATION OF THE TRANSITION STATE OF FORMATION OF 1,3-DIOXANES ON THE PRINCE REACTION IN THE PRESENCE OF BORNITRIDE NANOTUBES

Zaytunova G. G.¹, Pasko P. A.¹, Vakulin I. V.¹, Talipova G. R.¹, Vakulina A. I.²

¹Bashkir state University, Ufa, Russia

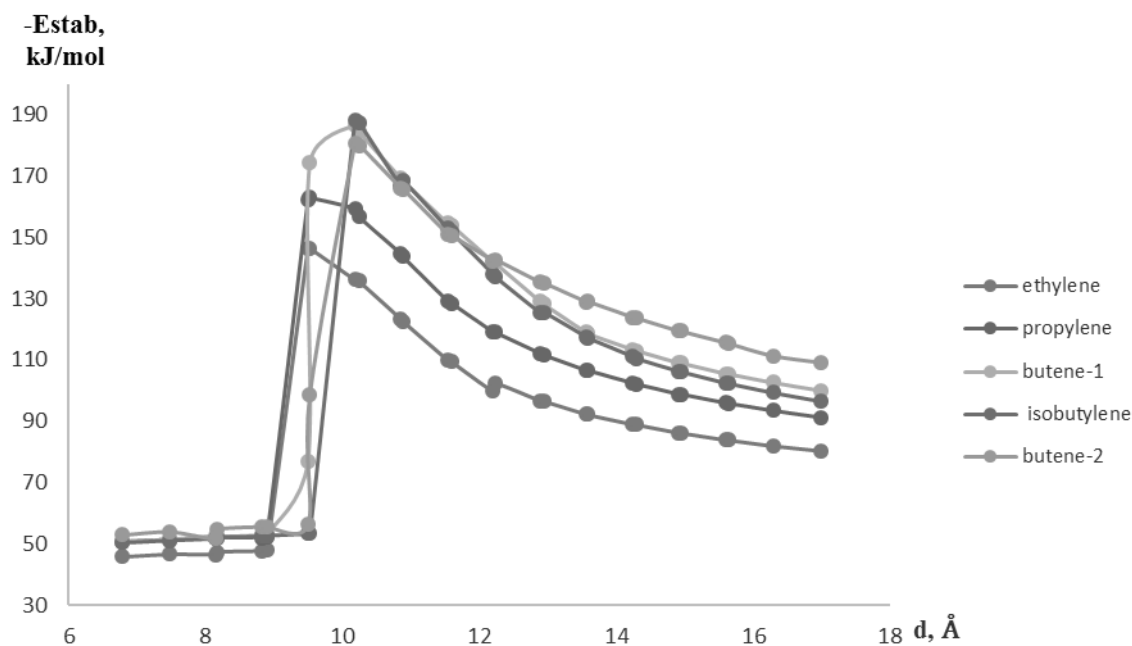
²Ural State University of Economics, Yekaterinburg, Russia

zajtunovag010@gmail.com

An increasing of the selectivity of the formation of 1,3-dioxanes can be achieved in the presence of substances with a developed surface containing cavities of a certain cross section.

To this end, we studied the interactions of the transition state of formation of oxygen-containing heterocycles according to the Prince reaction with BNNT. The influence of diameter on the energy of stabilization of the transition state was determined. Energy parameters and the nature of the interaction of transition states with BNNT were determined using the Adsorption Locator module included in the program package Accelrys Material Studio.

When modeling TS adsorption on BNNT, we considered nanotubes with diameters from 6 to 17 Å. Below, the dependence of the stabilization energy TS 1,3D on the diameter of boronitride nanotubes.



Stabilization becomes greatest with nanotube diameters from 9.52–12.23 Å. The maximum stabilizing effect is observed at 10.18 Å.

This research is supported by the grant № 17-43-020754 of Russian Fund of Basic Researches.

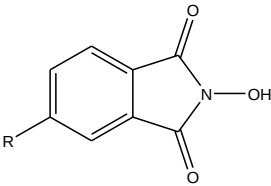
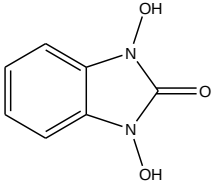
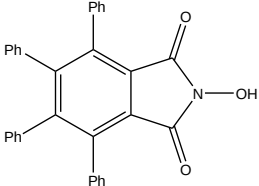
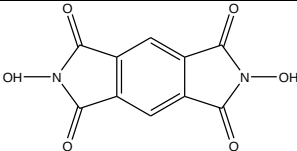
КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ СТРУКТУРИ НА ЕНЕРГІЮ О-Н ЗВ'ЯЗКУ N-ГІДРОКСИФТАЛІМІДА

Плешингер Т. С., Шендрик О. М.

Донецький національний університет імені Василя Стуса
pleshynher.t@donnu.edu.ua

N-гідроксифталімід (NHPI) та його похідні використовуються у якості каталізаторів в реакціях рідиннофазного окиснення органічних сполук молекулярним киснем. Ключовим інтермедіатом в каталітичному циклі є нестабільний фталімід-N-оксильний радикал (PINO). Спонтанний розпад PINO обмежує застосування NHPI. Замісники у бензольному кільці впливають на стабільність радикала, що в свою чергу відбивається на каталітичній активності NHPI. Вивчення цього впливу є важливим для отримання більш ефективних каталізаторів.

Квантово-хімічні розрахунки проводились у програмі Gamess (US). На першому етапі була оптимізована геометрія NHPI, його заміщених та відповідних радикалів з використанням методу функціоналу густини (DFT), базисного набору 6-31G(p,d) у декартових координатах. На основі отриманих даних була розрахована енергія диссоціації зв'язку O-H (BDE).

Об'єкт	Структура	BDE, ккал/моль
NHPI (PINOH)		81,90
4CH ₃ -PINOH		81,52
4CH ₃ O-PINOH		81,02
4F-PINOH		82,09
4Cl-PINOH		81,90
4NO ₂ -PINOH		114,37
PINO(OH) ₂		75,68
tetraPh-PINOH		82,83
NDHPI		114,46

Електронодонорні замісники підвищують стабільність радикалів, електроноакцепторні значно знижують її. Найбільш стабільним, порівняно з PINO, є радикал структури PINO(OH)₂.

ПРО РЕАКТИВНІСТЬ ХІМІЧНИХ ЧАСТИНОК В РОЗЧИНАХ ВАНАДІЮ(V)

Семиволос Д. С.¹, Волкова Л. К.³, Опейда Й. О.^{1,2}¹Донецький національний університет імені Василя Стуса²Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України³Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України
opeida_i@yahoo.co.uk

Водні розчини ванадію(V) широко використовуються в окисленні вуглеводнів та їх похідних. Для встановлення механізмів цих реакцій не достатньо знати склад розчинів, хоча і це не завжди визначено. Кількісно експериментально виміряти і оцінити можливість участі кожної з частинок в стадіях окислення досить складно. Разом з тим останнім часом з'явилася можливість оцінити термодинамічні характеристики окремих частинок і параметри реакцій, використовуючи напівемпіричний квантово-хімічний метод розрахунку PM6 (пакет MOPAC 12), що відзначається швидкістю і хорошою точністю розрахунків фізико-хімічних властивостей сполук.

В даній роботі цей метод використано для аналізу даних з окислення органічних сполук по зв'язку C–H в розчинах метаванадієвої кислоти HVO₃. Залежно від умов в розчинах можуть переважати різні хімічні частинки: аніон VO₃[–], недисоційована форма HVO₃, у кислому середовищі її протонована форма H₂VO₃⁺ чи VO₂⁺, а також VO₂⁺ з частинкою HSO₄. В таблиці наведено розрахунки ентальпії реакцій відриву H-атома від вторинного зв'язку C–H в гексані (R–H) цими частинками.

Таблиця. Ентальпії реакцій (ΔH, ккал/моль) частинок ванадію(V) з гексаном (R–H)

№	Реактанти		Продукти		ΔH
1	VO ₃ [–]	R–H	HVO ₃ [–]	R•	
	–137,7	–36,4	–175,9	–14,3	–16,1
2	HOVO ₂	R–H	H ₂ VO ₃	R•	
	–126,5	–36,4	–174,0	–14,3	–25,4
3	H ₂ VO ₃ ⁺	R–H	H ₃ VO ₃ ⁺	R•	
	–1,3	–36,4	–57,0	–14,3	–33,6
4	(HO) ₂ VO ⁺		VO ₂ ⁺	H ₂ O	
	–1,3		140,3	–54,3	87,3
5	VO ₂ ⁺	R–H	HVO ₂ ⁺	R•	
	140,3	–36,4	86,2	–14,3	–31,9
6	O ₂ V ⁺ – O(OH)SO ₂	R–H	HO ₂ V ⁺ – O(OH)SO ₂	R•	
	–48,7	–36,4	–113,9	–14,3	–43,1
*Під формулою реагента наведена стандартна ентальпія утворення ΔH°.					

В кожній реакції зберігається заряд V-вмісної реагуючої частинки у реактантах та продуктах. Завдяки збереженню числа електронних пар у реактантах і продуктах, обчислена за допомогою квантово-хімічних методів зміна енергій в ряду таких ізодесмічних реакцій зазвичай добре відтворюється внаслідок компенсації систематичних похибок методу, що полегшує теоретичний розгляд залежностей структура – реактивність. Дані таблиці показують, що зміна стандартної ентальпії реакції має від'ємне значення, термодинамічні параметри сприяють перебігу таких реакцій. Найбільшу реакційну здатність (найнижчі значення ΔH) показують частинки O₂V⁺ – O(OH)SO₂ і H₂VO₃⁺. Реактивність VO₂⁺ є дещо меншою ніж H₂VO₃⁺, при цьому дегідратація останньої вимагає суттєвої (87,3 ккал/моль) енергії.

МОДЕЛЮВАННЯ ГОМОЛІЗУ МЕТИЛПЕРОКСИНІТРАТУ – КОМПОНЕНТА ФОТОХІМІЧНОГО СМОГУ

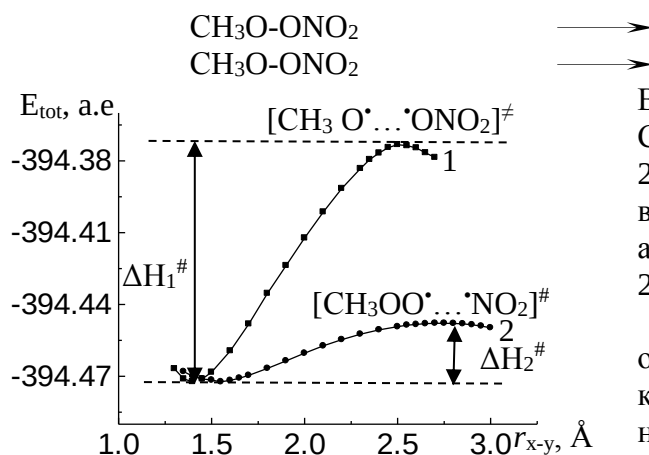
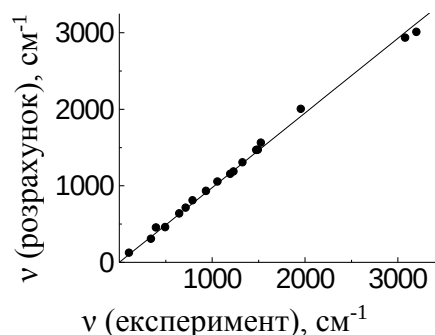
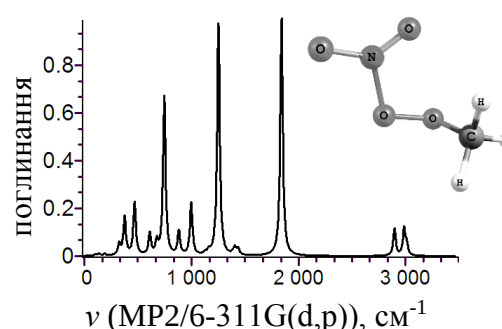
Пастернак О. М., *Сербін В. С.*

Маріупольський державний університет
o.pasternak@mdu.in.ua

Хімія атмосфери охоплює величезну кількість реакцій, від перебігу яких залежить склад атмосферного повітря. Пероксидні радикали є важливими компонентами тропосфери та нижньої стратосфери, які беруть участь у окисненні та утворенні багатьох інших атмосферних сполук, нітроген оксиди впливають на утворення тропосферного озону. Метилпероксинітрат є важливим інтермедіатом у атмосферному окисненні різноманітних органічних сполук, найпростішим гомологом алкілпероксинітратної групи. В стратосфері час життя контролюється фотодисоціацією, в нижній стратосфері метилпероксинітрат впливає на вміст нітроген оксидів. Алкілпероксинітрати це джерело перокси-радикалів та нітроген оксидів.

Проведено квантово-хімічне моделювання молекулярної структури пероксиметилнітрату (CH_3OONO_2), який можна розглядати як один із продуктів фотохімічного циклу реакцій метану в атмосфері. Квантово-хімічні розрахунки виконані з використанням комплексу програм структурної хімії «Gaussian 09». Структурні параметри, частоти гармонійних коливань одержували після повної оптимізації методом EF. Повну електронну енергію розраховували в наближенні MP2/6-311G(d,p). Частоти розрахованого і експериментально отриманого ІЧ-спектра задовільно узгоджуються.

На шляху мінімальної енергії реакцій гомолітичного розпаду CH_3OONO_2 локалізовано перехідний стан реакції (1) та реакції (2) при видовженні -O-O- зв'язку від 1.4 Å до 2.5 Å і -N-O- зв'язку від 1.55 Å до 2.7 Å.



Величина ентальпії активації гомолізу CH_3OONO_2 шляхом реакції (1) складає $259 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$, а шляхом реакції (2) всього лише $64 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$. Ентропія активації реакцій (1) і (2) складає 26 і $25 \text{ Дж} / (\text{моль} \cdot \text{К})$ відповідно.

Дослідження є частиною обґрунтування структурно-хімічної концепції альтернативних неізодемічних реакцій пероксинітратів – компонентів атмосферного фотохімічного смогу.

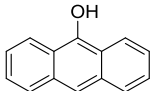
АНАЛИЗ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МОЛЕКУЛЫ АНТРОНА И ИХ ВЗАИМОСВЯЗИ С ЕГО СПОСОБНОСТЬЮ К ОКИСЛЕНИЮ МОЛЕКУЛЯРНЫМ КИСЛОРОДОМ В ДМСО

Сердюк А. А., Касянчук М. Г.

Институт физико-органической химии и углехимии им. Л. М. Литвиненко НАНУ
ganna.serdyuk@gmail.com

Скорость каталитического окисления антрона зависит от положения кето-енольного равновесия, на которое существенное влияние оказывают свойства среды. В случае антрона продукт его енолизации – антрол – по своему строению близок к фенолам, процессы окисления которых продолжают интенсивно изучаться. Квантово-химический расчет теплового эффекта реакции окисления этих соединений до соответствующих хинонов (табл.) показал, что тепловой эффект реакции окисления антрола существенно превышает по величине тепловые эффекты для реакции других фенолов. Такое поведение изучаемых соединений можно объяснить, приняв во внимание тот факт, что образование хинона приводит к потере энергии ароматической стабилизации молекулы вследствие нарушения её ароматичности. В случае антрола энергия ароматической стабилизации изменяющегося в результате окисления фрагмента молекулы оказывается относительно невелика, что делает возможным его окисление в условиях эксперимента. Для α -нафтола, фенола и *o*-крезола нарушение ароматичности сопряжено со значительными энергетическими затратами, что не может не отразиться на величине тепловых эффектов (табл.) и скоростях реакций. Также, высокая энергия ароматической стабилизации для α -нафтола, фенола и *o*-крезола приводит к тому, что данные соединения вне зависимости от природы растворителя существуют только в форме енолов, тогда как взаимный переход антрон $\leftrightarrow$ антрол осуществляется относительно легко и соотношение форм в растворе благодаря этому определяется свойствами (полярностью, основностью и т. п.) растворителя (табл.).

Таблица. Тепловые эффекты процессов енолизации и окисления до соответствующих хинонов для ряда фенолов (программный пакет MOPAC-2009; приближение COSMO)

Соединение	α -Нафтол 	Фенол 	<i>o</i> -Крезол 	Антрол 
Тепловые эффекты реакции окисления соединений до соответствующих хинонов				
ΔH_{vac} , ккал/моль	-69.17	-59.23	-58.47	-80.70
ΔH_{DMSO} , ккал/моль	-97.86	-88.57	-87.78	-108.67
Тепловые эффекты кето-енольной таутомеризации (образования 1 молекулы енола из соответствующего кетона)				
ΔH_{vac} , ккал/моль	21.29	38.53	33.74	6.77
ΔH_{DMSO} , ккал/моль	21.78	39.1	34.29	7.28

Структурные особенности антрона обеспечивают повышенную лабильность протонов в 10 положении за счет того, что они активированы двумя ароматическими кольцами. Образование дополнительного ароматического секстета при енолизации не сопровождается существенным повышением энергии ароматической стабилизации, что делает возможным окисление молекулы в относительно мягких условиях.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ КРИТЕРИИ ЭФФЕКТИВНОСТИ ВОДОРОДНОГО СВЯЗЫВАНИЯ В СТРУКТУРНОМ АНАЛИЗЕ АРАМИДОВ

Токарь А. В., Чигвинцева О. П.

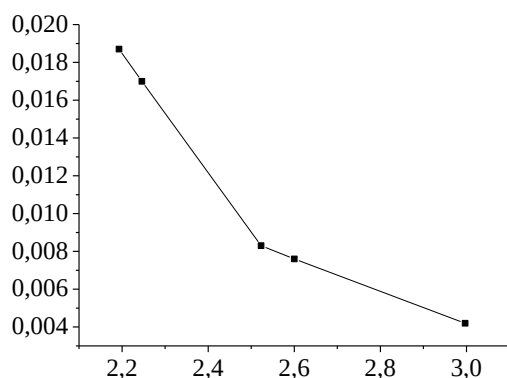
Днепровский государственный аграрно-экономический университет
atokar_2004@ukr.net

С использованием метода функционала плотности в приближении B3LYP/6-311++G(d,p) осуществлен детальный структурный анализ внутри- и межмолекулярных взаимодействий отдельных участков макромолекул, содержащих ариламидные фрагменты. В рамках АІМ-теории Бейдера рассчитаны значения электронной плотности для критических точек наиболее значимых водородных связей, а также слабых ван-дер-ваальсовых взаимодействий, позволяющие произвести их дополнительную оценку с точки зрения эффективности связывания.

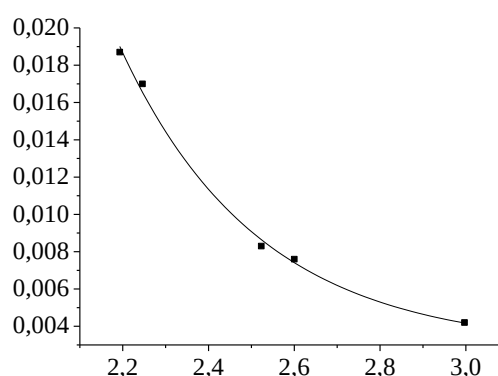
Как показывают данные табл., найденные значения электронной плотности хорошо коррелируют с длинами соответствующих связей во всем диапазоне приведенных значений. На рис. показан ход зависимостей $\rho(r)$, который в случае линеаризации (кривая А) демонстрирует наличие перегиба при $r \sim 2,500$ Å, отвечающего плавному переходу из области промежуточных по силе водородных связей в область слабых ван-дер-ваальсовых взаимодействий.

Таблица. Расчетные значения электронной плотности (ρ) в критических точках связей в зависимости от их длины (r) [приближение B3LYP/6-311++G(d,p)]

$\rho, \text{e}/\text{\AA}^3$	0,0187	0,0170	0,0083	0,0076	0,0042
$r, \text{\AA}$	2,193	2,246	2,523	2,600	2,997



А



В

Рис. Зависимости электронной плотности ($\rho, \text{e}/\text{\AA}^3$) как функции межатомных расстояний ($r, \text{\AA}$) некоторых внутри- и межмолекулярных взаимодействий

В случае экспоненциальной зависимости $\rho(r)$ (кривая В) корреляционное уравнение, а также его основные параметры имеют вид:

$$\rho(r) = (0,0028 \pm 0,0009) + (0,0162 \pm 0,0009) \cdot \exp[(2,193 - r)/(0,325 \pm 0,047)].$$

В целом, полученные результаты согласуются с имеющимися литературными данными относительно особенностей распределения электронной плотности в молекулярных кристаллах ароматических структур и, таким образом, могут быть использованы для идентификации характера связей внутри одного их типа. При этом следует отметить, что лапласиан электронной плотности $\nabla^2\rho(r)$ в таком качестве столь явно не проявляется.

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

УЛЬТРАЗВУКОВА ІНТЕНСИФІКАЦІЯ БІОХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ

*Базіло К. В., Заїка В. М.*Черкаський державний технологічний університет
music-med@chdtu.edu.ua

В основі всіх ультразвукових технологій лежать ефекти взаємодії ультразвуку з середовищем. Потужний ультразвук викликає в рідких середовищах ряд специфічних ефектів – кавітацію, інтенсивні мікро- і макропотоки, що призводять до швидкого і якісного перемішування компонентів середовища, утворення стійких емульсій, екстрагуванню розчинних компонентів з частинок, які знаходяться в рідині, набухання і руйнування цих частинок.

Ультразвукові пристрої – це також потужні блендери та гомогенізатори, застосування яких не обмежується лише лабораторією та промисловістю. Ультразвукові гомогенізатори – пристрої, що забезпечують подрібнення та змішування (як правило, рідких) фаз за рахунок кавітації. Ультразвукові гомогенізатори використовуються для гомогенізації сумішей рідин, а також застосовуються в ультразвукових системах зволоження повітря, генераторах диму. Ультразвукові пристрої також знайшли своє місце на кухнях для гурманів.

Перспективні напрямки застосування ультразвуку для інтенсифікації біотехнологічних процесів приведені на рис.

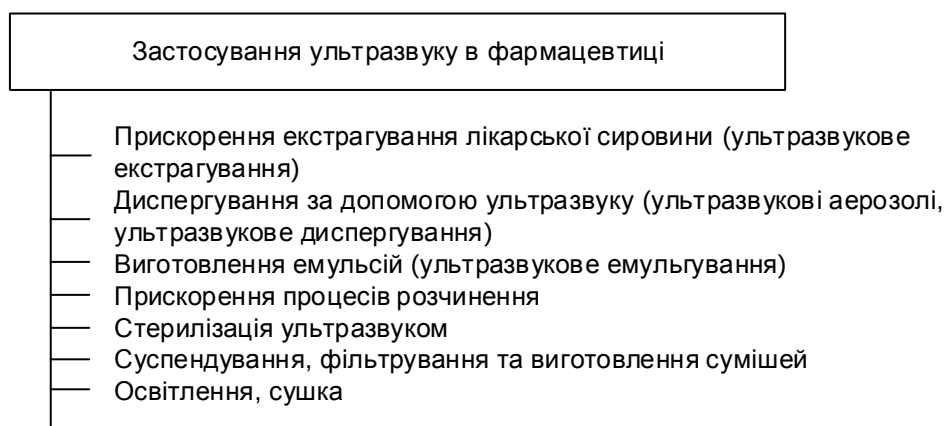


Рис. Методи інтенсифікації біотехнологічних процесів за допомогою ультразвуку

Авторами розроблений генератор ультразвукових коливань для інтенсифікації хімічних процесів у фармацевтиці, що також може використовуватися в такій галузі медицини як ультразвукова хірургія. При зануренні в розчин дезінфектанту ультразвукові коливання викликають інтенсивні мікропотоки рідини поблизу інструменту, очищаючи його поверхню. Крім того, збільшуючи проникність мембран клітин хвороботворних бактерій по відношенню до дезінфікуючої речовини, ультразвук підвищує ефективність його дії, що дозволяє на порядок знизити концентрацію цієї речовини в розчині.

Робота виконується в рамках науково-технічної розробки «Розробка мобільного високоефективного ультразвукового хірургічного інструменту для військової та цивільної медицини», що ведеться на кафедрі приладобудування, мехатроніки та комп'ютеризованих технологій.

Подальші дослідження авторів будуть спрямовані на створення мобільних малогабаритних ультразвукових систем для інтенсифікації хімічних процесів в фармацевтиці на основі п'єзоелектричних випромінювачів.

**MODERN ASPECTS OF CREATING OF NEW POTENTIAL DRUGS BASED
ON QuS-PROGRAM DEVELOPMENT***Dotsenko M. O.*

Zaporizhzhya National University

marnatnas@gmail.com

Development of drugs – is a unique multidisciplinary process aimed at creating of a new therapeutic agent with the most useful and safe properties. In the world practice development of original drug includes two functionally related stages: 1 – Study and 2 – The introduction or creation. In the first stage there is a discovery or synthesis of the new molecule of potential drug. Most of the new potential drugs (lead compounds) are discovered with using of one of three approaches: 1) chemical modification of known molecules; 2) screening of biological activity of a large number of natural compounds or their modifications; 3) direct synthesis based on the understanding of biological mechanisms, chemical structure and physical-and-chemical properties of the substance. Expenditures for the synthesis, screening and further preclinical and clinical studies of potential drug, amount up to 800-1000 millions of dollars. The duration of such studies 7–10 years.

The recent decades became critical in the studying and testing of new drugs. Intuitive (random) approach was replaced with the rational drug design that ensures the creation of the drug molecular structure based on information on the receptor structure. New domains of scientific research have developed: cheminformatics, which includes a variety of chemical libraries, computer design, combinatorial chemistry etc. Part of Combinatorial Chemistry is computer chemistry (Computer drug design: CADD). Thus, by using database of relevant substances, combining their construction with the help of proper computer software it becomes possible to design potential drugs. Having a number of compounds with known activity, QSAR method provides an opportunity to forecast the necessary structure or to specify a direction for its modification and thus significantly restrict the search. However among existing software tools for solving problems of QSAR there is no readymade software packages in free access, which would be universal with an understandable and intuitive interface. Based on these requirements, scientists from biology department of ZNU have developed a new software tool called QuS (short form of QSAR Server). The task of this tool is to integrate and coordinate the work of other software that performs specific stages.

The relevance of QuS tool is determined by using the latest in silico technologies for drug searching. For determining of the SAR / QSAR regularities significant role plays formation of database that will help to solve the problem of forecasting activity and toxicity of chemical compounds. Nitrogen-containing heterocycles are of exclusive value for the formation of databases, studying of "structure – activity – toxicity" relationships and searching for new highly efficient and low-toxic bioregulators. Pride of place among these heterocyclic systems goes to six-membered aromatic heterocycle – quinoline. Various quinoline derivatives are used both as synthons in organic synthesis and molecular design and as effective biologically active compounds. Quinoline-based drugs take an important place in the modern arsenal of antibacterial chemotherapeutic drugs.

In addition, for a number of biologically active derivatives of nitrogen-containing heterocycles there is limited or completely absent systematic study of "structure – activity – toxicity". This was the main reason for the studying of quinoline derivatives database and searching descriptors of their structure, which are important for development of QSAR models as a system for evaluation of compounds' biological effects. Received dependence equations of toxicity and activity of the studied types of quinoline derivative from 2D- and 3D- descriptors allow forecasting the levels of activity for new biologically active substances at pre-experimental stage.

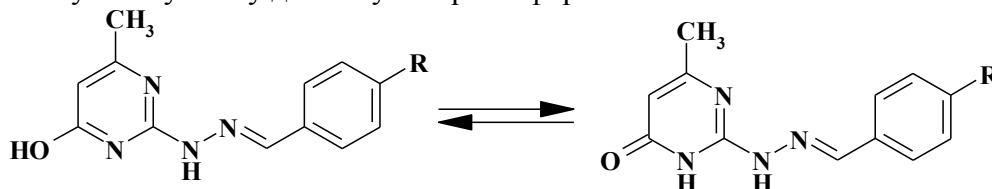
ОЦІНКА МУТАЦІЙНОГО ВПЛИВУ ДЕЯКИХ ОСНОВ ШИФФА 2-ГІДРАЗИНО-6-МЕТИЛ-ПІРИМІДИН-4-ОЛУ ДЛЯ *DROSOPHILA MELANOGASTER*

Євсейчик Я. О., Янченко О. В.

Національний університет «Чернігівський колегіум» імені Т. Г. Шевченка
yanaevseichik2@gmail.com

Дослідження комплексного впливу, зокрема мутагенного ефекту, антропогенних факторів на біологічні системи є однією з актуальних проблем сучасної біології. В той же час синтез сполук з новими властивостями для потреб промисловості, медицини, побуту тощо є важливим напрямком сучасних наукових досліджень. Раніше нами було досліджено ймовірну токсичність основ Шиффа 2-гідразино-6-метил-піримідин-4-олу та коефіцієнтів ліофільності і біоконцентрації в умовах *in silico*. Розрахунок ймовірної токсичності було здійснено за допомогою програми DL50 Cal, створеної нами на основі патенту РФ G01N33/00 [Євсейчик Я., Янченко О., 2017]. Відомо, що поряд з рядом очікуваних ефектів сполук часто виявляються супутні небажані (побічні) ефекти, тому актуальним є дослідження впливу вказаних речовин на генетичний матеріал.

Метою роботи було виявлення можливих мутаційних змін у представників *Drosophila melanogaster* Meigen за дії основ Шиффа 2-гідразино-6-метил-піримідин-4-олу, які можуть існувати у двох таутомерних формах.



де **a** R = OH; **b** R = CH₃; **c** R = OCH₃; **d** R = N(CH₃)₂; **e** R = F; **f** R = Cl.

Матеріалом для роботи слугували особини *D. melanogaster*, лінії, що підтримується для дослідження на кафедрі біології Національного Університету «Чернігівський колегіум» імені Т. Г. Шевченка у вересні–листопаді 2017 року. Обсяг вибірки становив 350–450 статевозрілих особин з домінантними проявами кольору очей, форми крил та забарвлення тіла. Для визначення мутацій та запобігання врахуванню модифікацій аналізувалися 1–2 покоління, в середовищі яких не було шкідливих речовин. Для врахування спонтанних мутацій була заведена контрольна група. У контрольній групі, у 1–2 поколіннях, не було виявлено жодної мутації. Мух утримували на стандартному цукрово – дріжджовому середовищі при температурі 25 °С, перед експериментом наркотизували. Для дослідження впливу гетероциклічних сполук на мух до поживного середовища вносили речовини у вигляді спиртових розчинів за концентрацією, токсичною для прокаріот – 0,01 г/см³. Статистична обробка результатів здійснювалась за загальними стандартами з використанням програми «Excel» з пакету «Microsoft Office–2003» та програми STATISTICA.

Виявлено, що речовини *a*, *b*, *c* та *e* викликали мутаційні зміни, зокрема відмічено редукцію крил та зміну забарвлення тіла. У всіх досліджених групах кількість мутантних самок статистично вірогідно більша за кількість самців, що дозволяє зробити припущення про відсутність зв'язку мутацій зі статтю. Можливо, тут наявні певні форми епігенетичного наслідування, але це питання потребує більш детального дослідження. Визначено, що *d* та *f* не мають мутаційного впливу. Інші 4 речовини такий вплив мають. Найбільший мутагенний вплив мають речовини *a*, *b* та *e*. У цих речовин частка мутантів сягала 20 %. У самок мутаційний ефект спостерігався значно сильніше, що може бути пов'язано з епігенетичним наслідуванням.

ПРОБЛЕМА ВАЛІДАЦІЇ КОНТРОЛЮ ЯКОСТІ СТЕРИЛЬНИХ ЛІКАРСЬКИХ ФОРМ ГЛЮКОЗИ

Івасик Ю. В., Беспалько Ю. М., Богза С. Л., Ситник Н. С.

Донецький національний університет імені Василя Стуса

yulia94rubin@gmail.com

Сучасна фармацевтична хімія вимагає від фахівців володіння комплексними знаннями та навичками стосовно забезпечення якості лікарських форм. Розчини для ін'єкцій, зокрема глюкоза є особливим продуктом виробництва, який має відмінності від будь-якої іншої продукції, оскільки призначені для приймання хворими людьми з різними патологіями та ослабленими функціями організму. Рівень якості ліків у більшості випадків не може бути визначений споживачами, це завдання стоїть перед спеціалістами-хіміками та органами державного контролю лікарських засобів.

Метою роботи є розробка ефективних методів контролю якості стерильних лікарських форм глюкози. Дослідження проведено на підприємстві ПрАТ «Інфузія». Об'єктами дослідження обрано лікарські форми глюкози з концентрацією 5 % і 10 %.

Комплекс валідних методів контролю якості зазначених форм надає змогу виготовляти ліки, що відповідають вимогам до інфузійних лікарських засобів, які включають в відповідну нормативно-технічну документацію. У Державну Фармакопею України (ДФУ) включено загальну статтю, що стосується цих лікарських форм: «Лікарські засоби для парентерального застосування». Одним із основних показників готовності продукту до продажу є стерильність готової продукції. Мікробіологічний контроль на стерильність розчинів для ін'єкцій та інфузій проводять згідно ДФУ.

Для належного проведення випробувань на стерильність та мікробіологічну чистоту потрібним є створення та підтримка необхідних умов навколишнього середовища, що забезпечується використанням спеціальних боксів класу чистоти В із зоною А. Випробування на стерильність проведено в асептичних умовах, які ідентичні за стандартами для повітря і мікробезпеки, і є необхідним стандартом для асептичного виробництва фармацевтичної продукції.

В результаті проведених досліджень було протестовано методи контролю стерильності, що описані в діючих виданнях Фармакопей, а саме:

- метод прямого посіву;
- метод мембранної фільтрації.

Метод мембранної фільтрації є більш трудоміським та більш матеріалозатратним. Метод прямого посіву є більш простим у виконанні, але має більший ризик потрапляння сторонніх мікроорганізмів у досліджуваний об'єкт. Експериментальний аналіз методів перевірки контролю якості стерильних лікарських форм глюкози 5 % та 10 % за показником «Стерильність» дав змогу обрати найбільш валідний метод. У порівнянні з прямим посівом метод мембранної фільтрації у незамкнутій системі має ряд істотних переваг:

- відсутність взаємодії продукту та середовища;
- можливість промивки мембрани;
- використання більшого об'єму зразка при меншому обсязі використовуваного середовища;
- висока чутливість до мікроорганізмів.

IDENTIFICATION OF EXPIRED MEDICINES ON BASIS ATENOLOL USING PRINCIPAL COMPONENT ANALYSIS

Kabirova L. R., Provorova Yu. R., Zilberg R. A., Habletdinova A. I.

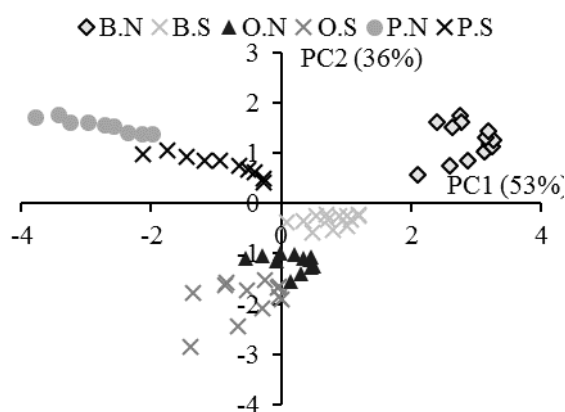
Bashkir State University

32, Zaki Validi Street, 450074 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia

Kabirova.lian@yandex.ru

Atenolol is a popular medical product for the treatment of hypertension and cardiovascular diseases. This medicament blocks the heart from the action of adrenaline and other hormones that accelerate the heart rate. As a result, the pulse slows down, blood pressure decreases. Since the load on the heart is reduced, the risk of a heart attack decreases for the patient. The quality of the medicaments directly depends on the expiration date. Under the expiration date of medicinal products is understood the time during which this product fully meets all the requirements of regulatory documentation. Expired pharma drugs lose their pharmacological properties, adversely affect the body as a whole.

In this study, real samples containing auxiliary substances (microcrystalline cellulose, lactose, magnesium carbonate, gelatine, silicon dioxide, talc, starch, etc.) were tested using voltammetric sensory system based on glassy carbon electrodes (GCEs) modified by films of the polyelectrolyte complex of chitosan and chitosan succinamide (CS-SCS), as well as composites with α -, β - and γ -CD. Pharmaceuticals from various manufacturers (Belupo (B), Pranapharm (P), Ozon (O)) were chosen as real samples. The obtained voltammograms were chemometrically processed by principal component analysis (PCA) and transformed into points on the principal component, constructed along the maximum dispersion of experimental data (PC1). Then, the next principal component (PC2) was constructed orthogonal to PC1 and directed along the next largest change in the measurement data, and so on. As can be seen from figure, clusters (data of parallel measurements) of ATN medicines did not intersect with each other on the score plots in the coordinates of PC1-PC2.



*S – expired medicines; N – unexpired medicines

Fig. Score plot of PCA modelling of voltammograms obtained by differential pulse voltammetry for 0.094 mM solutions of ATN medicines using sensory system with three GCEs electrodes modified by CS-SCS composites of α -, β -, and γ -CD

Thus, the sensory system with three GCEs indicator electrodes modified by CS-SCS composites of α -, β -, and γ -CD allowed recognizing not only ATN medicines by manufacturers but also identification of expired medicines.

This work was supported by the Russian Science Foundation (Grant No. 16-13-10257).

IN VITRO ACTIVITY OF NOVEL 1,3-OXAZOLE DERIVATIVES AGAINST HUMAN PAPILLOMAVIRUS

Kachaeva M. V., Pilyo G. S., Kornienko A. M., Prokopenko V. M., Zhirnov V. V.,
Brovarets V. S.

Department of Chemistry of Bioactive Nitrogen Containing Heterocyclic Bases,
Institute of Bioorganic Chemistry and Petrochemistry, NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine
kachaeva@bpci.kiev.ua

Chemotherapeutic approaches to the control of HPV (human papillomavirus) infection suffer from a lack of specificity. For most existing HPV inhibitors, the weak antiviral effects observed in cellular assays suggest that further improvements in selecting targets, in drug potency, and in bioavailability and cell uptake are required. Substituted 1,3-oxazoles can exert various biological effects and have significant antiviral activity.

The present study is an exploratory investigation of anti-HPV activity by novel 1,3-oxazole derivatives (1,3-oxazol sulfonamides and 5-amino-1,3-oxazole-4-carbonitriles) designed and synthesized in Kyiv, with all the cytotoxicity and efficacy tests performed in the the National Institute of Allergy and Infectious Diseases (USA).

The influence of the 1,3-oxazol sulfonamide derivatives on transient replication of HPV origin-containing plasmid was first evaluated in transfected HEK293 cells by human papillomavirus-11 replication origin-containing plasmid. All compounds exhibited potent anti-replication activity and were more active than Cidofovir in this assay. Two compounds, which showed high activity against HPV-11 in the primary assay, were chosen for the secondary assay (HPV-18 DNA amplification in an organotypic squamous epithelial raft culture of primary human keratinocytes freshly prepared from neonatal foreskins). In contrast to the HPV-11 in HEK293 cells, the cytotoxicity, EC₅₀ and EC₉₀ of both compounds for HPV-18 were the same in PHK raft cultures.

At present, the reasons for the difference in the anti-HPV effect of 1,3-oxazole derivatives in HEK29 cells versus the HPV-18 are not understood. Perhaps, the compounds are metabolized differently in the two distinct culture systems. This discrepancy points to the importance of the raft cultures in verifying putative anti-HPV compounds. This study does provide useful information on specific analogs with antiviral activity *in vitro* that can be further modified to identify more active inhibitors.

**РОЗРОБКА УМОВ ВИЗНАЧЕННЯ ГЛІКЛАЗИДУ В КРОВІ
МЕТОДОМ ТВЕРДОФАЗНОЇ ЕКСТРАКЦІЇ
ДЛЯ ХІМІКО-ТОКСИКОЛОГІЧНОГО АНАЛІЗУ**

Кучер Т. В.¹, Мерзлікін С. І.²

¹ДВНЗ «Тернопільський державний медичний університет імені І. Я. Горбачевського
МОЗ України»

kucher_tv@tdmu.edu.ua

²Національний фармацевтичний університет
msi07@ukr.net

Антидіабетичний засіб гліклазид, який належить до класу похідних сульфонілсечовини, широко застосовується у сучасній фармакотерапевтичній схемі лікування цукрового діабету 2 типу. Особливостями застосування гліклазиду є специфічність контингенту (пацієнти похилого віку), доступність через безрецептурний відпуск, поліпрагмазія, побічні дії, зокрема гіпоглікемія при передозуванні та інші фактори, що створюють токсикологічну небезпеку.

Відомі випадки летальних отруєнь гліклазидом, переважно при суїцидальному передозуванні, які відповідно чинного законодавства мають бути піддані судово-токсикологічним дослідженням з ізолюванням токсиканту з біологічних об'єктів, виявленням та кількісним його визначенням в одержаних вилученнях.

У вітчизняних судово-токсикологічних лабораторіях перевага надається рідинній екстракції, як методу ізолювання, очищення та концентрування токсикантів. Проте, застосування методу твердофазної екстракції (ТФЕ) дозволяє істотно знизити сумарний час аналітичного дослідження, зменшити витрату розчинників та дозволяє уникнути значного числа помилок.

Як об'єкт дослідження використовували кров, з якої одержували плазму шляхом центрифугування проби протягом 20 хв при 15000 об/хв. Для очистки плазми від її компонентів та концентрування гліклазиду методом ТФЕ застосовували картриджі «Oasis HLB Extraction Cartridge», 30 mg. Попередня підготовка картриджів полягала в їх кондиціонуванні 1 мл метанолу та 1 мл води дистильованої. Після цього через картриджі пропускали по 1 мл плазми та промивали 0,1 М розчином кислоти хлоридної. Елюювання токсиканту проводили 2 мл метанолу, підкисленого 0,1 % розчином кислоти хлоридної. Одержані елюати випаровували в потоці азоту, сухі залишки розчиняли в 200 мкл метанолу.

Виявлення гліклазиду в метанольному елюаті та його кількісне визначення проводили методом ВЕРХ з УФ-детектуванням на рідинному хроматографі «Міліхром-А-02» (ЗАТ «Еконова», Новосибірськ). Для розділення речовин використовували обернено-фазову колонку Prontosil-120-5-C18-AQ розміром Ø2×75 мм, зерніння 5 мкм («Bischoff Analysetechnik und Geräte GmbH», Німеччина). Аналіз та обробку хроматограм здійснювали програмою «Аналітика-Chrom».

Ідентифікацію гліклазиду проводили за відповідним часом утримування на хроматограмах. Піки речовин на відповідних хроматограмах метанольного розчину стандартного зразка гліклазиду та метанольного елюату, одержаного з сорбенту картриджів Oasis HLB, були співвідносними за часом утримування ($t_R = 7,80$ хв). Кількісне визначення гліклазиду проводили за довжини хвилі 230 нм за залежністю площі піку метанольного розчину стандартного зразка гліклазиду від концентрації.

Встановлено, що застосування даного методу дозволяє виділити до 94 % досліджуваного токсиканту.

Одержані результати можуть бути використані при проведенні хіміко-токсикологічного аналізу біологічних об'єктів при отруєнні гліклазидом.

**СРЕДСТВО ДЛЯ ЛЕЧЕНИЯ ОСТЕОПОРОЗА
НА ОСНОВЕ КАЛЬЦИЕВЫХ СОЛЕЙ АМИНОКИСЛОТ***Манчик Е. А., Лопатик Д. В.*Институт физико-органической химии НАН Беларуси, г. Минск
aminoacid@ifoch.bas-net.by

Кальций играет очень важную и многогранную роль в жизнедеятельности животных и человека. Кальций необходим для образования и сохранения костной ткани человека. Межклеточное костное вещество содержит соединения кальция вместе с белками (главным образом коллагеном), обеспечивающими твердость и эластичность костей. Особое значение приобретает кальций для организма при возникновении остеопороза – системного заболевания скелета, характеризующегося снижением плотности и нарушением минерального состава костной ткани, приводящих к увеличению хрупкости костей и повышению риска переломов.

В качестве терапевтических средств больным назначаются препараты, содержащие в своем составе кальция карбонат, кальция цитрат и витамин D₃. Это средства Кальцемин (США), Кальцевид (Палестина), Кальций-Д₃ Никомед форте (Норвегия) и др. Проблема получения новых соединений кальция, обладающих лучшей биоусвояемостью по сравнению с препаратами на основе кальция карбоната и более эффективно выполняющих свою роль, остается острой до настоящего времени. Одним из путей решения этой проблемы может быть получение кальциевых солей аминокислот.

Целью исследования были синтез кальциевых солей глицина и L-пролина, получение на их основе нового лекарственного средства и изучение возможности его применения для профилактики и лечения остеопороза. Выбор указанных аминокислот для представленного исследования был обусловлен тем, что основная белковая составляющая костной ткани – коллаген – представляет собой полипептид из остатков 18 аминокислот, при этом доминирующими являются две аминокислоты: глицин и L-пролин.

Карбоксианионы глицина и L-пролина, находящиеся в разработанном средстве, являются самостоятельно действующими фармакологическими агентами, а не только носителями элементарного кальция.

На доклиническом этапе оценка специфического действия исследуемого средства проводилась на группах белых половозрелых беспородных крыс-самок. Исследование антирезорбтивного действия разработанного средства проводили с использованием модели гипоестрогенного остеопороза. По данным лабораторных и инструментальных исследований через три месяца после операции у всех животных, подвергнутых овариоэктомии, было подтверждено наличие остеопороза уменьшилась толщина кортикальной пластинки бедренной кости задней лапы и площадь костных балок губчатой части кости, снизились минеральная плотность костной ткани и содержание элементарного кальция в сухом остатке кости

Результаты доклинических исследований специфического действия фармацевтических композиций на основе кальция диглицината, кальция ди-L-пролината или их смеси показали, что наличие в составе лекарственного средства анионов глицината и L-пролината в сочетании с витамином D₃ обеспечивает более выраженное терапевтическое действие даже при меньшем содержании элементарного кальция в составе лекарственного средства по отношению к препарату сравнения Кальций-Д₃ Никомед Форте.

Лекарственное средство, содержащее кальциевые соли глицина и L-пролина, может быть использовано для профилактики и лечения остеопороза

Указанное лекарственное средство запатентовано в Республике Беларусь (Патент ВУ № 15346 Средство для профилактики или комплексной терапии остеопороза. Оpubл. 28.02.2012).

6-FLUORO-2,3-DIHYDROBENZO[b][1,4]DIOXINE AS A PRECURSOR IN SYNTHESIS OF PHARMACOLOGICALLY IMPORTANT DERIVATIVES

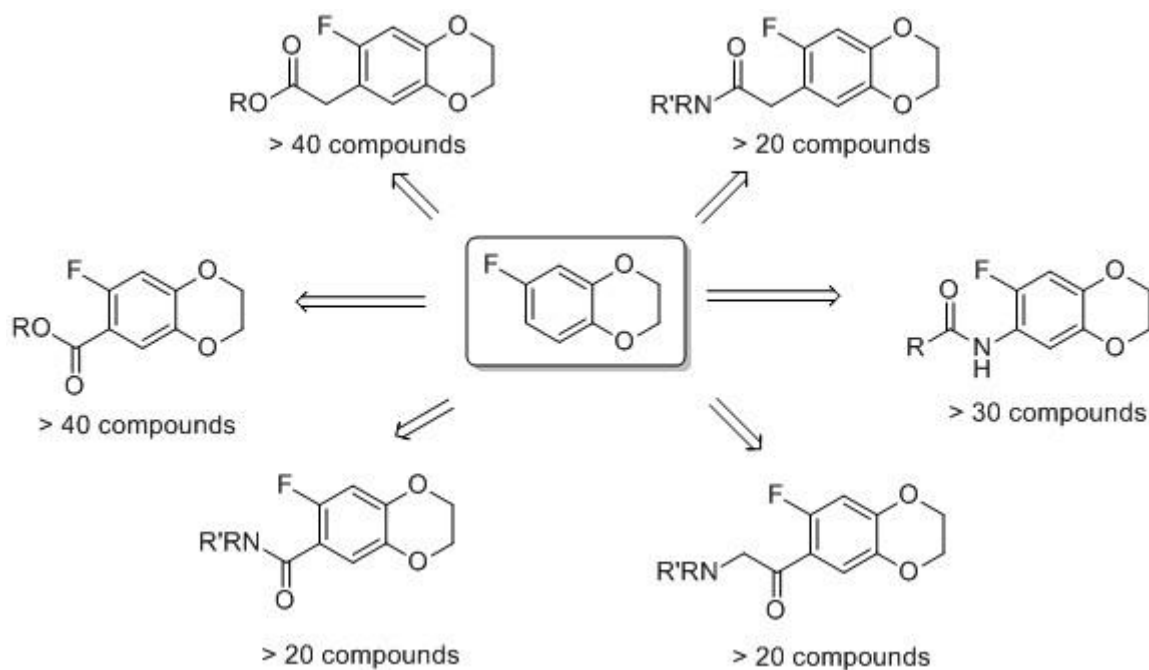
Orlov M. A.

L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic Chemistry and Coal Chemistry

NAS of Ukraine

orlovinfou@yandex.ru

Fluorine substituent as well as 2,3-dihydrobenzo[b][1,4]dioxane heterocyclic system are attractive fragments for design of novel pharmacologically important compounds. We have synthesized the library of derivatives containing 6-fluoro-2,3-dihydrobenzo[b][1,4]dioxane residue.



Structure and purity of obtained compounds was confirmed by NMR techniques, TLC and elemental analysis.

The expected pharmacological activity was evaluated using PASS software (<http://www.pharmaexpert.ru/passonline/>).

**РОЗРОБКА ТА ОПТИМІЗАЦІЯ СКЛАДУ ХАРЧОВОЇ ДОБАВКИ
«ОМЕГА-ТОНІК» У МУЛЬТИКАПСУЛЬНІЙ ОБОЛОНЦІ***Поливанов Є. А.*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, м. Дніпро
mr.egor.pv@gmail.com

Проблема здорового способу життя людини пов'язана, насамперед, з її прагненням раціонально харчуватись, уникати шкідливих звичок, займатися спортом. Однак при цьому, жоден з нас не може бути гарантовано застрахований від стресів, нервових напружень і депресій. Для вирішення цієї проблеми багато фармацевтичних компаній виробляють комплекси речовин, прийом яких здатен нейтралізувати згубний вплив ритму соціуму на центральну і периферичну нервову системи. Однак, цей ефект є тимчасовим і, у більшості випадків, не має пролонгації. Ще однією проблемою громадян є брак часу і відсутність бажання звертатися за допомогою до медичних установ для отримання кваліфікованих консультацій фахівців. Таке ставлення до власного здоров'я стає загрозою у боротьбі зі стресами.

Певну зацікавленість представляють дієтичні добавки до їжі, які стирають грань між медициною і традиційним харчуванням. Вони більш доступні для широкого кола населення, мають мінімальну кількість побічних ефектів, і найбільшою мірою засвоюються організмом людини. Крім того, по закінченню прийому мають пролонговану дію. Це пов'язано перш за все з тим, що до їх складу включені комплекси натуральних речовин у вигляді екстрактів. У сучасній фармацевтичній хімії велика частка існуючих екстрактів використовується в якості складових лікарських засобів. Сучасне розуміння збалансованого харчування також полягає у включенні до раціонів добавок, що містять максимальний комплекс активних речовин у одній «нормо-дозі».

Так, нами була розроблена харчова добавка до їжі у мультикапсульній оболонці «Омега-Тонік» (ТОВ «Веста-Лідер», м. Дніпро), яка дозволяє регулювати роботу нервової системи, покращувати процеси метаболізму, майже без протипоказань. Мультикапсульна оболонка дозволяє утримати високу фармакологічну активність добавки і розкрити позитивний ефект кожного з компонентів у місці їх максимального засвоєння. Складові розробленої композиції добре поєднуються між собою, взаємопідсилюючи фармакологічну дію один одного.

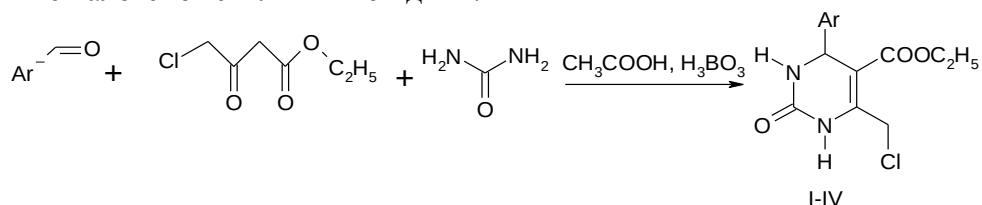
«Омега-Тонік» містить екстракт зеленого чаю, бурштинову та аскорбінову кислоти, хітозан та комплекс омега-кислот. Екстракт зеленого чаю містить потужні антиоксиданти – поліфеноли, які нейтралізують вільні радикали і запобігають розвитку багатьох захворювань. Янтарна кислота також має антиоксидантну активність, є потужним імуномодулятором і готовим метаболітом для участі в циклі Кребса, в ході якого виробляється АТФ. Цей ефект дозволяє клітинам всіх органів отримати більшу кількість енергії. Аскорбінова кислота (вітамін С) зміцнює імунну систему людини і захищає її від дії вірусів і хвороботворних бактерій, прискорює ранозагоєння, покращує вироблення гормонів і жовчовиділення. Хітозан зв'язує і виводить з організму ліпіди, що сприяє зниженню ваги. Комплекс омега-кислот дозволяє відновити роботу організму на клітинному рівні. Загальна дія харчової добавки «Омега-Тонік» направлена на підтримку рівня антиоксидантів, надання сил і життєвої енергії, нормалізацію роботи імунної та серцево-судинної систем, а також для профілактики онкозахворювань та зниження ваги.

СИНТЕЗ ЧЕТВЕРТИННИХ ОНІЄВИХ СОЛЕЙ НА ОСНОВІ 6-ГАЛОГЕНОМЕТИЛ-3,4-ДИГІДРОПРИМІДИН-2-ОНУ

Порфірян В. В., Арсеній Т. Г., Єфтенєва Р. І., Лявинець О. С.

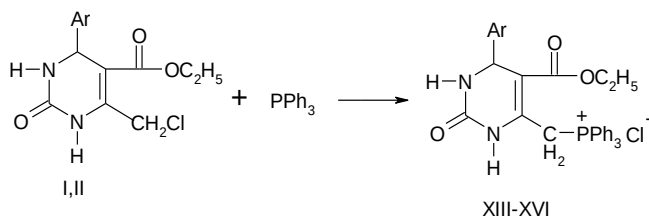
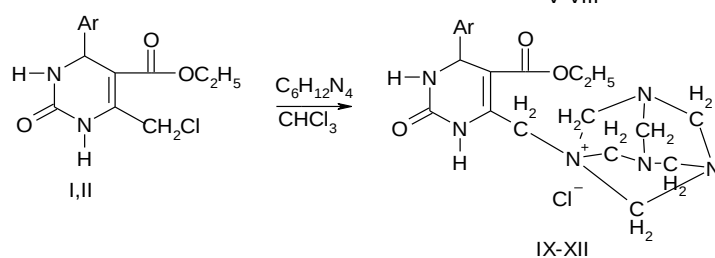
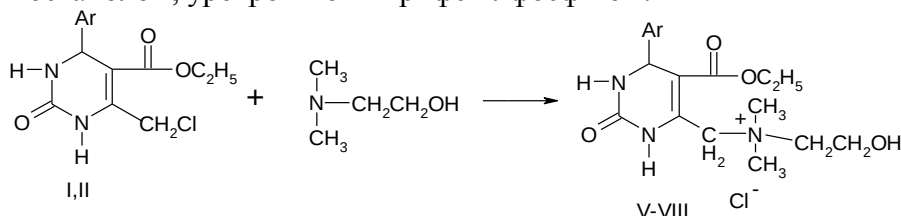
Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича
vladimirporfireanu@gmail.com

Похідні 3,4-дигідропіримідин-2-ону привертають увагу дослідників як системи із вираженим комплексом біологічної активності. Зокрема, в ряду естерів 3-заміщених 4-арил-3,4-дигідропіримідин-5-карбонових кислот виявлені блокатори кальцієвих каналів, що стало передумовою для створення нових протигіпертензивних агентів. Серед них знайдені сполуки із протизапальною, противірусною, бактерицидною та хемотерапевтичною дією. Крім того, гетероциклічні сполуки, екзофункціоналізовані онієвим угрупованням, зокрема амонієвим та фосфонієвим, виявляють високу фізіологічно активність. Тому є доцільним дослідити можливості синтезу 3,4-дигідропіримідин-2-онів із трифенілфосфоніометильним та диметилалкоксиамоніометильним угрупованням у положенні 6 піримідинового циклу. Першим етапом було одержання 6-галогенометильних похідних:



де Ar: C₆H₅ (I), 4-CH₃OC₆H₄ (II), 4-HO-3-CH₃O-C₆H₃ (III), 3,4-(CH₃O)₂C₆H₃ (IV)

Отримані таким чином 4-арил-5-етоксикарбоніл-6-хлорометил-3,4-дигідропіримідин-2-они I-IV були використані в реакції кватернізації з диметиламіноетанолом, уротропіном і трифенілфосфіном.



де Ar: C₆H₅, 4-CH₃OC₆H₄, 4-HO-3-CH₃O-C₆H₃, 3,4-(CH₃O)₂C₆H₃

Знайдено оптимальні умови кватернізації одержаних 4-арил-5-етоксикарбоніл-6-хлорометил-3,4-дигідропіримідин-2-онів з диметиламіноетанолом, уротропіном та трифенілфосфіном. Склад та будова синтезованих сполук підтверджена елементним аналізом та спектральними характеристиками.

IDENTIFICATION OF ATENOLOL BASED AGENTS IN REAL OBJECTS USING THE PRINCIPAL COMPONENT METHOD

Provorova Yu. R., Kabirova L. R., Zilberg R. A., Ganieva L. R.

Bashkir State University

32, Zaki Validi Street, 450074 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia

provorova-96@mail.ru

One of the most common diseases to date, are diseases of the cardiovascular system. Such as arterial hypertension, tachycardia, arrhythmia, etc. Atenolol is a medicinal product that helps fight these diseases. Chemically, atenolol is designated as 4-(2-hydroxy-3-isopropylaminopropoxy) phenylacetamide, is a cardioselective β -adrenergic blocker. Biological activity depends on one of the enantiomers. In particular, for atenolol, the S-enantiomer is 50–500 times more effective than the R-enantiomer. Various methods are used for the recognition and determination of enantiomers in drugs: gas chromatography in combination with mass spectrometry, spectrophotometry and analysis of injection of a stream, etc. But the above methods are expensive in equipment, long-term preparation of samples that require highly qualified specialists, etc. These problems are solved by electrochemical methods of analysis, in particular voltammetry.

In work, contaminated voltammetric sensors based on glass-carbon electrodes modified with composites of polyelectrolyte complexes of chitosan and chitosan succinamide with cyclodextrins for recognition of atenol enantiomers. Based on the analytical signals obtained, it is impossible to uniquely identify the test samples, due to the low selectivity of the method. The solution to this problem is the chemometric processing of data.

Five tablets of atenolol were ground into a powder. A portion, equivalent concentration of the solution of about 0.01 M, was weighed and transferred to a volumetric flask and filled up to the mark with redistilled water. The resulting solution was sonicated for 15 minutes and then centrifuged. A suitable amount of this solution was diluted in a borate buffer solution.

A sample of the centrifuged urine of a healthy male was diluted 10-fold in a borate buffer solution, and tests were performed using a DPV method by dumping a known amount of the drug. The results of three replicates and a satisfactory recovery of 99.7–103.0 % are shown in Table.

Table. Determination of ATN enantiomers in human urine samples on the GCE modified by CS-SCS composite of β -CD in borate buffer solution of pH 9.18 using DPV method at a scan rate of 20 mVs⁻¹

Sample	Spiked, μ M		Found, μ M		RSD, %		Recovery, %	
	R-ATN	S-ATN	R-ATN	S-ATN	R-ATN	S-ATN	R-ATN	S-ATN
Urine 1	10.0	10.0	9.9 $\pm$ 2.0	10.7 $\pm$ 2.3	2.0	3.3	98.6	106.9
Urine 2	15.0	15.0	14.7 $\pm$ 1.5	15.9 $\pm$ 1.1	2.5	1.2	97.7	105.9
Urine 3	20.0	20.0	21.0 $\pm$ 1.2	21.1 $\pm$ 1.6	1.3	2.9	104.7	105.6

From the data obtained, it can be seen that the proposed sensors and sensor system based on a GCEs modified by composites of the polyelectrolyte complex of CS and SCS with α -, β - and γ -CD can be successfully used to recognize and determine the enantiomers of atenolol in human urine as real samples.

**АДСОРБЦІЙНА ІММОБІЛІЗАЦІЯ АЛЬБУМІНУ
НАНОКОМПОЗИТОМ $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{SiO}_2$**

*Свиридюк К. П.¹, Поліщук А. О.¹, Кусяк Н. В.¹, Кальмбах С. С.¹,
Кусяк А. П.¹, Горбик П. П.²*

¹Житомирський державний університет ім. Івана Франка

²Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка НАН України

nkusyak@ukr.net

При введенні магніточутливих наноструктур (МН) в біологічне середовище відбувається адсорбція білкових речовин, що є першим бар'єром захисту від інородних патогенів, якими і є наноструктури. Саме це, а також розмір, форма, властивості поверхні та тип білків і є лімітуючими чинниками терміну вільного існування МН в біосередовищі. Тому дослідження активності поверхні МН щодо білкових речовин є необхідною умовою для розуміння процесів взаємодії МН з біосередовищем.

Проведено дослідження адсорбційної іммобілізації альбуміну поверхнею магніточутливого нанокompозиту складу $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{SiO}_2$. Методика синтезу нанокompозиту на основі магнетиту, модифікованого діоксидом кремнію, містить декілька стадій. На першій стадії одержали вихідний нанокристалічний магнетит за реакцію співосадження розчинів солей двох- і тривалентного заліза в лужному середовищі. Наступною стадією є модифікування поверхні магнетиту тетраетоксисилоном (ТЕОС) по принципу молекулярного нашарування. Саме цей компонент при реакції гідролізу ТЕОС та наступної конденсації продуктів гідролізу дає покриття з SiO_2 без зайвих домішок.

Вибір альбуміну в якості об'єкта обумовлений, по-перше, тим що його вміст в білковій фракції крові становить 55–65 %, по-друге – його здатністю до зв'язування катіонів важких металів та важливою участю в проходженні процесів життєдіяльності організму людини. Для визначення особливостей іммобілізації альбуміну (мед. препарат «Альбумін людини», розчин 10 %, допоміжні речовини – натрію хлорид, натрій каприловокислий, вода; вир-ва ЗАО «БІОЛІК», м. Харків) на $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{SiO}_2$ готували розчин з С (альбуміну) 160–1000 мг/л. Концентрацію альбуміну визначали за загальноприйнятою методикою кількісного визначення білкових речовин.

Проведено дослідження кінетики адсорбційної іммобілізації альбуміну в середовищі фізіологічного розчину (рис. 1, а). Час встановлення адсорбційної рівноваги становить близько 40 хвилин незалежно від концентрації альбуміну. Побудовані ізотерми адсорбції, розраховані значення сорбційної ємності та ступені вилучення. Характер ізотерми, з виходом на насичення, відповідає мономолекулярному типу адсорбції та може бути описана рівнянням Ленгмюра (рис. 1, б).

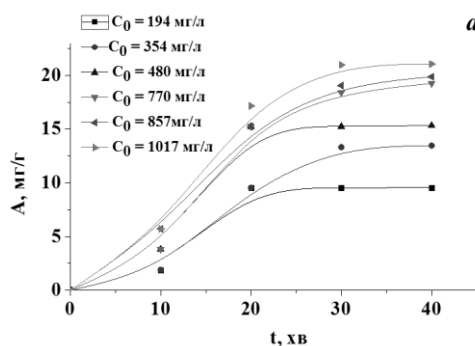


Рис. 1, а. Кінетика адсорбції альбуміну на поверхні нанокompозиту $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{SiO}_2$

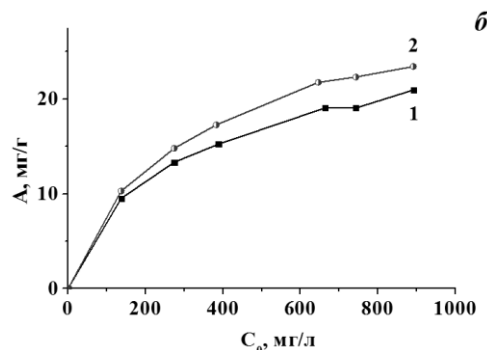


Рис. 1, б. 1 – експериментальна, 2 – розрахована ізотерма адсорбції альбуміну на поверхні нанокompозиту $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{SiO}_2$

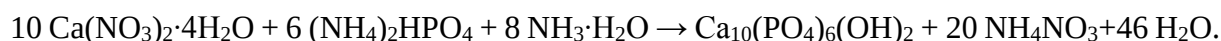
СИНТЕЗ ДЕНТАЛЬНОГО ГЕЛЮ НА ОСНОВІ ГІДРОКСИПАТИТУ З ЛІКУВАЛЬНИМ ЕФЕКТОМ

Сидоренко Я. Л., Шнуренко І. О., Яновська Г. О.

Сумський державний університет,
вул. Римського-Корсакова 2, м. Суми, Україна, 40007
yuiopuyiopovich@gmail.com
a.yanovska@teset.sumdu.edu.ua

Лікування захворювань пародонту вимагає комплексного підходу. Застосування стоматологічних гелів в цьому аспекті є надзвичайно актуальним. Такий гель повинен мати антибактеріальний ефект, містити активні компоненти які будуть чинити вплив протягом тривалого часу та сприяти ремінералізації емалі. В нашій роботі запропоновано синтез дентальних гелів на основі кальцій гідроксиапатиту (ГА), який є основним мінеральним компонентом емалі в поєднанні з антибактеріальними компонентами: метронідазолом та хлоргексидином. Використання цих препаратів допоможе боротися з бактеріями у ротовій порожнині, попереджуючи виникнення неприємного запаху із рота, карієсу тощо.

Синтез ГА здійснювали відповідно наступному рівнянню реакції:



До 500 мл 0,1 М розчину $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ додавали розчин аміаку, для створення лужного середовища, а потім по краплям додавали 0,06 М розчин $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$. Осаджений гідроксиапатит залишали в отриманому розчині на добу, відстоювали та промивали до нейтрального рН. ГА не лише сприяє ремінералізації і зміцненню емалі, а й має відбілюючу дію, при цьому не шкодить емалі як інші абразивні матеріали, які використовуються в зубних пастах бо знаходиться в гідратованому нанодисперсному стані.

У якості зв'язуючого компоненту та гелеутворювача було використано натрію альгінат (Альг), природний полісахарид, отриманий з морських водоростей. В якості ароматизатора до гелю додавали по декілька крапель ефірних олій розмарину та вербени. Отриману суспензію свіжоприготованого ГА змішували з 3 % водним розчином натрію альгінату. Співвідношення компонентів при синтезі дентального гелю наведені в таблиці. У зразку № 1 метронідазол було взято у вигляді гелю з концентрацією 10 мг/г, а в зразку 3 – у вигляді аптечного розчину з концентрацією 0,5 %. Хлоргексидин додавали у вигляді аптечного розчину з концентрацією 0,05 %.

Таблиця. Хімічний склад розчинів для синтезу дентальних імплантатів

Склад/ Зразок	Суспензія ГА	Розчин 3 % Альг	Метронідазол	Хлоргексидин
1	20 г	20мл	1 мл	—
2	20 г	20 мл	—	1 мл
3	40 г	90 мл	10 мл	—
4	40 г	90 мл	—	10 мл

Всі зразки показали себе добре, навіть після зберігання протягом двох місяців, однак айкращі характеристики, щодо консистенції та структурних особливостей має зразок № 2. Отримані гелі мають вражаючу дію для своєї собівартості в порівнянні з дорогими гелями з подібним ефектом, тому їх застосування є перспективним.

**ПЕРСПЕКТИВИ ВИКОРИСТАННЯ ЕКСТРАКТУ КАКАО З МЕТОЮ
ПРОФІЛАКТИКИ ХВОРОБИ АЛЬЦГЕЙМЕРА***Толошній Д. В.*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара
dan.tlh.99@gmail.com

На сьогоднішній день дуже багато вчених намагаються вирішити проблему старіння. Одним із найжахливіших захворювань людей третього покоління є хвороба Альцгеймера. Однак, необхідно констатувати той факт, що в останні роки, нажаль, симптоми цього важкого недугу діагностуються і у людей більш молодих. Одним з ефективних способів профілактики цього захворювання, як одного з факторів старіння, є споживання таких речовин, або їх комплексів, які мають підвищену активність до відновлення метаболічних процесів, міжклітинного обміну, стану серцево-судинної та центральної нервової систем.

Метою досліджень став пошук активних речовин, що містяться у природних системах, з метою розробки профілактичних засобів проти хвороби Альцгеймера.

Існує кілька гіпотез про природу походження хвороби Альцгеймера. Перша з них полягає у вивченні процесу відмирання клітин головного мозку за рахунок незворотних змін. Тому, багато фармацевтичних рішень базуються саме на відновленні роботи центральної нервової системи, шляхом додаткового внесення до організму людини речовин з підвищеною нейрорегуляторною функцією. В останні кілька років, коли медичні установи стали частіше діагностувати випадки цієї хвороби у людей, що не належать до категорії населення так званого «третього віку», питання про симптоматику, пов'язану з процесами старіння стало дискусійним. Існує гіпотеза і доказові факти про бактеріальну природу походження хвороби Альцгеймера.

Нами було проведено аналітичне дослідження, сконцентроване на пошуку засобів ефективної профілактики цієї хвороби, за результатами якого ми дісталися висновків, що швидко покращити стан здоров'я і, при постійному споживанні навіть відновити роботу організму у напрямку нейтралізації процесів відмирання клітин головного мозку, можна за допомогою шоколаду. Однак, зважаючи на високий вміст жиру і цукру у готовому виробі, а також на високу вартість даного продукту, нами було прийнято рішення вивчення хімічного складу основного компоненту шоколаду – какао-бобів, у яких міститься комплекс речовин, здатних ефективно провести профілактику хвороби Альцгеймера. Так, за результатами існуючих клінічних досліджень було встановлено, що флавоноїди какао здатні захистити організм людини від проявів хвороби Альцгеймера. Крім того дані речовини покращують печіночну циркуляцію жовчних кислот, збільшують кількість біфідобактерій, ентерококів и лактобацил, чим забезпечують детоксикацію товстого кишечника. Також флавоноїди знижують ризик серцево-судинних захворювань, виникнення атеросклеротичних бляшок в кровоносних судинах, проводять профілактику інсульту, допомагають впоратися з депресією. Епікатехін збільшує витривалість м'язів під час фізичних вправ та навантажень, знижує рівень цукру в крові, покращує ліпідний обмін незалежно від будь-яких змін в руховій активності, підсилює метаболізм, знижує рівень тривожності. Ресвератрол, як основний запобіжний засіб у боротьбі з хворобою Альцгеймера, поліпшує міжклітинний обмін речовин у мозку, покращує розумові здібності та відновлює циркуляцію крові у головному мозку, зміцнює імунітет і має антивірусну та антибактеріальну дію.

Враховуючи існуючі гіпотези, у ході експериментальних досліджень було отримано екстракт какао-бобів, який містить велику кількість діючих речовин у одній «нормо-дозі». Даний екстракт запропоновано для збагачення харчових продуктів постійного вжитку і дієтичних добавок до основних прийомів їжі.

Дослідження проводяться в рамках соціального проекту для літніх людей «Університет третього віку» за підтримки мера м. Дніпра Філатова Б.А. (Науковий керівник – к.т.н., доцент Кондратюк Н.В.)

**КІЛЬКІСНЕ ВИЗНАЧЕННЯ АНТИДЕПРЕСАНТА АТОМОКСЕТИНА
ЕКСТРАКЦІЙНО-СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНИМ МЕТОДОМ ЗА РЕАКЦІЄЮ
З КИСЛОТНИМ АЗОБАРВНИКОМ – ПОХІДНИМ ТЕОФІЛІДИНУ**

Томаровська Л. Ю., Карпушина С. А., Баюрка С. В.

Національний фармацевтичний університет

svitkrp@gmail.com

Метою роботи було розробка і валідація методики кількісного визначення антидепресанта атомоксетина екстракційно-спектрофотометричним методом, придатним для цілей хіміко-токсикологічного аналізу. Зареєстровані неодноразові випадки гострих і летальних отруєнь атомоксетином, який застосовують в фармакотерапії синдрому дефіциту уваги та гіперактивності, а також терапевтично резистентних депресій. Посмертні концентрації атомоксетина становили в крові 0,1–8,3 мг/л, в жовчі 1,0–33 мг/л, в печінці 0,44–29 мг/кг. Сучасною тенденцією розвитку біоаналітичних методик визначення атомоксетина є превалювання методів колонкової хроматографії з МС-детектуванням. Однак останні пов'язані з використанням високовартісного обладнання і тому не завжди доступні.

Нами розроблено чутливу і селективну методику кількісного визначення атомоксетина екстракційно-спектрофотометричним методом за реакцією з кислотним азобарвником, синтезованим на основі теофілідина – 4-(4'-метиламіно-5'-метилкарбамоїл-2'-імідазолазо)бензолсульфо кислотою. Зазначена сполука представляє інтерес як реагент для екстракційно-фотометричного визначення лікарських речовин. Це обумовлено тим, що на відміну від метилового оранжевого, вказаний вище азобарвник більш селективно утворює іонні асоціати з нітрогенвмісними органічними основами. В якості реагента використовували 0,1 % розчин азобарвника у воді. З атомоксетином азобарвник утворював іонні асоціати, що максимально екстрагувались хлороформом при рН 2,8–3,1. Необхідне значення рН створювали за допомогою універсальної буферної суміші Бриттона-Робінсона. Інтенсивність рожевого забарвлення іонних асоціатів у хлороформі виявилась низькою. У зв'язку з цим ми збільшували чутливість визначення шляхом руйнування іонного асоціата за допомогою ацетатного буферу з рН 6, який містив 0,1 % розчин купрум (II) сульфату. При струшуванні хлороформного розчину іонного асоціата з розчином купрум (II) сульфату водний шар набував інтенсивного рожевого забарвлення, пов'язаного з реекстракцією азобарвника та утворенням його комплексу з іонами купруму (II). Обране значення рН ацетатного буфера відповідало максимуму комплексоутворення. Світлопоглинання забарвлених розчинів вимірювали на спектрофотометрі СФ-46 при довжині хвилі 540 нм у кюветі з товщиною поглинаючого шару 10 мм, в якості розчину порівняння використовували розчин, отриманий у «холостому» досліді. Субстанцію атомоксетина гідрохлорида було виділено з капсул «Страттера» (60 мг) виробництва «Eli Lilly» (Чехія). Для побудови градувального графіка готували стандартний розчин препарату з концентрацією 200 мкг/мл (у перерахунку на атомоксетин-основу). Калібрувальний графік описувався рівнянням $y = (0,00513 \pm 3 \cdot 10^{-5}) \cdot x$; лінійність спостерігали в межах концентрацій атомоксетина 20,0–200,0 мкг/мл; LOD та LOQ становили, відповідно, 2,1 мкг та 6,4 мкг в пробі. Правильність і прецизійність (*intra-day*) складали 101,5 % (RSD = 2,2 %) в області низьких концентрацій аналіта, 100,3 % (RSD = 1,5 %) в області середніх концентрацій та 99,6 % (RSD = 1,2 %) в області високих концентрацій.

Таким чином, розроблена методика екстракційно-спектрофотометричного визначення атомоксетина задовольняє вимогам до методів, які використовуються в хіміко-токсикологічному аналізі, що підтверджено валідаційними параметрами.

**VOLTAMMETRIC SENSOR FOR DETERMINATION OF PROPRANOLOL
IN BIOLOGICAL FLUIDS**

Fayzullina Yu. G., Khabletdinova A. I., Zilberg R. A.

Department of Chemistry, Bashkir State University,

Ufa, Zaki Validi, 32, Bashkortostan, 450076

ZilbergRA@yandex.ru

Propranolol is a widely used β -adrenoblocker, which is prescribed for the treatment of hypertension, cardiac arrhythmia, and prevention of secondary myocardial infarction. Propranolol is used in sports and other stressful situations, acting as a doping agent. Propranolol and its analogues contribute to the development of an antianginal effect, which is manifested by an improvement in the state of the heart muscle, a decrease in the amount of oxygen necessary for its work. This means that the heart requires less oxygen to contract, and the frequency of these reductions also decreases. The drug slows the heart rate in animals, which leads to its use in the race industry. Because of its properties, propranolol is prohibited during the competitive period in certain sports (motor sport, billiard sports, golf, darts, skiing / snowboarding, scuba diving). It is not allowed to use it all the time in the following sports: shooting and archery. It is rapidly metabolized after administration, therefore traces of the drug in biological fluids can be detected with great difficulty some time after the intake. Detection of metabolites and drug residues can provide evidence of the use of doping.

The presence in the propranolol hydroxyl group makes the drug electroactive. Oxidation of propranolol irreversibly proceeds with the transfer of 2 electrons and the formation of a clear peak on the voltammogram in the range of potentials of 800–1400 mV.

In the proposed work, the electrochemical behavior of propranolol contained in urine, on a glassy carbon electrode (SEM) modified with polyarylenephthalide – SO (PAF-SO), was studied. Optimal conditions were chosen for carrying out the electrochemical analysis of propranolol on the SEM modified PAF-SO: the concentration of the propranolol solution was 0.0134 mM, the sweep rate was 0.1 V / s. The effect of the pH of the electrolyte was examined between pH values of 2.00–9.00. The oxidation peak of the compound studied was wider in a neutral medium, which makes the quantitative estimate unreliable. The highest and clearest peak was observed at pH 3.0. Therefore, this pH value was used for further study. The accumulation time is 60 seconds. Linear calibration curves were obtained for concentrations between 4.22×10^{-6} – 1.35×10^{-4} mol L⁻¹ for propranolol.

A further peak at a potential of 0.65 V is observed in the study of a model urine sample. Additional experiments have shown that this peak is associated with a uric acid oxidation reaction. The proposed method can be used to monitor propranolol in biological fluids.

The authors thank the Russian Science Foundation (Grant No. 16-13-10257) for financial support.

A VOLTAMPEROMETRIC SENSORY SYSTEM FOR RECOGNITION OF TRYPTOPHAN ENANTIOMERS IN BIOLOGICALLY ACTIVE DIETARY SUPPLEMENTS

Khabletdinova A. I., Murzina K. A., Yarkaeva Yu. A.

Bashkir State University, Ufa, 32, Validy st., 450076, Russia
aigulik17mail.ru

Tryptophan is an indispensable amino acid which is a proteinogenic amino acid and is part of the proteins of all known living organisms. In nature, tryptophan synthesizes microorganisms, plants and mushrooms. Multicellular animals are not able to synthesize tryptophan, they need to get it with protein food. Tryptophan is found in many food products, for example - in black and red caviar, cheese, peanuts, chicken, rabbit meat and turkey. However, often a natural influx of tryptophan not even enough for people who do not exercise and do not experience regular physical activity. A deficiency of tryptophan in the diet can lead to serotonin. Low levels of serotonin are associated with depression, irritability, uselessness, kostvum, impatience, impulsiveness, inability to concentrate, eating, memory problems and insomnia. Therefore, determination of tryptophan in food, pharmaceuticals, food additives and living organisms, especially humans is very important.

Method validity was tested with real samples containing auxiliary substances (calcium pantothenate, pyridoxine, cellulose, silicon and titanium dioxides, gelatin and others). As real samples, L-tryptophan-containing dietary supplements from various manufacturers (Now Foods, Jarrow Formulas, Evalar, and Scitec Nutrition) were chosen. 0.035 mM solutions of Trp enantiomers were used as reference samples and real samples whose solutions had the same concentrations were used as test samples. The recognition results are presented in Table. All real samples were recognised to be L-tryptophan. The percentage of correctly recognized samples is over 80 %, and errors of the second kind are lower of 11 %. It should be noted that with individual GCEs modified by PAP composite of α -, β -, and γ -CD, in the presence auxiliary substances resulted in only 30 % of samples were being correctly recognized. The proposed sensory system is sensitive to the composition of the excipients in biologically active dietary supplements containing L-Trp, which ensures the establishment of the manufacturers.

Table. Discriminant responses (RS/TS) of PLS-DA model in percentage (%) of real samples containing L-tryptophan using sensory system based on GCEs modified by PAP composites of α -, β -, γ -CD

RS* TS**	Sample 1	Sample 2	Sample 3	Sample 4
Sample 1	89	3	1	7
Sample 2	2	89	11	3
Sample 3	1	10	82	7
Sample 4	7	2	6	88

The authors thank the Russian Science Foundation (Grant No. 16-13-10257) for financial support.

VOLTAMMETRIC SENSORS AND SENSOR SYSTEMS BASED ON ELECTRODES MODIFIED BY "SMART POLYMERS": NEW POSSIBILITIES FOR INCREASING SELECTIVITY

Maistrenko V. N., Zilberg R. A., Khabletdinova A. I., Kabirova L. R., Dubrovsky D. I., Yarkaeva Yu. A.

Bashkir State University, Ufa, 32, Validy st., 450076, Russia

ZilbergRA@yandex.ru

Voltammetric sensors and sensor systems based on electrically conductive polymer-modified electrodes are widely used to solve various analytical problems, such as detection of counterfeit medicines, beverages, technical fluids, etc. In this case, in general, sensors that are selective to one or another molecule of the analyte are used, which makes it impossible to recognize multicomponent mixtures containing various electroactive components, or multisensor systems from several electrodes must be used. The use of "smart" voltammetric sensors, the selectivity of which can be regulated in situ, allows to solve this problem quite simply. However, the voltammetric characteristics and properties of "smart" sensors have not been studied enough.

We developed sensors based on modified glass-carbon electrodes with polymeric polyarylenephthalide films with in-situ controlled stereoelectronic properties and different sizes of the chelate cycle. In this case, there is no need to use several electrodes, the analytical signals of which differ from each other, which allows using modern methods of chemometrics to obtain a computer "print" of the recognized component. In addition, there is a fundamental possibility of recognizing compounds containing optically active isomers.

We studied the electrochemical properties of the glassy carbon electrodes modified by these polymers, the structure and morphology of their surface, the adsorption characteristics and selectivity of the accumulation of analyte molecules, the effect on the selectivity and stereoelectronic properties of the polyarylene phthalide electrode potential. As the analyzed objects, antiarrhythmic drugs (propranolol, atenolol) and amino acids (tryptophan, cysteine, methionine) of various manufacturers were chosen. The effect on the magnitude of the analytical signal and its selectivity on the nature of the compounds and inert components studied, the composition of the matrix, the measurement conditions are optimized, and the methods for mathematical processing of experimental data are considered.

The use of chemometric methods (method of principal components (PCA), Simka-classification, projection on latent structures (PLS)) for the processing of voltammetric data makes it possible to recognize the investigated pharmaceutical preparations by the manufacturer with a probability of not less than 90 %.

The authors thank the Russian Foundation for Basic Research (Grant No. 18-03-00537-a) for financial support.

**INORGANIC CHEMISTRY /
НЕОРГАНІЧНА ХІМІЯ**

THE VARIED COORDINATION COMPOUNDS OF THE ANESTHETIC LIGANDS WITH PLATINUM (II) AND PALLADIUM(II)

*Azizova A. N.*¹, Tagiyev D. B.¹, Gasanov K. I.², Gasimov Sh. G.²

¹Azerbaijan National Academy of Sciences, Institute of Catalysis and Inorganic Chemistry
named after acad. M. Nagiyev, Baku, Azerbaijan

²Azerbaijan Medicine University, Baku, Azerbaijan
iradam@rambler.ru

At the present time coordination compounds obtaining with biometals and heavy metals on the basis of biologically active ligands and some of medicines have changed to a large investigative object. In the investigation the ligands having N-, S-, O-donor atoms and/or functional groups pertaining to these atoms are usually used.

The main goal here was obtaining of biologically active coordination compounds that effect alternatively and even effect through another mechanism. The coordination compound of platinum (II) and palladium (II) has been obtained in the acidic medium with lidocaine-2-(diethylamine)-N-(2,6-dimethylphenyl)-acetamide has a local anesthetic feature.

The complexoformation reaction has taken action at 60 °C, in the acidic medium and the ratio of the binary salts of Pt(II) and Pd(II) to lidocaine (Me:lid) was 1:1. At the result of the reaction the cationic-anionic complex compounds with (LidH)₂[Pdhal₄] and (LidH)₂[Pthal₄] contents were formed. It is necessary to note that at pH = 7,5–8 the nonelectrolyte such as [Me(Lid)₂hal₂] was formed (hal→Cl, Br). The elemental analysis of synthesized complexes has been carried out and their melting and decomposition temperatures have been determined. One adsorption band of 425 and 430 cm⁻¹ in the IR-spectrum was used to determine of the structure of the complexes.

The IR-spectroscopic researches of the complexes indicate that platinum and palladium coordinate directly with acidoligands in the cationic and anionic complexes. The evidence of that is existence of just one adsorption band of 425 and 430 cm⁻¹ in the IR-spectra of both complexes. But molecule of lidocaine as cation forms outer sphere as a result of protonating (3410 and 3446 cm⁻¹) of trio nitrogen atom.

In the spectrum of neutral [Me(Lid)₂hal₂] complexes the adsorption bands 470, 458 and 341, 346 cm⁻¹ show that ligand is coordinated with central atom through trio nitrogen atom. Other two bands located in the high area belong to Me–hal bond.

When complex compounds are dissolved in water and in water-alcohol mixture no structural changes happen. It is important especially in pharmacological investigation of these compounds.

NEW MAGNETIC COMPOUNDS BASED ON ZINC CHROMIUM SELENIDE

 ZnCr_2Se_4 *Barsova Z.*, Jendrzejewski I.¹University of Silesia, Poland

z.v.barsova@gmail.com

It is seeing nowadays a growing interest to an important problem dealing with the resource gap and using of alternative energy resources. That's way the question dealing with renewable energy sources is gaining popularity. Renewable energy is a numbers of ways to use the inexhaustible resources to produce electricity or other forms of energy. Solar cells based on thermoelectric generates could produce electrical energy from heat energy. Thermoelectric materials (semiconductors) which help to decide this problem play big role in chemistry of today and the future. For this purpose we need n-type and p-type material and technically more advantageous when one material allows to get both of this types.

One of the most interest compounds is zinc chromium selenide, which is a semiconductor with helical magnetic structure. It is possible to improve the electrical and magnetic properties of the materials based on ZnCr_2Se_4 using of some additives, for example Cu, Ni, Ho, Mn, Dy, Gd, Sn. The substitution of zinc or chromium with another metal leading to essential changes of the cation distribution and modifying physical properties of ZnCr_2Se_4 .

In our research we concentrated on synthesis and investigation of physical and chemical properties of ZnCr_2Se_4 doped selected transition elements and rare-earth elements. It was studied chemical composition and structure of synthesized materials, as well as, their magnetic and electric properties. The final results showed that the presence of third cation influences electrical and magnetic properties of selenide. For example, our studies showed that substitution in the ZnCr_2Se_4 matrix of tin and gadolinium radically changes the magnetic properties. Magnetic and specific heat measurements showed the spin-glass-like behaviour below the freezing temperature $T_f = 13 \div 15$ K for ZnCr_2Se_4 doped with tin and antiferromagnetic order with the Néel temperature $T_N \sim 22$ K as well as the spin-glass behaviour of the re-entrant type with the freezing temperature $T_f = 7.3$ K for ZnCr_2Se_4 doped with gadolinium connected with the strong competition between AFM and FM exchange interactions visible in both cases by the splitting of the ZFC-FC susceptibilities.

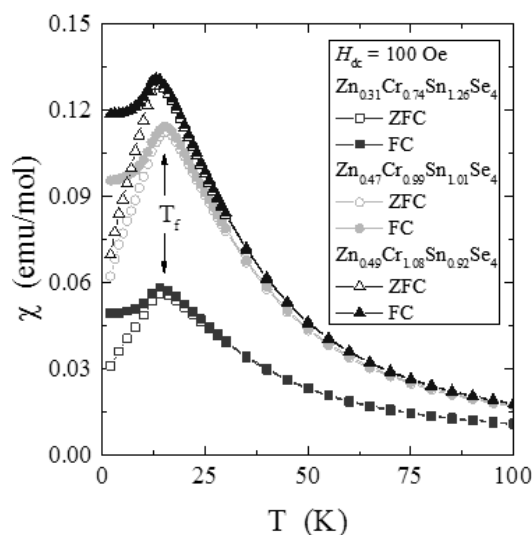


Fig. ZFC and FC dc magnetic susceptibility χ_{mol} vs. temperature T at $H_{dc} = 100$ Oe for the spinels under study. T_f indicated by arrow is the freezing temperature

СПОСІБ ТРИСТАДІЙНОЇ ПЕРЕРОБКИ ФОСФОГІПСУ ДИГІДРАТУ НА ГІПСОВЕ В'ЯЖУЧЕ

Вазієв Я. Г.¹, Павленко О. В.

Шосткинський інститут Сумського державного університету
ra.november@gmail.com

В останні часи розвинені країни все більше приділяють уваги переробці хімічних відходів. Одним з багатотонажних відходів є фосфогіпс, що утворюється при виробництві екстракційної фосфатної кислоти та фосфатних добрив.

Основний компонент фосфогіпсу – дигідрат кальцію сульфату не має в'язучих властивостей. Для переведення його у форму напівгидрату необхідно проведення операцій дегідратації. У світовій практиці цей процес здійснюють термічною обробкою сировини за температур 110–190 °С або автоклавуванням під тиском 0,23 МПа, протягом 1–2 годин, що потребує значних енергетичних витрат.

Незважаючи на велику кількість існуючих досліджень, тема утилізації фосфогіпсу й досі є актуальною і, зважаючи на значне погіршення екологічної ситуації, вимагає термінового вирішення.

На меті було отримання в'язучого з високими показниками міцності та низькою собівартістю за рахунок виключення енергоємних стадій автоклавування, фільтрації та сушіння. Також планувалося підвищити ступень вилучення шкідливих домішок з фосфогіпсу.

Розроблена технологія переробки сировини включає операції:

- промивання фосфогіпсу водним 0,1–5 % розчином триетаноламіну;
- обробку концентрованою сульфатною кислотою за мольного співвідношення сульфатна кислота:вода – 1:5–1:7 (за початкової температури суміші 80–90 °С);
- додавання кальцію оксиду.

Таблиця. Хімічний склад зразків фосфогіпсу до та після промивання

Компоненти	до проми-вання	після проми-вання водою	після промивання розчином триетаноламіну
Фосфатів (у перерахунку на P ₂ O ₅)	1,2 %	1 %	0,6 %
Водорозчинних фосфатів (у перерахунку на P ₂ O ₅)	0,7 %	0,5	0,1 %
Фторидів (у перерахунку на F)	0,12 %	0,09 %	0,07 %
Водорозчинних фторидів (у перерахунку на F)	0,06 %	0,04 %	0,01 %

Як видно з таблиці, промивання фосфогіпсу водним розчином триетаноламіну максимально видаляє шкідливі домішки, в результаті чого подальше структуроутворення гіпсових виробів проходить більш ефективно. Після промивання утворюється суспензія дигідрату кальцію сульфату, яка на другій стадії піддається хімічній дегідратації шляхом додавання концентрованої сульфатної кислоти. Кислота поглинає вологу з фосфогіпсу дигідрату, що супроводжується виділенням великої кількості тепла, при цьому відбувається саморозігрів суміші до температури початку дегідратації дигідрату кальцію сульфату. Кількість тепла, що виділяється, в процесі гідратації сульфатної кислоти залежить від кількості молекул води, які вступають реакцію. За даними дослідження кращі результати спостерігаються за мольного співвідношення сульфатна кислота:вода – 1:5–1:7. Для нейтралізації надлишку сульфатної, залишків фосфатної та флуоридної кислот необхідне введення кальцію оксиду.

Таким чином, запропонований спосіб переробки фосфогіпсу дозволяє отримувати гіпсове в'язуче марки в'язучого Г-8.

CRYSTAL ENGINEERING OF COPPER(I) AND SILVER(I) π -COMPLEXES WITH 1,2,4-TRIAZOLES ALLYL DERIVATIVES

Hordiichuk O. R., Slyvka Yu. I., Mys'kiv M. G.

Ivan Franko National University of Lviv,
79005, Lviv, Kyryla i Mefodiya Str. 6
o.hordiychuk@gmail.com

A great variety of Cu(I) and Ag(I) π -complexes with allyl-derivatives of numerous acyclic and heterocyclic ligands has been investigated over the last decades. As a result, many aspects of the influence of ligand structure, anion type and synthetic conditions on π -complexes crystal structure formation and on the effectiveness of the M(I)–(C=C) (M = Cu, Ag) interaction were studied. Nevertheless, much more still remains unexplored as it is evidenced by recent interesting results such as the discovery of new inorganic structural fragments, obtaining the first π -complexes with a number of anions, synthesis of the unique heterometallic complexes. This was made possible by the development of new synthetic approaches that allow the obtaining of Cu(I) and Ag(I) π -complexes in the form of high-quality single crystals by alternating-current electrochemical method or by direct interaction. This class of compounds is interesting because of their catalytic, biological, photoluminescent and optoelectronic properties.

Recently, the first π -complexes of Cu(I) with allyl derivatives of 1,2,4-triazole were investigated. The organic ligand acts as multidentate chelating π,σ -donor using triazole and η^2 -allyl moieties, resulting in a formation of the dimeric {Cu₂N₄} core with a trigonal-pyramidal

environment of the Cu cation. These dimers retain their stability even in the acetonitrile solution (which is known to be highly affined to Cu(I)), what was detected by means of ¹H and ¹³C NMR.

Herein, a series of first Cu(I) and Ag(I) π -complexes with new derivatives of 1,2,4-triazole with such anions as Cl[–], Br[–], I[–], NO₃[–], ClO₄[–], SO₄^{2–}, BF₄[–], SiF₅[–], CF₃COO[–] and others are presented. A comparative analysis of the structures of new coordination compounds with already known is carried out and it is shown how changes in the ligand structure affect the crystalline organization of the complexes. Depending on the substituents in the 1,2,4-triazole core, as well as on the synthetic conditions, structures of varying dimensionality (0D, 1D, 2D) can be obtained. In addition to this, results of the study of nonlinear optical properties for the 1D copper(I) iodide complex with 2-allyl-3-

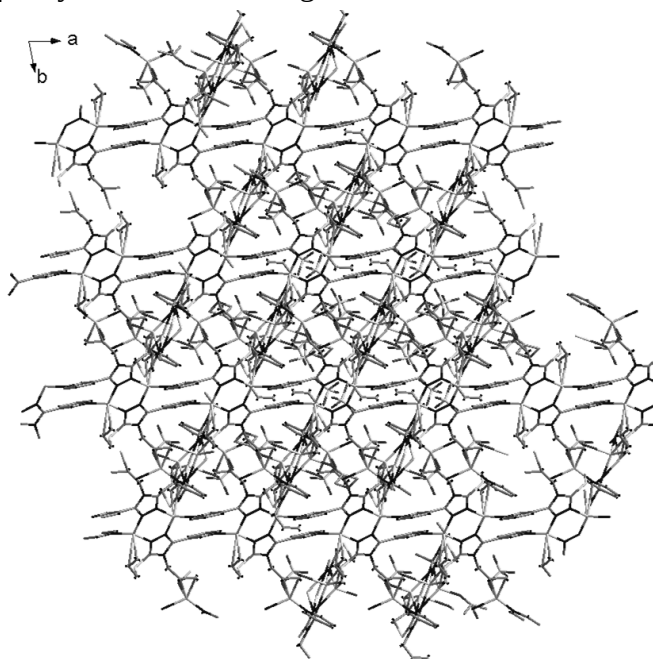


Fig. A part of the crystal structure of 2D AgClO₄ π -complex with 3-allylsulfanyl-4-allyl-5-*m*-pyridyl-4H-1,2,4-triazole

allylsulfanyl-2H-1,2,4-triazole are presented.

Particularly interesting is the structure of AgClO₄ π -complex with 3-allylsulfanyl-4-allyl-5-*m*-pyridyl-4H-1,2,4-triazole (**L**) (Fig.), in which dimeric cationic [Ag₂(**L**)₂]²⁺ fragments are linked into the 2D network by means of the N atom of the pyridine core, the bridging perchlorate anions and the 4-allyl group, which is η^2 -coordinated. It is worthy of note that this is the first complex with 1,2,4-triazoles in which the 4-allyl group is coordinated, despite the electron deficiency of the C=C bond.

ДІАГРАМА СТАНУ СИСТЕМИ Dy–Ga–Ge (0–33,3 ат. % Dy, 600 °C)

Деленко Т. О., Токайчук Я. О., Гладішевський Р. Є.

Кафедра неорганічної хімії

Львівського національного університету імені Івана Франка,

вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

tarasdelenko@gmail.com

Для встановлення фазових рівноваг і визначення кристалічної структури сполук у системі Dy–Ga–Ge в області 0–33,3 ат.% Dy ми виготовили 62 дво- та трикомпонентні сплави електродуговим сплавлянням металів високої чистоти в атмосфері аргону. Гомогенізуючий відпал зразків здійснили у вакуумованих кварцових ампулах при температурі 600 °C впродовж 1 місяця. Фазовий аналіз зразків провели за рентгенівськими порошковими дифрактограмами, отриманими на дифрактометрі ДРОН-2.0М (проміння Fe K α). Кристалічну структуру тернарних сполук визначили рентгенівським дифракційним методом порошку за дифрактограмами, отриманими на дифрактометрі STOE Stadi P (проміння Cu K α_1). Уточнення параметрів профілю рентгенограми та параметрів кристалічної структури ідентифікованих фаз здійснили методом Рітвельда з використанням пакету програм FullProf Suite.

У системі Dy–Ga–Ge при 600°C на ізоконцентраті 22 ат.% Dy існує тернарна сполука змінного складу Dy₂(Ga_{0,32-0,13}Ge_{0,68-0,87})₇. Її кристалічну структуру визначено методом порошку для складу Dy₂(Ga_{0,26}Ge_{0,74})₇: структурний тип (СТ) Sm₂(Ga_{0,26}Ge_{0,74})₇, символ Пірсона (СП) oS80-8, просторова група (ПГ) *Cmce*, $a = 8,3284(6)$, $b = 8,0320(6)$, $c = 20,9167(15)$ Å. Структура сполуки належить до гомологічної серії структур, побудованих зрощенням фрагментів структурних типів AlB₂ (шари тригональних призм), BaAl₄ (шари тетрагональних антипризм) і α -Po (шари кубів).

Заміщення атомів Ga на атоми Ge у бінарній сполуці DyGa₃ (СТ Ta(Rh_{0,33}Pd_{0,67})₃, СП *hP40*, ПГ *P6₃/mmc*) при 600 °C приводить до утворення сполуки змінного складу Dy(Ga_{0,97-0,84}Ge_{0,03-0,16})₃ з відмінною структурою (СТ Mg₃In, СП *hR48*, ПГ *R-3m*, $a = 6,1707(3)$ - $6,22374(10)$, $c = 27,7297(15)$ - $28,1185(5)$ Å). Подальше збільшення вмісту Ge приводить до утворення ще однієї тернарної сполуки на ізоконцентраті 25 ат.% Dy – Dy(Ga_{0,77-0,73}Ge_{0,23-0,27})₃ (СТ PuAl₃, СП *hP24*, ПГ *P6₃/mmc*, $a = 6,0970(3)$ - $6,1091(6)$, $c = 14,3153(8)$ - $14,3528(14)$ Å). Структурні типи Ta(Rh_{0,33}Pd_{0,67})₃, Mg₃In і PuAl₃ є представниками найщільніших упаковок атомів і відрізняються кількістю і способом укладки щільноупакованих шарів атомів. Збільшення вмісту Ge у сполуках системи Dy–Ga–Ge на ізоконцентраті 25 ат.% Dy приводить до реалізації щільноупакованих структур з меншим ступенем гексагональності.

Заміщення атомів Ga на атоми Ge у бінарній сполуці DyGa₂ (СТ AlB₂, СП *hP3*, ПГ *P6/mmm*) приводить до утворення твердого розчину заміщення Dy(Ga_{1-0,78}Ge_{0-0,22})₂ вздовж ізоконцентрати 33,3 ат.% Dy. Встановлено, що збільшення вмісту Ge у ньому супроводжується збільшенням ковалентності у зв'язках між атомами *p*-елементів, і відповідно, зменшенням параметра a елементарної комірки і збільшенням параметра c ($a = 4,199$ - $4,17600(13)$, $c = 4,066$ - $4,0951(2)$ Å). Подальше збільшення вмісту Ge приводить до утворення тернарної сполуки змінного складу Dy(Ga_{0,70-0,63}Ge_{0,30-0,37})₂ (СТ α -ThSi₂, СП *tI12*, ПГ *I4₁/amd*, $a = 4,16411(9)$, $c = 14,4832(3)$ Å для складу Dy(Ga_{0,70}Ge_{0,30})₂). Структурні типи AlB₂ і α -ThSi₂ належать до гомологічної серії структур, побудованих зрощенням одного типу фрагменту (шар тригональних призм), але в різній орієнтації.

ФТАЛОЦІАНІНОВІ КОМПЛЕКСИ ЦИРКОНІЮ ТА ГАФНІЮ З АЛКІЛАМІНО- β -КЕТОЄНОЛЬНИМИ ЛІГАНДАМИ

Довбій Я. М.¹, Третякова І. М.¹, Черній В. Я.¹, Коробко С. В.¹, Горскій А. В.²

¹Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В. І. Вернадського
Національної академії наук України

²Інститут фізичної хімії Польської академії наук
mitya@ionc.kar.net

Комплекси металів з β -кетоенолами широко використовуються в різноманітних областях, наприклад, для розділення іонів металів, у нанотехнологіях для створення тонких оксидних плівок металів, сенсорів, діодів та інш. Проте β -кетоеноли, що містять у своєму складі хромофорні фрагменти, за винятком куркуміну, практично не досліджувались. Наразі відома незначна кількість таких речовин, методи їх синтезу розроблено не достатньо. Нещодавно нами було встановлено, що алкіламіно- β -кетоенольні сполуки можуть бути використані як флуоресцентні сенсори для детекції амілоїдних агрегатів білків. Їх було одержано шляхом конденсації дегідрацетової кислоти з ароматичними альдегідами, (Рис., схема А), та подальшим розмиканням піранового циклу аліфатичними амінами (Рис., схема Б).

В даній роботі при взаємодії аміно- β -кетоенолів з фталоціанінами цирконію та гафнію дихлоридами (Рис., схема В) було одержано відповідні макроциклічні комплекси, які поєднують у собі два хромофорні фрагменти – фталоціаніновий та β -кетоенольний.

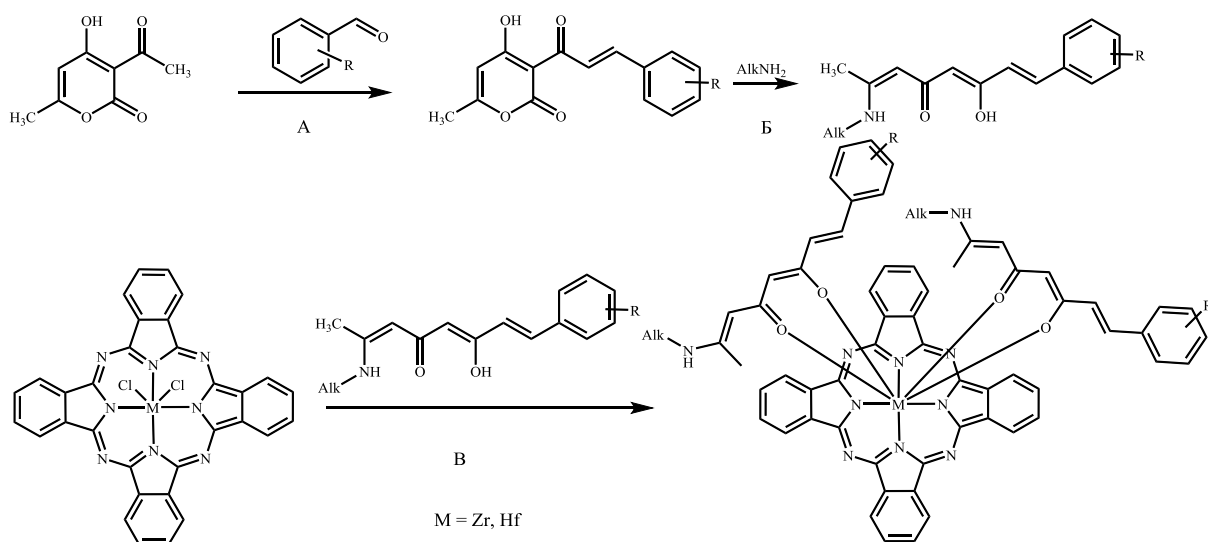


Рис. Схема синтезу алкіламіно- β -кетоенолів та фталоціанінових комплексів цирконію та гафнію на їх основі

В спектрах поглинання одержаних речовин присутні смуги в області 330 та 690 нм, що відповідають поглинанню фталоціанінового макроциклу, а також смуга в області 430–480 нм, що відповідає поглинанню координованих аміно- β -кетоенольних лігандів. Таким чином, було синтезовано серію фталоціанінових комплексів цирконію та гафнію з позаплощинно координованими алкіламіно- β -кетоенольними лігандами, що містять різні функціональні замісники.

Дана робота виконана за підтримки гранту H2020-MSCA-RISE-2014 № 645628 та цільової програми наукових досліджень НАН України «Нові функціональні речовини і матеріали хімічного виробництва» на 2017–2018 рр. № 8–17.

ЗМІШАНІ СОЛІ КУПРУМУ ТА ЦИНКУ З ПАРАВОЛЬФРАМАТ Б-АНІОНОМ

Іванцова Е. С., Кравчук Ю. В., Поповська О. Ю., Циба І. О., Радіо С. В., Розанцев Г. М.

Донецький національний університет імені Василя Стуса

ella.ivantsova@gmail.com

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 великі, то синтези можна проводити в широкому інтервалі рН розчину, який задається різною величиною *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 реакцій $12WO_4^{2-} + (14+n)H^+$ і солі що в ній утворюються вже досліджено для $Z \geq 1,17$, тоді як питання про інтервал $1,0 \leq Z \leq 1,17$ ще залишається не з'ясованим.

Із підкисленого до кислотності $Z = 1,00$ водного розчину вольфрамату натрію були отримані солі купруму та цинку з паравольфрамат Б-аніоном. Елементним аналізом встановлено, що ці солі можна віднести до основних або до змішаних гідроксопаравольфраматів цинку $Zn_5[W_{12}O_{40}(OH)_2] \cdot Zn(OH)_2 \cdot 26H_2O$ та купруму $Cu_5[W_{12}O_{40}(OH)_2] \cdot 2Cu(OH)_2 \cdot 30H_2O$. Аніони в складі цих солей ідентифіковано методом ІЧ-спектроскопії, який показав, що за набором характеристичних коливань вони відносяться до паравольфрамат-аніонів Б.

Будову купрум-вмісної солі розшифровано методом рентгеноструктурного аналізу. Основні кристалографічні дані для $H_{66}Cu_7O_{76}W_{12}$: $M_r = 3933,51$, триклінний, пр.гр. $P-1$, $a = 10,5878(3) \text{ \AA}$, $b = 12,8296(4) \text{ \AA}$, $c = 12,8522(5) \text{ \AA}$, $\alpha = 95,859(3)^\circ$, $\beta = 113,646(3)^\circ$, $\gamma = 91,763(2)^\circ$, $V = 1585,94(9) \text{ \AA}^3$ за $T = 293 \text{ K}$, $d_{\text{розрах}} = 4,119 \text{ г/см}^3$, $F_{000} = 1765$, $\mu = 24,085 \text{ мм}^{-1}$, $-17 \leq h \leq 17$, $-21 \leq k \leq 17$, $-21 \leq l \leq 21$, остаточні показники недостовірності за всіма спостереженими відбиттями $R_F = 0,0497$, $wR^2 = 0,0977$ ($R_F = 0,0746$, $wR^2 = 0,1119$ за всіма незалежними відбиттями), $S = 0,957$.

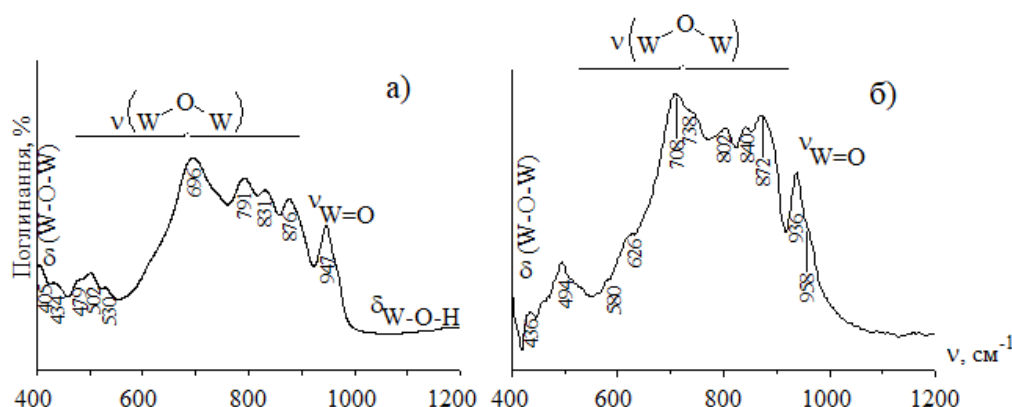


Рис. ІЧ-спектри: а) $Cu_5[W_{12}O_{40}(OH)_2] \cdot 2Cu(OH)_2 \cdot 30H_2O$;
б) $Zn_5[W_{12}O_{40}(OH)_2] \cdot Zn(OH)_2 \cdot 26H_2O$

**СИНТЕЗ І ДОСЛІДЖЕННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ ПОДВІЙНИХ СИЛКАТІВ
ЛУЖНИХ МЕТАЛІВ ТА ПРАЗЕОДИМУ***Кашуба А. І., Борисова К. В., Печаліна Є. І.*Донецький національний університет імені Василя Стуса
kashuba.a@donnu.edu.ua

Подвійні силікати зі структурою апатиту, завдяки своїй будові, різноманітності елементного складу і властивостям, на сьогоднішній день використовуються в різних областях науки і техніки.

Ці сполуки можуть застосовуватися в якості каталізаторів, біоматеріалів, лазерних і люмінесцентних матеріалів, матриць для поглинання актиноїдів, в якості іонних провідників, матеріалів твердооксидних паливних елементів (ТОПЕ), які є високо ефективними і екологічно чистими джерелами електричної енергії.

Силікати рідкісноземельних сполук зі структурою апатиту представляють великий інтерес як новий клас кисневих іонних провідників. Особливості структури цих сполук забезпечують їх високу кисневу провідність в області середніх температур, низькі енергії активації провідності, стійкість в відновлювальних середовищах, а також можливість ізоморфного заміщення різними елементами, що дозволяє модифікувати їх транспортні властивості.

Люмінофори на основі силікатів зі структурою апатиту, мають ряд переваг, серед яких відмінна термічна стабільність, широкий розрив в енергетичних діапазонах, не токсичність, низька вартість сировини, багатопроменева фосфоресценція, висока стійкість до кислот, лугів і кисню.

Найбільший інтерес представляють силікати РЗЕ оскільки саме ці сполуки можна синтезувати у вигляді досконалих монокристалів, придатних для технічного застосування.

Подвійні силікати $\text{NaPr}_9(\text{SiO}_4)_6\text{O}_2$, $\text{KPr}_9(\text{SiO}_4)_6\text{O}_2$, $\text{RbPr}_9(\text{SiO}_4)_6\text{O}_2$, $\text{CsPr}_9(\text{SiO}_4)_6\text{O}_2$ одержали твердофазним методом синтезу. З метою їх ідентифікації зразки були вивчені методом рентгенофазового аналізу з уточненням кристалічної структури методом Рітвельда та методом скануючої електронної мікроскопії.

**КОМПОЗИТНИЙ СОРБЕНТ «СИЛІКАГЕЛЬ КРИСТАЛОГІДРАТ»
ДЛЯ ВИКОРИСТАННЯ В СИСТЕМІ ДЕЦЕНТРАЛІЗОВАНОГО ОПАЛЕННЯ
ПРИМІЩЕНЬ РІЗНОГО ПРИЗНАЧЕННЯ**

Коломієць О. В., Сухий К. М.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет», м. Дніпро
lenysik_kol@i.ua

Технологія золь-гель синтезу композитного сорбенту включала наступні стадії: приготування 20 % водного розчину силікатного скла; утворення зародків силікатної фази; утворення кремні й-кисневої матриці; фракціювання сорбенту; сушка при 60 °С. Порядок введення компонентів синтезу наведений в таблиці 1.

Таблиця 1. Послідовність введення компонентів синтезу

Стадія	Компонент	Витрата, мас. ч.
1	20 % водного розчину силікатного скла	100
	5 % водний розчин ПЧАС	2
2	2,4 % розчин кислоти	40
3	4,65 % розчин кислоти	20
	50 % розчин силікатного скла	20
4	4,65 % розчин кислоти	10–20
Вихід композиту складає		14

Таблиця 2. Показники якості композитних сорбентів «силікагель–кристалогідрат»

Показник сорбенту	Назва продукту		Метод випробування
	силікагель-сульфат натрію	силікагель-ацетат натрію	
Колір	білий	білий	візуальний
Насипна густина, г-см ³	0,72	0,65	об'ємний метод, ГОСТ 10898.2-74
Сорбційна ємність, г-г	0,42	0,66	-
Температура регенерації, °С	100	60	-
Форма	гранули	гранули	-
Розмір гранул сорбенту, мм	3–5	3–5	просів
Токсичність	негативна	негативна	ДСанПіН

Розмір фактичного економічного ефекту від використання в системі децентралізованого опалення теплового акумулятору на основі цих композитних сорбентів в період з жовтня 2016 р. по квітень 2017 р. становить 147436,5 грн.

ELECTROCHEMICAL SYNTHESIS OF HYDRIDES $\text{Tb}_2\text{Ni}_{16}\text{SiH}_x$ AND $\text{Tb}_2\text{Ni}_{16}\text{Li}_{0.5}\text{Si}_{0.5}\text{H}_x$

Kordan V. M., Nytko V. V., Tarasiuk I. I., Zelinska O. Ya., Pavlyuk V. V.

Department of Inorganic Chemistry, Ivan Franko National University of Lviv,
6 Kyryla i Mefodiya St., 79005 Lviv, Ukraine
kordan50@gmail.com

Doping components have the influence on structural, physical and chemical characteristics of the electrode materials. The material on the basis of multicomponent alloys often demonstrates better electrochemical characteristics than individual compounds. In this study we present our results of the electrochemical hydrogenation of $\text{Tb}_2\text{Ni}_{17}$ phases doped by silicon and lithium.

The samples were synthesized by arc melting of pressed pallets containing a mixture of pure metals with further homogenization annealing. The synthesized alloys were tested as anode materials in a Swagelok-prototype of Ni-MH batteries. As a negative electrode we used the powders of alloys with nominal compositions $\text{Tb}_2\text{Ni}_{16}\text{Si}$ and $\text{Tb}_2\text{Ni}_{16}\text{Li}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$ that according to X-ray phase analysis contained only expected phases with $\text{Th}_2\text{Ni}_{17}$ -type structure (space group $P6_3/mmc$) (see Table). As a positive electrode we used a mixture of $\text{Ni}(\text{OH})_2$ and graphite powders for better conductivity. A separator soaked in electrolyte (6 M KOH) was placed between the electrodes. Electrochemical reactions that occurred on the electrodes were the following: $\text{MH}_z + z\text{OH}^- \xrightarrow{\text{discharge/charge}} \text{M} + z\text{H}_2\text{O} + z\text{e}^-$ (anode); $\text{NiOOH} + z\text{H}_2\text{O} + z\text{e}^- \xrightarrow{\text{discharge/charge}} \text{Ni}(\text{OH})_2 + z\text{OH}^-$ (cathode).

Both materials can absorb 2.3-2.4 H/ f.u. Doping by Li and Si has improved Coulomb efficiency of the electrochemical hydrogenation for more than 3 % and increased capacity stability of the anode material with $\text{Tb}_2\text{Ni}_{16}\text{Li}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$ (Figure).

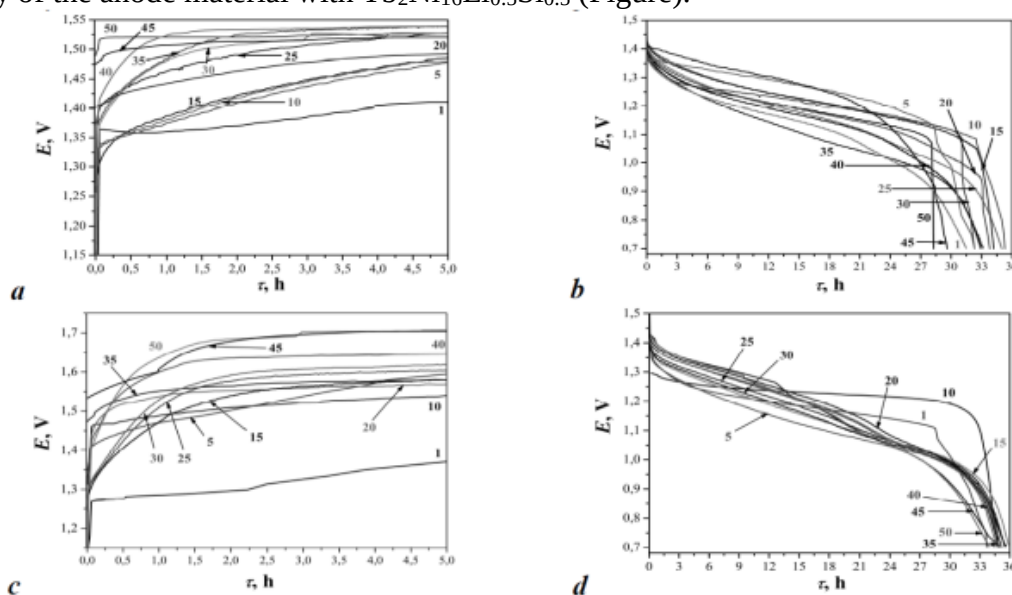


Fig. Selected charge and discharge curves for anode materials based on $\text{Tb}_2\text{Ni}_{16}\text{Si}$ (a, b) and $\text{Tb}_2\text{Ni}_{16}\text{Li}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$ (c, d) phases

Table. The results of X-ray phase analysis and electrochemical hydrogenation of the $\text{Tb}_2\text{Ni}_{16}\text{Si}$ and $\text{Tb}_2\text{Ni}_{16}\text{Li}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$ phases and their hydrides

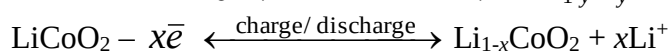
Solid solution / hydride	a , Å	c , Å	V , Å ³	$\Delta V/V$, %	H_{charge} / f.u.	$H_{\text{discharge}}$ / f.u.	$\bar{Q}_{\text{discharge}}$, mA·h	η , %
$\text{Tb}_2\text{Ni}_{16}\text{Si}$	8.3055(4)	8.0377(6)	480.18(4)	1.81	2.40	2.27	12.80	85.3
$\text{Tb}_2\text{Ni}_{16}\text{SiH}_x$	8.3712(7)	8.055(1)	488.85(8)					
$\text{Tb}_2\text{Ni}_{16}\text{Li}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$	8.3076(4)	8.0428(7)	480.73(5)	0.61	2.39	2.29	13.28	88.5
$\text{Tb}_2\text{Ni}_{16}\text{Li}_{0.5}\text{Si}_{0.5}\text{H}_x$	8.3209(7)	8.066(1)	483.65(9)					

ELECTROCHEMICAL SYNTHESIS OF THE $\text{TiAl}_{1-x}\text{Li}_x$ PHASE*Kordan V. M., Zhyshkovych O. R., Zelinska O. Ya., Pavlyuk V. V.*

Department of Inorganic Chemistry, Ivan Franko National University of Lviv,
6 Kyryla i Mefodiya St., 79005 Lviv, Ukraine
kordan50@gmail.com

Intermetallic compounds containing large voids can be used as potential electrode materials in Li-ion batteries. Our previous investigations showed that the size of the voids and the amount of intercalated Li depends on the transition metal. The type of lithiation reaction (inclusion or substitution) and the type of solid solution formed as a result of lithiation depends on the *p*-element.

A sample with the composition $\text{Ti}_{50}\text{Al}_{50}$ was synthesized by arc melting of the mixture of pure metals with further homogenization annealing in evacuated silica tube at 400 °C for 2 months. The X-ray phase analysis (diffractometer DRON-2.0M, $\text{FeK}\alpha$ - radiation) confirmed the formation of TiAl (structure type CuAl, space group $P4/mmm$) as a major phase and negligible amount of TiAl_3 (own structure type, space group $I4/mmm$) as a minor phase. Electrochemical investigation was carried out in the 2-electrode Swagelok-type cell using the powder of the studied alloy as a negative electrode and a powder of LiCoO_2 (structure type NaFeO_2) as a positive electrode. As electrolyte we used 1M solution of $\text{Li}[\text{PF}_6]$ in 1:1 ethylenecarbonate / dimethylcarbonate. All electrochemical investigations were carried out in galvanostatic regime (charge at 1.0 mA and discharge at 0.5 mA) over 50 cycles. The electrochemical reactions at the electrodes were the following:



After electrochemical lithiation we observed the increase of lattice parameters for both major TiAl and minor TiAl_3 phases. We also observed the large amorphization halo and the evidence of formation of new Li-containing binary phases namely LiAl_3 (structure type Cu_3Au , space group $Pm\bar{3}m$), Li_3Al_2 (own structure type, space group $R\bar{3}m$), Li_9Al_4 (own structure type, space group $C12/m1$). The lattice parameters for all observed phases are listed in Table. The reason for the increasing of the lattice parameters of the initial phases after electrochemical lithiation is the formation of the solid solutions of substitution $\text{TiAl}_{1-x}\text{Li}_x$ and $\text{TiAl}_{3-x}\text{Li}_x$, where the Al-atoms ($r_{\text{Al}} = 1.43 \text{ \AA}$) are partially substituted by the Li-atoms ($r_{\text{Li}} = 1.53 \text{ \AA}$).

Table. The lattice parameters of observed phases before and after electrochemical lithiation

Before intercalation of Li	After intercalation of Li	$\Delta V/V, \%$
TiAl $a = 3.1874(2) \text{ \AA}, c = 3.9568(2) \text{ \AA},$ $V = 40.199(8) \text{ \AA}^3;$	$\text{TiAl}_{1-x}\text{Li}_x$ $a = 3.1986(5) \text{ \AA}, c = 3.9629(6) \text{ \AA},$ $V = 40.54(1) \text{ \AA}^3;$	0.85
TiAl_3 (traces) $a = 3.8215(2) \text{ \AA}, c = 8.588(1) \text{ \AA},$ $V = 125.42(2) \text{ \AA}^3;$	$\text{TiAl}_{3-x}\text{Li}_x$ (traces) $a = 3.8375(3) \text{ \AA}, c = 8.607(1) \text{ \AA},$ $V = 126.76(3) \text{ \AA}^3;$	1.07
	LiAl_3 (traces) $a = 4.0101(3) \text{ \AA}, V = 64.48(2) \text{ \AA}^3;$	
	Li_3Al_2 (traces) $a = 4.5085(3) \text{ \AA}, c = 14.171(4) \text{ \AA}, V =$ $249.46(6) \text{ \AA}^3;$	
	Li_9Al_4 (traces) $a = 18.86(3) \text{ \AA}, b = 4.500(5) \text{ \AA}, c = 5.416(3) \text{ \AA},$ $\beta = 105.3(1)^\circ, V = 443.4(6) \text{ \AA}^3$	

ЕЛЕКТРОЛІТ ДЛЯ ЕЛЕКТРООСАДЖЕННЯ БЛИСКУЧИХ ПОКРИТТІВ СРІБЛОМ*Короляничук Д. Г., Коломієць О. В.*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет», м. Дніпро
lenysik_kol@i.ua

Електроліти використовуються при срібленні деталей у радіоелектронній промисловості та декоруванні ювелірних виробів. Недоліком існуючих електролітів є низький вихід по струму, складні сполуки, висока концентрація дорогих речовин та недостатня швидкість нанесення покриттів сріблом.

Метою роботи є розробка способу одержання та рецептури малотоксичного електроліту для нанесення блискучих покриттів сріблом з високою швидкістю осадження без примусового перемішування та прокачування розчину при кімнатній температурі.

Розроблений електроліт має наступне співвідношення компонентів, г/л:

хлорид срібла 10–20;

гексаціаноферат калію 20–50;

карбонат калію 5–10;

оксиетильований спирт синтанол ДС-10 0,5–1,0.

В результаті експериментів встановлено, що:

1. Збільшення вмісту хлориду срібла вище верхньої заявленої межі недоцільно, що пов'язано зі зменшенням розсіює здатності електроліту, збільшенням виносу срібла разом з деталями після їх покриття.

2. Зменшення вмісту хлориду срібла нижче нижньої заявленої межі призводить до різкого зменшення швидкості нанесення покриттів срібла, виходу за струмом срібла.

3. Збільшення вмісту гексаціаноферату калію вище верхньої заявленої межі недоцільно, що пов'язано з граничною розчинністю.

4. Зменшення вмісту гексаціаноферату калію нижче нижньої заявленої межі призводить до зниження швидкості нанесення покриттів срібла, зменшення виходу по струму, погіршення якості покриття, що осаджується.

5. Збільшення вмісту карбонату калію вище верхньої заявленої межі недоцільно, що призводить до зменшення швидкості нанесення покриттів сріблом.

6. Зменшення вмісту карбонату калію нижче нижньої заявленої межі призводить до зниження швидкості нанесення покриттів сріблом.

7. Збільшення вмісту оксиетильованого спирту синтенолу ДС-10 вище верхньої заявленої межі недоцільно, що пов'язано з граничною розчинністю.

8. Зменшення вмісту оксиетильованого спирту синтенолу ДС-10 нижче нижньої заявленої межі призводить до погіршення якості осаджуваного покриття.

Для приготування електроліту в дисцильовану воду кімнатної температури вводили необхідну кількість гексаціаноферата калію, потім додавали хлорид срібла, після чого розчин кип'ятили протягом трьох годин до утворення осаду. Утворений осад відокремили від розчину, в розчин додавали необхідну кількість карбонату калію та синтанолу при кімнатній температурі. Електроосадження відбувається за температури 20–25 °С, катодна густина струму знаходиться в межах 0,5–1,5 А/дм². Швидкість осадження при 1 А/дм² рівна 0,25 мм. Кількість срібла, що виділяється на катоді рівна кількості срібла яке розчинилося на аноді, вихід по току близько 100 %. Досліди по нанесенню покриттів проводились впродовж 30 днів. Пасивації аноду не спостерігалось, розчин залишався прозорим, якість покриттів – стабільна.

**^1H ТА ^{31}P -ЯМР ДОСЛІДЖЕННЯ ПАРАМАГНІТНИХ КООРДИНАЦІЙНИХ
СПОЛУК ЛАНТАНОЇДІВ СКЛАДУ $[\text{Ln}(\text{CAPH})_3 \cdot \text{Phen}]$,
ДЕ $\text{CAPH} = \text{CCl}_3\text{C}(\text{O})\text{N}^-\text{P}(\text{O})(\text{OCH}_3)_2$**

Труш В. О., *Літис О. О.*, Слива Т. Ю., Амірханов В. М.
Київський національний університет імені Тараса Шевченка
вул. Льва Толстого, 12, Київ, Україна, 01033
olena_litsis@univ.kiev.ua

Хімічні властивості лантаноїдів (III) та ефекти, які вони індукують у ЯМР-параметрах оточуючих ядер, роблять їх цінними об'єктами для різних застосувань. Катіони лантаноїдів (Ln) та їх хелати використовуються як інструмент у структурному аналізі з використанням ЯМР-спектроскопії. Фізичні та хімічні властивості йонів Ln (III) тісно пов'язані з властивостями Ca (II), і тому парамагнітні катіони Ln (III) є корисними зондами для структурного дослідження ЯМР-нечутливих комплексів Ca (II) в розчині. Лантаноїдні зсуваючі реагенти (ЛЗР) широко застосовують для вивчення будови органічних сполук, їх конформацій у розчині, енантіомерної чистоти, виявлення хіральності тощо. В решті решт, хелати Ln (III) стають все більш важливими в медичних методах діагностики з використанням спінової ЯМР-візуалізації. З цих причин важливо розробити більш повне уявлення про структури лантанідних комплексів у розчині.

В даній роботі було досліджено ряд координаційних сполук складу $[\text{LnL}_3 \cdot \text{Phen}]$, де Ln = La-Nd, Sm-Yb; Phen – 1,10-фенантролін. За допомогою методів рентгенофазового та рентгеноструктурного аналізу було встановлено два різні типи координаційного оточення центральних атомів, що обумовило існування двох неізоstrukturних серій комплексів: Ln = La-Nd (координаційний поліедр – викривлена двошаркова тригональна призма (ДТП)) та Ln = Sm-Yb (координаційний поліедр – викривлена квадратна антипризма (АП)), рис.

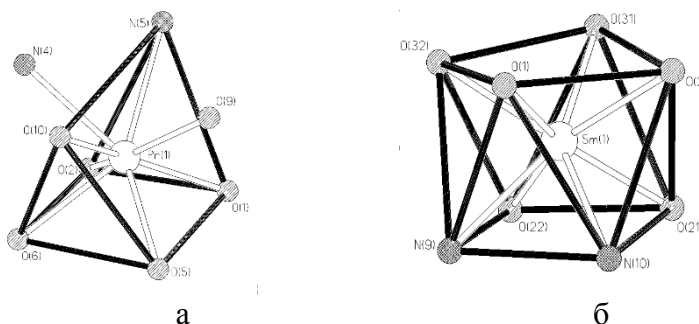


Рис. Будова координаційних поліедрів у комплексах $[\text{LnL}_3 \cdot \text{Phen}]$: (а) двошаркова тригональна призма (Ln=Pr) та (б) квадратна антипризма (Ln=Sm)

Розраховані ізотропні зсуви протонів та фосфору (Δ^{H} і Δ^{P} відповідно), константи надтонкої взаємодії. З використанням різних методів розділення ізотропного хімічного зсуву на контактну та псевдоконтактну складові встановлено, що в ацетонових розчинах $[\text{LnL}_3 \cdot \text{Phen}]$ існують два ряди ізоморфних комплексів, що корелює з результатами РСТА: для легких лантаноїдів (Ce, Pr, Nd та Sm) константа НТВ лантаноїд – фосфор складає 0.18 МГц, для важких (Tb, Dy, Ho та Er) – 0.13 МГц.

ВПЛИВ ТЕМПЕРАТУРИ ТЕРМІЧНОГО РОЗКЛАДАННЯ АМОНІЙ ТЕТРАВАНАДАТУ НА ПРОЦЕСИ ФАЗОУТВОРЕННЯ ВИСОКОДИСПЕРСНИХ ОКСИДІВ ВАНАДІЮ

Лускань К. В., Мисов О. П.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»
katerynalu16@gmail.com

Серед поширених методів синтезу нанокристалічного діоксиду ванадію (VO_2) за останнє десятиліття автори у своїх публікаціях значну увагу приділяють високотемпературному розкладанню солі амоній тетраванадату $(\text{NH}_4)_2\text{V}_4\text{O}_9$.

Треба відмітити, що даний метод дозволяє здійснювати процес синтезу в оптимальних умовах з погляду ефективності управління властивостями кінцевого продукту, енергетичних витрат і продуктивності. Від умов термічного розкладання буде залежати якість кінцевих продуктів. У цьому плані актуальним є проведення комплексних досліджень термічного розкладання амоній тетраванадату.

Для визначення оптимальних режимів термічної обробки $(\text{NH}_4)_2\text{V}_4\text{O}_9$ проводили рентгенівські дослідження термічно оброблених порошків у інертній атмосфері (аргон) в інтервалі температур 380–900 °C (рис.). Як видно з дифрактограми на рис. а, термодеструкція порошків у температурних інтервалах 380–450 °C (крива 1, 2) дає суміш різних оксидів ванадію V_2O_3 , VO_2 , V_5O_9 , V_2O_5 . При зростанні температури до 650 °C (крива 3) прослідковуються низько-інтенсивні рефлекси які характерні для фази VO_2 . Підвищення температури до 900 °C характеризується появою фази VO_2 з кутом моноклінності 106,9°.

Трансмісійною електронною мікроскопією (рис. б) визначен розмір часток оксидів ванадію, який не перевищує 80–82 нм

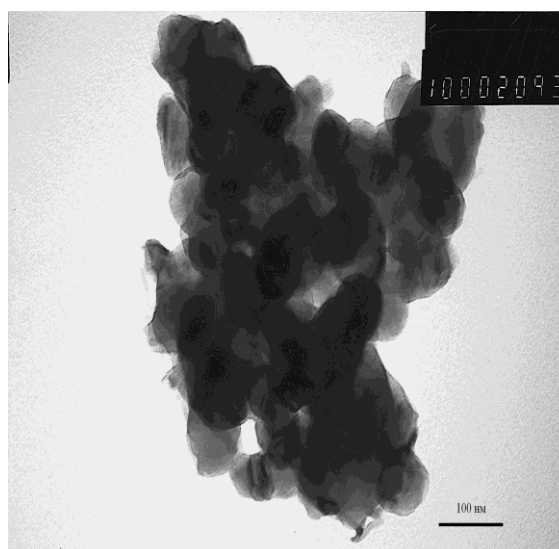
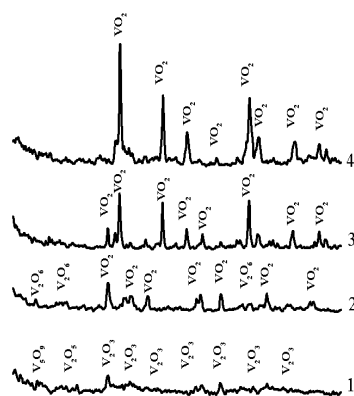


Рис. а) Дифрактограми порошку термічної обробки амоній тетраванадату з різними температурами розкладання: 1 – 380 °C; 2 – 450 °C; 3 – 650 °C; 4 – 900 °C;
б) Мікрофотографія діоксиду ванадію отриманно термічним розкладанням амоній тетраванадату при температурі 900 °C протягом 10 хв

СИНТЕЗ, ВЛАСТИВОСТІ ТА АНТИСТРУКТУРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ КОБАЛЬТОВОГО АЛЮМІНАТУ

Лясковська М. Р., Татарчук Т. Р.

ДВНЗ «Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»
tatarchuk.tetyana@gmail.com

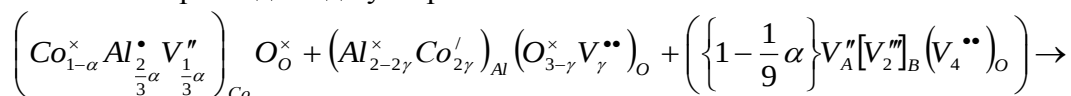
Фізико-хімічні особливості CoAl_2O_4 (висока термічна і хімічна стабільність, висока стійкість до агресивного середовища та освітлення) зумовили його широке застосування у різних галузях промисловості. Зазначай шпінелі отримують спіканням їх оксидів при досить високих температурах (1200–1900 °C). Саме тому актуальним на сьогодні є пошук оптимальних методів гомогенізації, які дозволять суттєво знизити температури спікання та одержати зразки з великою питомою поверхнею.

В даній роботі синтез зразка складу CoAl_2O_4 проведено методом хімічного (гідрокарбонатного) співосадження з використанням шенітного прекурсорів $\text{Co}(\text{NH}_4)_2(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ та галуна $\text{Al}(\text{NH}_4)(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$. Спікання співосаджених із водних розчинів гідроксидів проводилось за температури 900 °C впродовж чотирьох годин з наступним повільним охолодженням.

Наявність шпінельної структури підтверджено X-променевим, ІЧ-спектроскопічним та термогравіметричним аналізом. ІЧ-спектроскопічний аналіз підтвердив наявність зв'язків $\text{Me}-\text{O}$ в синтезованих пігментах про що свідчать піки в області частот 660 cm^{-1} , що відповідають тетраедрично координованому кобальту, та в області частот 550 cm^{-1} – які відповідають октаедрично координованому алюмінію.

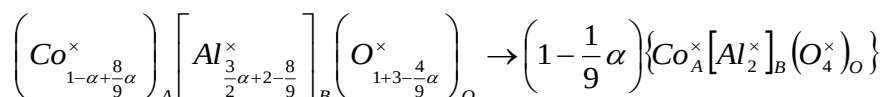
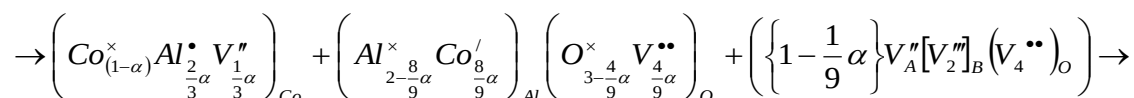
На основі даних X-променевого аналізу отримано значення параметра комірки (a), тетра- (α) та октаедричних (β) відстаней, аніонного параметру (u), розраховано об'єм (V) і густину (ρ) елементарної комірки, а також кути між хімічними зв'язками АОВ, ВОВ для твердих розчинів кобальт-цинкових алюмінітів, розраховано ОКР за методом Шеррера.

Для глибшого пояснення механізму одержання кобальт алюмінату використано квазіструктурну методу, яка полягає в утворенні оксидних дефектних фаз, взаємодія між якими призводить до утворення шпінельних пігментів:



γ заміняємо на α з умови, що на один кобальт у алюмініаті припадає два алюмінії. Тоді:

$$1 - \alpha + 2\gamma = \left(\frac{2}{3} \alpha + 2 - 2\gamma \right) / 2; \quad \gamma = \frac{4}{9} \alpha$$



REFINEMENT OF THE CRYSTAL STRUCTURE OF THE ARSENIDE HfNiAs

Makara I. A., Zhak O. V.

Ivan Franko National University of Lviv, Analytical Chemistry Department

igor1994makara@gmail.com

Existence of the ternary arsenide of hafnium and nickel HfNiAs has been reported earlier by [1]. The crystal structure of the isotypic ternary arsenide with cobalt HfCoAs was determined by the same authors using single crystal X-ray data. Both compounds crystallize with orthorhombic Co₂Si type structure (space group *Pnma*). However for the compound HfNiAs only the lattice parameters were refined from powder diffraction data: $a = 0.6421(2)$, $b = 0.3760(2)$, $c = 0.7331(3)$ nm [1]. The goals of our investigation were synthesis and crystal structure determination of the ternary arsenide of hafnium and nickel with equiatomic composition.

Samples for investigation were prepared using arc-melting procedure of the preliminary sintered pellets obtained from the stoichiometric mixtures of starting materials: powders of hafnium and nickel, and crystalline arsenic (all with a stated purity better than 99.9 wt. %). The samples were heat treated in evacuated fused-silica tubes at 1 070 K during 1 month and quenched in cold water without breaking the tubes. Samples were investigated by X-ray powder diffraction method (diffractometer DRON-3M, Cu $K\alpha$ -radiation). For the X-ray data treatment and refinement of the atomic coordinates and displacement parameters CSD software was used [2]. The atomic parameters were refined using the full-profile Rietveld method.

The ternary arsenide HfNiAs was found to crystallize with the orthorhombic crystal structure of the TiNiSi type structure (space group *Pnma*), refined lattice parameters are $a = 0.64000(6)$, $b = 0.38050(2)$, $c = 0.73378(5)$ nm, cell volume $V = 0.17869(5)$ nm³, number of formula units $Z = 4$, final R -values are $R_1 = 0.0428$, $R_p = 0.0413$, $R_{wp} = 0.0554$. The coordinates and displacement parameters of atoms in the HfNiAs crystal structure are listed in Table.

Table. Atomic parameters in the HfNiAs crystal structure

Atoms	Site	x/a	y/b	z/c	$B_{\text{iso}}, \text{nm}^2 \cdot 10^2$
Hf	4c	0.0273(5)	1/4	0.6875(4)	0.82(8)
Ni	4c	0.1433(11)	1/4	0.0688(9)	0.9(2)
As	4c	0.2685(13)	1/4	0.3844(12)	1.2(2)

The TiNiSi structure is an ordered ternary superstructure of the Co₂Si binary type, where all sorts of the atoms are regularly occupy the crystallographic sites. Arsenic atoms in the structure of HfNiAs are centered the trigonal prisms formed by the metal atoms only, whereas coordination polyhedra of the nickel atoms are the orthorhombic prisms formed by the all atom types. Coordination polyhedra of the largest hafnium atoms are the distorted pentagonal prisms also formed by the all atom types.

[1] Kleinke H., Franzen H. F. Crystal Structures, Bonding and Electronic Structures of MM'As, a Series of New Ternary Arsenides (M= Zr, Hf; M'= Fe, Co, Ni) // Z. Anorg. Allg. Chem. – 1998. – Vol. 624. – P. 51–56.

[2] Akselrud L., Grin Yu. WinCSD: Software Package for Crystallographic Calculations (Version 4) // J. Appl. Crystallogr. – 2014. – Vol. 47. – P. 803–805.

**МИКРОМОРФОЛОГИЯ ПОВЕРХНОСТИ, РЕНТГЕНОСПЕКТРАЛЬНЫЙ
МИКРОАНАЛИЗ И ИК-СПЕКТРОСКОПИЯ ПРОДУКТОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
В СИСТЕМАХ $X^{3+}-WO_4^{2-}-H^+-H_2O$, $A^+-X^{3+}-WO_4^{2-}-H^+-H_2O$ ($A^+=K^+$, NH_4^+), $M^{2+}-X^{3+}-$
 $WO_4^{2-}-H^+-H_2O$ ($M^{2+}=Mg^{2+}$, Zn^{2+}) ($X = Y$, Gd, Er)**

Марийчук А. Ю., Ерошина Е. В., Розанцев Г. М., Радио С. В.

Донецкий национальный университет имени Василя Стуса, Винница, Украина

radio@donnu.edu.ua

Методами сканирующей электронной спектроскопии, ИК-спектроскопии и рентгеноструктурного анализа проведено исследование кристаллических продуктов взаимодействия в системах $X^{3+}-WO_4^{2-}-H^+-H_2O$, $A^+-X^{3+}-WO_4^{2-}-H^+-H_2O$ ($A^+=K^+$, NH_4^+), $M^{2+}-X^{3+}-WO_4^{2-}-H^+-H_2O$ ($M^{2+}=Mg^{2+}$, Zn^{2+}) ($X = Y$, Gd, Er), выделенных при кислотности $Z = \nu(H^+)/\nu(WO_4^{2-}) = 0,80$.

Разработана новая методика синтеза и получены монокристалльные образцы изоструктурных солей $Na_9[X(W_5O_{18})_2] \cdot 35H_2O$ ($X = Y$, Gd, Er) с гетерополианионом со структурой Пикока–Уикли из растворов $X^{3+}-WO_4^{2-}-H^+-H_2O$ при кислотности $Z = 0,80$. Исследована микроморфология поверхности солей, и проведено их использование в качестве прекурсоров для синтеза новых солей с катионами NH_4^+ , K^+ , Mg^{2+} , Zn^{2+} .

Исследовано взаимодействие в растворах $A^+-X^{3+}-WO_4^{2-}-H^+-H_2O$ ($A^+ = K^+$, NH_4^+) при $Z = 0,80$. Синтезированы и охарактеризованы методами ИК-спектроскопии, СЭМ и РСА соли с анионом паравольфрамата Б — $Na_2(NH_4)_8[W_{12}O_{40}(OH)_2] \cdot 12H_2O$ и $K_{10}[W_{12}O_{40}(OH)_2] \cdot 13H_2O$, образование которых происходит в результате гидролитического превращения анионов $[X(W_5O_{18})_2]^{9-}$ ($X = Y$, Gd, Er) в более термодинамически стабильные $[W_{12}O_{40}(OH)_2]^{10-}$. Установлено, что в системах $M^{2+}-X^{3+}-WO_4^{2-}-H^+-H_2O$ ($M^{2+} = Mg^{2+}$, Zn^{2+}) при $Z = 0,80$ происходит кристаллизация солей с анионом паравольфрамата Б — $Mg_5[W_{12}O_{40}(OH)_2] \cdot 41H_2O$ и $Zn_5[W_{12}O_{40}(OH)_2] \cdot 35H_2O$.

Методом СЭМ и РСМА показано, что продукты взаимодействия в системах $M^{2+}-Y^{3+}-WO_4^{2-}-H^+-H_2O$ ($M^{2+} = Mg^{2+}$, Zn^{2+}) и $NH_4^+-Y^{3+}-WO_4^{2-}-H^+-H_2O$ являются однофазными, в то время как в системе $K^+-Y^{3+}-WO_4^{2-}-H^+-H_2O$ происходит сокристаллизация паравольфрамата калия и натрия (рис.).

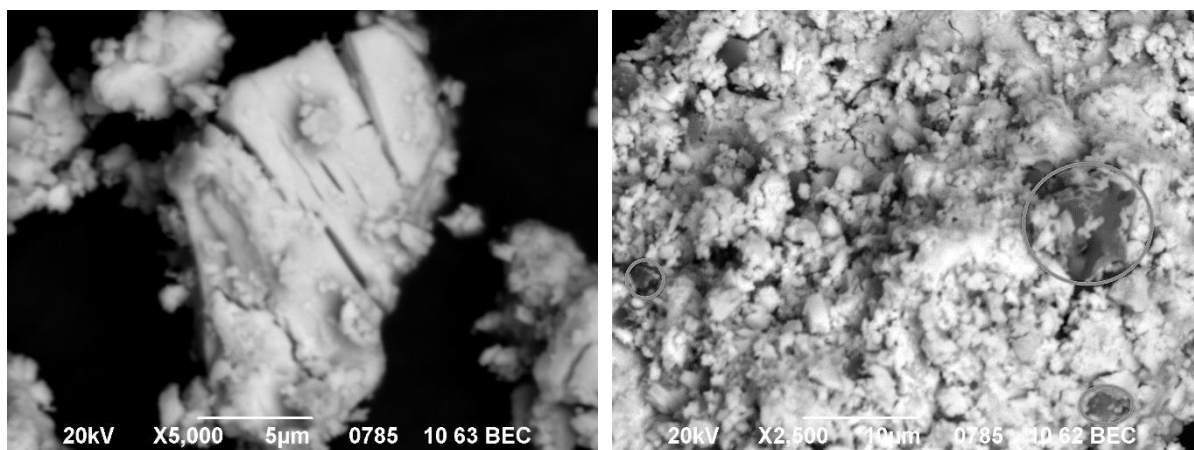


Рис. Контраст поверхности порошков солей в режиме обратнорассеянных электронов (BEC): слева — $Mg_5[W_{12}O_{40}(OH)_2] \cdot 41H_2O$ ($\times 5\,000$ раз; однофазный образец); справа — $K_{10}[W_{12}O_{40}(OH)_2] \cdot 13H_2O$ ($\times 2\,500$ раз; кружками выделены области с повышенным содержанием натрия)

Исследование выполнено при поддержке Министерства образования и науки Украины (проект № 0116U002521).

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА СПОЛУКИ $\text{HfAl}_{2,7}\text{Ge}_{0,3}$ *Марискевич Д. Т.*, Токайчук Я. О., Гладішевський Р. Є.

Кафедра неорганічної хімії

Львівського національного університету імені Івана Франка,

вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

danylo.maryskewytsch@gmail.com

Під час дослідження взаємодії компонентів у потрійній системі Hf-Al-Ge при 600°C на ізоконцентраті 25 ат.% Hf встановлено існування сполуки $\text{HfAl}_{2,7}\text{Ge}_{0,3}$. Для визначення її кристалічної структури було синтезовано методом електродугового сплавлення металів високої чистоти зразок складу $\text{Hf}_{25}\text{Al}_{70}\text{Ge}_5$ і гомогенізовано його при 600°C впродовж 1 місяця. Масив рентгенівських дифракційних даних отримано на порошковому дифрактометрі STOE Stadi P (проміння $\text{Cu K}\alpha_1$). Параметри профілю рентгенограми та параметри кристалічної структури тернарної сполуки уточнено методом Рітвельда з використанням пакету програм FullProf Suite.

Кристалічна структура тернарної сполуки $\text{HfAl}_{2,7}\text{Ge}_{0,3}$ належить до структурного типу (СТ) TiAl_3 (символ Пірсона (СП) $tI8$, просторова група (ПГ) $I4/mmm$, $a = 3,91780(14)$, $c = 8,9324(3)$ Å, $R_B = 0,0283$, $R_F = 0,0220$, $R_p = 0,0665$, $R_{wp} = 0,0910$, $\chi^2 = 3,27$). Координати і параметри зміщення атомів, а також коефіцієнти заповнення позицій приведено у таблиці. Обидві правильні системи точок (ПСТ) атомів p -елементів зайняті статистичними сумішами атомів Al і Ge , однак з дещо відмінним їхнім співвідношенням. Уточнений склад сполуки – $\text{HfAl}_{2,68(1)}\text{Ge}_{0,32(1)}$.

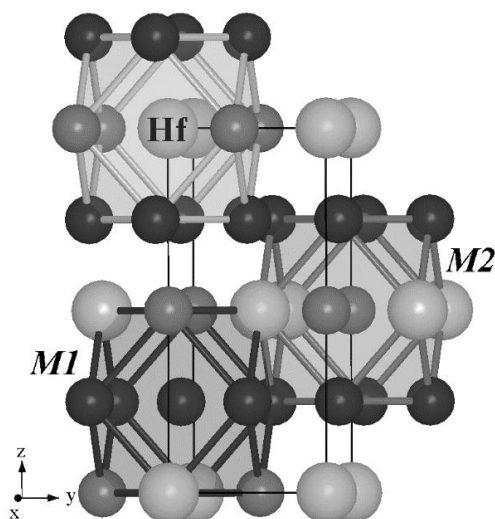
Таблиця. Координати та ізотропні параметри зміщення атомів у структурі сполуки $\text{HfAl}_{2,7}\text{Ge}_{0,3}$ (СТ TiAl_3 , СП $tI8$, ПГ $I4/mmm$, $a = 3,91780(14)$, $c = 8,9324(3)$ Å)

Атом	ПСТ	x	y	z	$B_{\text{iso}}, \text{\AA}^2$
Hf	$2a$	0	0	0	0,584(13)
$M1^1$	$4d$	0	1/2	1/4	1,23(8)
$M2^2$	$2b$	0	0	1/2	1,27(7)

¹ $M1 = 0,958(4)\text{Al} + 0,042(4)\text{Ge}$; ² $M2 = 0,762(5)\text{Al} + 0,238(5)\text{Ge}$.

Структурний тип TiAl_3 належить до найщільніших упаковок атомів, а координаційними многогранниками усіх атомів є кубооктаедри. Вміст елементарної комірки і координаційні многогранники атомів зображено на рисунку.

Тернарну сполуку $\text{HfAl}_{2,6}\text{Ge}_{0,4}$, що існує при 600°C , можна вважати стабілізованим атомами Ge твердим розчином на основі високотемпературної модифікації бінарного триалюмініду HfAl_3 (СТ TiAl_3). При температурі дослідження кристалічна структура сполуки HfAl_3 належить до структурного типу ZrAl_3 (СП $tI16$, ПГ $I4/mmm$, $a = 3,9865(2)$, $c = 17,1440(8)$ Å).



СИНТЕЗ Pr(III)-ВМІСНИХ ГЕТЕРОПОЛІ- ТА ІЗОПОЛІВОЛЬФРАМАТІВ

Марійчак О. Ю., Олексій Ю. А., Шевченко М. М., Розанцев Г. М., Радіо С. В.

Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна

radio@donnu.edu.ua

У доповіді представлено підсумки синтезу Pr(III)-вмісних поліоксовольфраматів з водних розчинів систем $\text{Na}_2\text{WO}_4\text{--Pr}(\text{NO}_3)_3\text{--HNO}_3\text{--H}_2\text{O}$ з різною кислотністю $Z = \nu(\text{H}^+)/\nu(\text{WO}_4^{2-})$.

Розроблено умови синтезу $\text{Na}_9[\text{Pr}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 34,25\text{H}_2\text{O}$ з підкисленого до $Z = 0,80$ водного розчину натрію вольфрамату з відношенням $\nu(\text{Pr}) : \nu(\text{W}) = 1 : 10$ з висолюванням дією ацетону. Методами ІЧ та КР-спектроскопії показано належність аніону в синтезованій сполуці до структури Пікока-Уіклі. Розроблена в роботі методика одержання натрію декавольфрамопразеодимату(III) є новою та відрізняється тим, що дозволяє синтезувати середню, а не кислу сіль, що може бути використано для синтезу інших середніх натрію гетерополідекавольфрамолантанідатів(III).

Методом скануючої електронної мікроскопії показано, що розмір зерен порошку $\text{Na}_9[\text{Pr}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 34,25\text{H}_2\text{O}$ знаходиться у межах 200–450 нм. Однофазність синтезованої солі підтверджено рівномірним контрастом поверхні в режимі зворотно розсіяних електронів і рівномірним розподілом Pr, Na, W, O без сегрегацій і ліквіацій під час сканування поверхні в характеристичному рентгенівському випромінюванні.

Проведено рентгеноструктурний аналіз монокристалу й одержано фундаментальні дані для кристалічної структури $\text{Na}_9[\text{Pr}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 34,25\text{H}_2\text{O}$ ($a = 18,272(5)$, $b = 18,512(5)$, $c = 20,865(6)$, $\alpha = 113,60(3)$, $\beta = 97,79(3)$, $\gamma = 90,36(3)$, $V = 6\,393(3) \text{ \AA}^3$, $Z = 2$, триклінна сингонія, пр.гр. $P-1$) (рис.).

З аналізу результатів РСА встановлено, що структури поліоксовольфраматів подібного типу (як за параметрами ячейки, так і за складом і характером упаковки) в літературі й базах даних структур не описані.

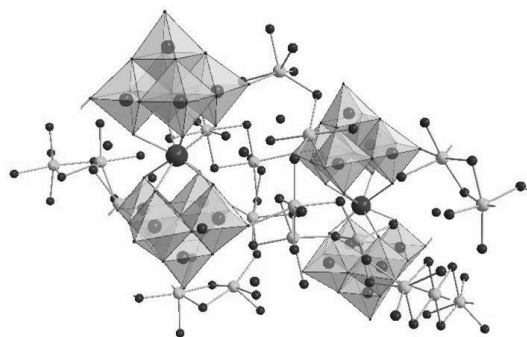
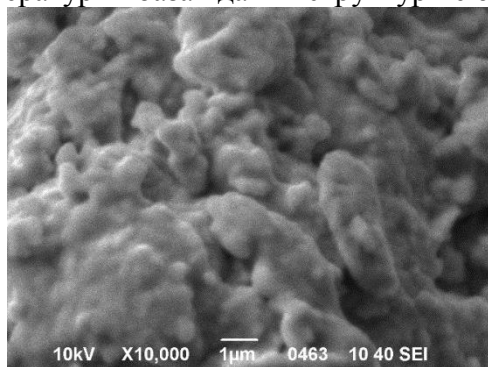


Рис. *Ліворуч* – SEM-зображення поверхні порошку $\text{Na}_9[\text{Pr}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 34,25\text{H}_2\text{O}$ в режимі вторинних електронів ($\times 10\,000$ разів); *праворуч* – поліедричне зображення аніону $[\text{Pr}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2]^{9-}$ в $\text{Na}_9[\text{Pr}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 34,25\text{H}_2\text{O}$

Встановлено, що з розчину за $Z = 1,29$ синтезовано празеодиму гідрогептавольфрамат $\text{Pr}_{1,67}[\text{HW}_7\text{O}_{24}]_5 \cdot 16,5\text{H}_2\text{O}$. Методами хімічного аналізу та ІЧ-спектроскопії встановлено, що з розчинів за $Z = 1,29$ (витриманого підкисленим) та $Z = 1,50$ відбувається осадження солей з ундекавольфрамат-аніоном, лакунарним похідним аніону зі структурою Кеггіна, $\text{Pr}_2[\text{Pr}_2(\text{H}_2\text{O})_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{70}(\text{OH})_4] \cdot 41\text{H}_2\text{O}$ ($Z = 1,29$) та $\text{Na}_2\text{Pr}_2[\text{Pr}_2(\text{H}_2\text{O})_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{72}(\text{OH})_2] \cdot 37\text{H}_2\text{O}$ ($Z = 1,50$).

Роботу виконано за підтримки Міністерства освіти і науки України (проект № 0116U002521).

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА $\text{Pr}(\text{Nd})_3\text{Ni}_{0.5}\text{GeS}_7$ *Марчук О. В.*¹, Гулай Л. Д.²

Східноєвропейський національний університет імені Лесі Українки,

¹кафедра неорганічної та фізичної хімії,²кафедра екології та охорони навколишнього середовища

пр. Волі 13, 43025 м. Луцьк

Marchuk.Oleg@eenu.edu.ua

Сполуки, що містять у своєму складі рідкісноземельні метали (РЗМ) і перехідні 3d-метали Періодичної системи, зокрема нікель, є перспективними речовинами для розробки багатофункціональних матеріалів, що володіють магнітними властивостями. Відомо, що кристалічна структура є фундаментальною характеристикою речовини, яка визначає широкий спектр її фізичних та хімічних властивостей. Відомості про кристалічну структуру речовини дозволяють також прогнозувати шляхи синтезу нових матеріалів для потреб напівпровідникових технологій. Представлені результати є одним із етапів систематичного вивчення кристалічної структури сполук, що утворюються у халькогенідних системах $\text{NiS} - \text{R}_2\text{S}_3 - \text{D}^{\text{IV}}\text{S}_2$ ($\text{R} - \text{РЗМ}$, $\text{D}^{\text{IV}} - \text{Si, Ge, Sn}$).

Сплави стехіометричного складу $\text{Pr}_3\text{Ni}_{0.5}\text{GeS}_7$ і $\text{Nd}_3\text{Ni}_{0.5}\text{GeS}_7$ виготовляли сплавлянням простих речовин напівпровідникової чистоти у вакуумованих кварцевих контейнерах циліндричної форми (величина залишкового тиску – 0,1 Па). Синтез проводили у муфельній печі з програмним управлінням технологічними процесами МП-30. Максимальна температура синтезу – 1420 К. Гомогенізуючий відпал проводили за температури 770 К впродовж 500 годин. Після відпалювання сплави гартували в холодній воді без попереднього розбивання ампул.

Розрахунок кристалічної структури сполук $\text{Pr}(\text{Nd})_3\text{Ni}_{0.5}\text{GeS}_7$ здійснювали за дифрактограмами, що були отримані на дифрактометрі ДРОН 4-13 в межах $2\Theta = 10\text{--}100^\circ$ ($\text{CuK}\alpha$ – випромінювання, крок сканування – 0.02° , експозиція у кожній точці – 20 с). Кристалохімічні розрахунки проводили використовуючи пакет програм WinCSD.

Комплекс проведених розрахунків дозволив нам констатувати приналежність кристалічної структури сполук $\text{Pr}_3\text{Ni}_{0.5}\text{GeS}_7$ і $\text{Nd}_3\text{Ni}_{0.5}\text{GeS}_7$ до структурного типу $\text{La}_3\text{Mn}_{0.5}\text{SiS}_7$ (ПГ $P6_3$) та визначити параметрами елементарних комірок: $a = 1.01033(3)$ нм і $c = 0.57923(3)$ нм для $\text{Pr}_3\text{Ni}_{0.5}\text{GeS}_7$ та $a = 1.00610(3)$ нм і $c = 0.57919(3)$ нм для $\text{Nd}_3\text{Ni}_{0.5}\text{GeS}_7$. У структурі синтезованих сполук атоми $\text{Pr}(\text{Nd})$ координують навколо себе по вісім атомів Сульфуру, атоми Ni – по шість атомів Сульфуру, утворюючи майже симетричні октаедри, а атоми Ge центровані у тетраедрах (рис.). Міжатомні віддалі у структурах синтезованих сполук добре узгоджуються з відповідними сумами іонних радіусів компонентів.

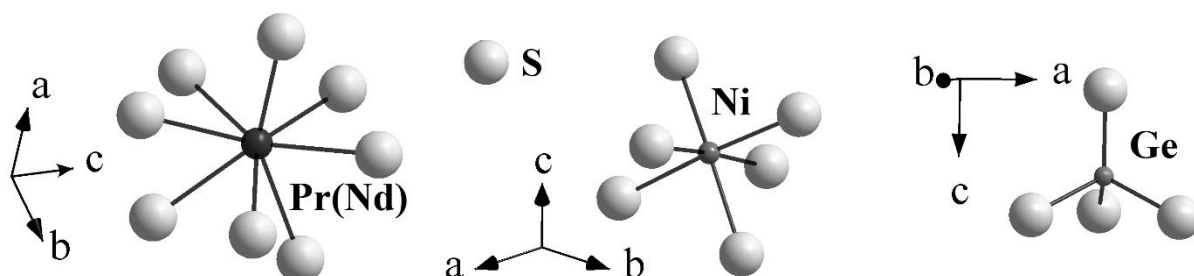


Рис. Координаційне оточення атомів Pr , Nd , Ni та Ge у сполуках $\text{Pr}_3\text{Ni}_{0.5}\text{GeS}_7$ і $\text{Nd}_3\text{Ni}_{0.5}\text{GeS}_7$

**СИНТЕЗ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ МАГНІТОКЕРОВАНИХ
МАГНІЙВМІСНИХ ШПІНЕЛЬНИХ АДСОРБЕНТІВ**

Мислін М. В., Миронюк І. Ф., Татарчук Т. Р.

ДВНЗ «Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»

marjanysik@gmail.com

Кількість виробництв з кожним роком все зростає, тому повітря, ґрунти і водні ресурси продовжують забруднюватися різними токсичними речовинами. Серед різних методів очистки одним із поширених є сорбція твердими речовинами з водних розчинів. Сьогодні в Україні існують певні труднощі із очисними системами багатьох підприємств. Часто використовується застаріле обладнання і неефективні засоби очистки стічних вод, тому розробка нових адсорбційних матеріалів є актуальним. Важливе місце серед них посідають магнітокеровані адсорбенти з високою адсорбційною ємністю. У цьому випадку магнітні сорбенти мають значну перевагу, оскільки завдяки магнітній сепарації можуть бути вилучені із розчину.

За основу був вибраний ферит магнію, в який вводили домішку Алюмінію, та досліджували вплив вмісту Алюмінію на структурні, морфологічні, магнітні та адсорбційні властивості зразків. Магній ферит-алюмінати $\text{MgAl}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4$ (де x змінюється від 0 до 2, з кроком 0,2) були синтезовані методом золь-гель автогоріння з використанням нового комбінованого палива (аланін + карбамід).

Структуру шпінелі у зразків було підтверджено Х-променевим аналізом, розмір кристалітів, розрахований за формулою Шеррера, становить 10–15 нм. Параметр елементарної комірки змінюється від 8,377 Å для магній фериту до 8,073 Å для магній алюмінату. Параметр комірки зменшується при збільшенні вмісту Алюмінію у магній фериті, що пов'язано з тим, що радіус Al^{3+} менший ніж радіус Fe^{3+} – $r(\text{Al}^{3+}) = 0,535$ Å, а $r(\text{Fe}^{3+}) = 0,645$ Å (в октаедричному оточенні). Морфологію зразків досліджено за допомогою скануючої електронної мікроскопії, яка підтвердила пористу структуру синтезованих зразків, та наявність агрегатів частинок, що пояснюється магнітною природою зразків. Хімічний склад зразків підтверджено енерго-дисперсійною спектроскопією (ЕДС). Магнітні параметри отримано з використанням вібраційної магнетометрії. Ферит алюмінати магнію показують феромагнітну поведінку з вузькими петлями гістерезису.

Дослідження адсорбційних властивостей ферит-алюмінатів проводили на модельній реакції адсорбції метилоранжу. Для характеристики заряду поверхні використано вимірювання точки нульового заряду (pH_{pzc}), тобто значення pH розчину, де заряд чистої поверхні дорівнює нулю. pH_{pzc} ферит-алюмінатів магнію змінюється в межах від 9,7 до 10,8, тобто поверхня зразків є позитивно зарядженою і негативно заряджається лише при pH вище pH_{pzc} .

Дослідження проводили при $\text{pH} = 7$, та концентрації адсорбента 2 г/л; концентрації вихідних розчинів барвника змінювалися від 10 до 300 мг/л, а для активніших зразків – до 1500 мг/л. Ізотерми були опрацьовані математичними моделями Ленгмюра, Фрейндліха, Дубініна-Радускевича, Темкіна та Сіпса. Модель Ленгмюра найкраще описує механізм проходження адсорбції, оскільки коефіцієнт кореляції ($R^2 = 0,987\text{--}0,999$). Значення R_L знаходиться в межах від 0 до 1, що означає, що поверхня магній ферит-алюмінатів адсорбує метилоранж в умовах даного дослідження. Максимальна адсорбційна ємність – від 23 до 417 мг/г. Вивчення кінетики адсорбції показало, що метилоранж повністю абсорбується протягом 150 хвилин на найбільш активному зразку $\text{MgAl}_{1,6}\text{Fe}_{0,4}\text{O}_4$.

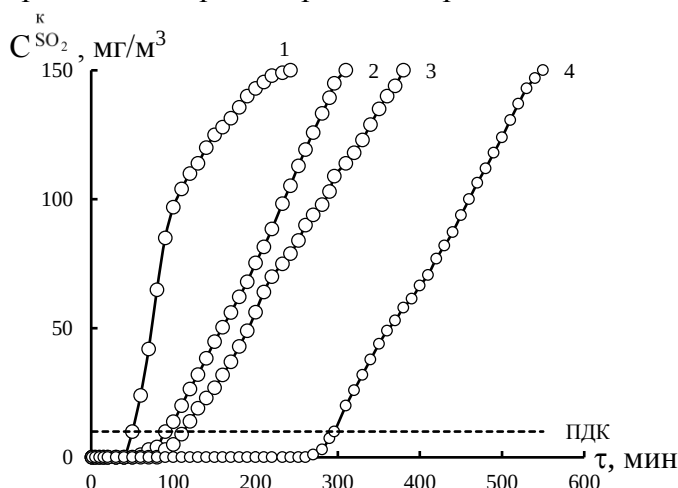
ХЕМОСОРБЦИОННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ ДИОКСИДА СЕРЫ ПРИРОДНЫМ И МОДИФИЦИРОВАННЫМ БАЗАЛЬТОВЫМ ТУФОМ

Киосе Т. А., *Назар А. П.*

Одесский национальный университет имени И. И. Мечникова

kiosetatyana@gmail.com

Для очистки воздуха от SO_2 широко используются природные сорбенты, но в большинстве случаев они не обеспечивают снижение содержания диоксида серы до предельно допустимой концентрации (ПДК = 10 мг/м^3). Поглотительные свойства природных сорбентов, а таким образом, их защитные свойства, которые определяются временем защитного действия ($\tau_{\text{ПДК}}$), можно улучшить путем их химического модифицирования. В работе в качестве адсорбента диоксида серы и носителя хемосорбционных композиций используется природный полиминеральный цеолит базальтовый туф (П-БТ) (Ровенская обл.), содержащий следующие цеолитные фазы (масс. %): клиноптилолит и морденит – 35–40; монтмориллонит – 30–40; полевошпат, кремнезем, гематит, рутил – остальное. Химически модифицированные образцы базальтового туфа получали методом пропитки П-БТ по влагоемкости водными растворами NaOH или ГМТА (гексаметиленetetрамин, уротропин) или бинарным раствором NaOH + ГМТА при заданных концентрациях компонентов с последующей стадией «созревания» в течение 20 часов и сушкой при 110°C до постоянной массы. Все образцы были протестированы в процессе очистки воздуха, содержащего помимо диоксида



Динамика поглощения диоксида серы природным

(1) и модифицированным базальтовым туфом:

2 – NaOH /П-БТ; 3 – ГМТА/П-БТ;

4 – NaOH -ГМТА/П-БТ ($C_{\text{NaOH}} = C_{\text{ГМТА}} = 2,0 \cdot 10^{-4}$;
 $C_{\text{NaOH+ГМТА}} = 4,0 \cdot 10^{-4}$ (моль/г).

серы, пары воды. На рис. представлены кинетические кривые, характеризующие изменение конечной концентрации диоксида серы ($C^k_{\text{SO}_2}$) во времени при пропускании газовой смеси через неподвижный слой исследуемых образцов (1–4). Природный базальтовый туф (1), полностью поглощает диоксид серы в течение 30 минут (τ_0), после чего концентрация SO_2 на выходе из реактора быстро повышается и через 240 минут достигает его начальной концентрации. Химическое модифицирование базальтового туфа веществами,

которые взаимодействуют непосредственно с диоксидом серы, значительно улучшает параметры процесса адсорбции – увеличивается τ_0 , $\tau_{\text{ПДК}}$ и количество поглощенного SO_2 . Для двухкомпонентной композиции NaOH -ГМТА/П-БТ (4) увеличивается продолжительность участков, на которых происходит полное поглощение SO_2 , $C^k_{\text{SO}_2}$ нарастает до начальной концентрации гораздо медленнее, чем в случае однокомпонентных композиций (2–3). Анализ полученных результатов позволяет сделать вывод о синергетическом эффекте, обусловленном совместным нанесением NaOH и ГМТА (время защитного действия двухкомпонентной композиции ($\tau_{\text{ПДК}} = 300 \text{ мин}$) превышает суммарное время защитного действия двух однокомпонентных композиций, которое составляет 90 и 110 минут, соответственно).

КООРДИНАЦІЙНІ СПОЛУКИ Cu (II) з *N*-ДОНОРНИМИ ЛІГАНДАМИ ТА ДИЦІАНАМІДОМ: КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА ТА МАГНІТНІ ВЛАСТИВОСТІ

Букриньов О. С., *Нікіміна А. Д.*, Вітушкіна С. В.
Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна
annassty@gmail.com

Складна структура псевдогалогенідів та наявність в них різних донорних атомів призводять до їх різноманітних способів координації, що найчастіше всього проявляється в псевдогалогенідних комплексах перехідних металів. Комплекси з цими іонами, включаючи диціанамід (dca , $N(CN)_2^-$), проявляють магнітні властивості так званих «молекул-магнітів» (SMM). Наприклад, моноядерні комплекси Co^{II} з псевдогалогенідними лігандами мають повільну магнітну релаксацію в прикладеному або навіть нульовому магнітному полі, характерну для SMM. Повільна магнітна релаксація в SMM не обмежується негативною анізотропією, а й спостерігається в системі з легкоплосинною анізотропією (позитивним параметром D) і її походження зараз активно обговорюється в літературі.

Дана робота присвячена синтезу, дослідженню особливостей будови та магнітних властивостей нових комплексів Cu^{II} на основі диціанаміду (dca) з *N*-донорними плоскими лігандами такими як, 4-аміно-3,5-біс(піридин-2-іл)-1,2,4-триазол ($abpt$) та 2,2'-біхінолін ($biqu$). В ході досліджень з системи $Cu^{II} - dca - abpt$ або $biqu$ було одержано координаційні сполуки $[Cu(dca)_2(abpt)_2](1)$, $[Cu_2(dca)_2(\mu-OH)_2(biqu)_2] \cdot biqu$ (**2**), $[Cu_2(\mu-dca)_2(dca)_2(biqu)_2](3)$, $[Cu_2(\mu-C_2H_5O)_2(dca)_2(biqu)_2](4)$. Сполуки досліджували за допомогою елементного аналізу, ІЧ-спектроскопії, РСА, вимірювання магнітної сприйнятливості.

Вивчення кристалічної структури комплексів показало що, dca проявляє основні способи координації, виступаючи як кінцевий або містковий ліганд. При цьому центральний атом Cu^{II} реалізує два характерні координаційні числа 5 (комплекси **2**, **3**, **4**) та 6 (комплекс **1**). Структури комплексів стабілізуються системою водневих зв'язків та π - π взаємодією.

Дослідження магнітної сприйнятливості отриманих сполук вказує на наявність непрямої сильної та слабкої антиферомагнітної взаємодії в димерних комплексах **2** та **3**, відповідно, за рахунок місткових лігандів OH^- та dca . Тоді як для комплексу **1** була підтверджена повільна релаксація намагніченості в ненульовому статичному магнітному полі, завдяки чому комплекс **1** можна віднести до індукованих полем SMM.

СПЕКТРАЛЬНІ ДОСЛІДЖЕННЯ АНІОННИХ ТЕТРАКІС-КОМПЛЕКСІВ ЛАНТАНОЇДІВ З ДИМЕТИЛ-N-ТРИХЛОРАЦЕТИЛАМІДОФОСФАТОМ ТА ЗОВНІШНЬОСФЕРНИМ ТЕТРАФЕНІЛФОСФОНІЙ КАТІОНОМ*Олишевець І. П., Каряка Н. С., Амірханов В. М.*

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

вул. Льва Толстого, 12, Київ, Україна, 01033

olishevetsirina@gmail.com

Люмінесцентні властивості сполук лантанойдів привертають увагу багатьох дослідницьких груп у зв'язку з перспективами їх практичного використання. Зокрема, сполуки Eu^{3+} з тривалим часом життя люмінесценції представляють інтерес завдяки їх можливому використанню як біологічних зондів та електролюмінесцентних матеріалів. Серед найбільш популярних координаційних сполук лантанойдів, що нині інтенсивно досліджуються, слід відмітити β -дикетонати та комплекси з гетерозаміщеними аналогами β -дикетонів. Перевагами зазначених сполук є синтетична доступність даних лігандів та унікальні люмінесцентні властивості комплексів на їх основі.

Карбациламідифосфати (КАФ), сполуки загальної формули $\text{RC(O)NHP(O)R}'_2$, які широко вивчаються протягом останніх десятиліть, є представниками O,O-хелатуючих лігандів, які можуть бути ефективними сенсibilізаторами люмінесценції лантанойдів, оскільки мають досить високі коефіцієнти абсорбції та здатні утворювати стійкі координаційні сполуки з іонами Ln^{3+} . Природа замісників біля хелатуючого фрагменту у складі карбациламідифосфатів впливає на біологічні, координаційно-хімічні та спектральні властивості сполук на їх основі.

Дана робота присвячена синтезу та дослідженню нових координаційних сполук лантанойдів складу $\text{PPh}_4[\text{LnL}_4]$ на основі КАФ ліганду диметил-N-трихлорацетиламідифосфату, де $\text{Ln} = \text{La}, \text{Nd}, \text{Eu}$; $\text{L}^- = [\text{CCl}_3\text{C(O)NP(O)(OCH}_3)_2]$.

Отримані сполуки були досліджені методами термогравіметричного аналізу, ІЧ, ^1H -ЯМР, електронної та люмінесцентної спектроскопії. Встановлено, що ліганд координований до центрального атома в депротонованому стані у бідентатно-хелатний спосіб через атоми оксигену карбонільної та фосфорильної груп з реалізацією КЧ центрального йону 8. Співвідношення інтенсивності смуг у спектрі люмінесценції комплексу європію вказує на низьку симетрію найближчого оточення лантанойду. Показано, що катіон тетрафенілфосфонію сенсibilізує емісію йону європію та фотозбудження комплексу $\text{PPh}_4[\text{EuL}_4]$ УФ випромінюванням та спричиняє червону люмінесценцію Eu^{3+} з домінуючою смугою переходу $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_2$ у спектрі. Час життя люмінесценції комплексу європію складає 1.40–1.64 мс залежно від довжини хвилі збудження.

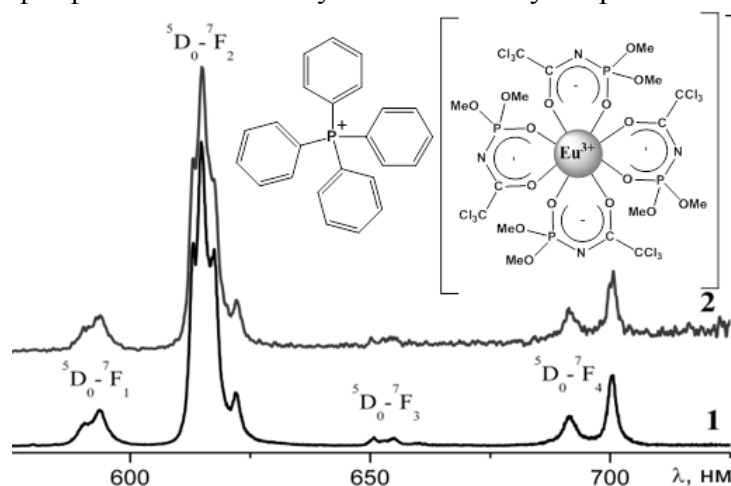


Рис. 1. Спектр люмінесценції кристалічного зразка комплексу $\text{PPh}_4[\text{EuL}_4]$ при $\lambda_{\text{ex}} = 393$ нм (1) та $\lambda_{\text{ex}} = 277$ нм (2).

**СИНТЕЗ ТА КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА ГАЛОГЕНІДНИХ КОМПЛЕКСІВ Cu
З КАТІОНОМ N-АЛІЛ-4-ЦІАНОПІРИДИНІЮ***Павлюк О. В.¹, Лук'янов М. Ю.¹, Горешнік Е. А.²*¹Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Кирила і Мефодія, 8,
79005 Львів, Україна²Інститут Йожефа Стефана, Ямова 39, SI-1000 Любляна, Словенія
pavalex@gmail.com

Сполуки Купруму віддавна цікавлять науковців як унікальним спектром фізичних властивостей, так і низкою цікавих особливостей з точки зору теорії хімічного зв'язку. Зокрема, комплекси згаданого елемента знаходять широке використання в галузі промислового металокомплексного каталізу, виробництва джерел світла, корозійного захисту. Відомо також про використання базованих на координаційних сполуках купруму медичних препаратів та сенсорів чутливих до біоагентів. Також досить добре вивчено використання піридинових лігандів в аспекті супрамолекулярного дизайну каркасних полімерів на основі перехідних металів. З такої точки зору цікаво було дослідити комплексоутворення N-аліл-4-ціанопіридиній катіону з галогенідами купруму.

Виходячи з вище наведеного, нами було добуто та рентгеноструктурно досліджено два купрогалогенідні комплекси складу $[\text{CNC}_5\text{H}_4\text{NC}_3\text{H}_5]_2\text{CuCl}_{3,75}\text{Br}_{0,25}$ (**I**) та $[\text{CNC}_5\text{H}_4\text{NC}_3\text{H}_5]\text{CuBr}_2$ (**II**).

Сполуку $[\text{CNC}_5\text{H}_4\text{NC}_3\text{H}_5]_2\text{CuCl}_{3,75}\text{Br}_{0,25}$ (**I**) синтезовано під час безпосередньої взаємодії в середовищі метанолу N-аліл-4-ціанопіридиній броміду та купрум(II) хлориду в присутності металічної міді. Впродовж 2 діб з маточного розчину виростили червоні призматичні кристали комплексу.

В умовах зміннострумного електрохімічного синтезу виходячи з N-аліл-4-ціанопіридиній броміду та купрум(II) нітрату в н-пропанолі розчині. Впродовж 2 діб на мідних електродах виростили темно-червоні призматичні кристали комплексу **II**.

Методом рентгеноструктурного аналізу монокристалу (New Gemini Atlas дифрактометр, МоK α -випромінювання, 25242 виміряних рефлексів для **I** та 5166 для **II**) із використанням пакету програм SHELX встановлено кристалічну структуру отриманих сполук (для **I** – $R = 0,023$, $R_w = 0,055$ для 5061 рефлексів та 261 параметрів; для **II** – $R = 0,051$, $R_w = 0,134$ для 2396 рефлексів та 129 параметрів).

В вершинах тетраедричного координаційного оточення атома Cu(II) в кристалічній структурі комплексу **I** знаходяться статистичні суміші атомів галогенів (у позиції X(1) співвідношення Cl/Br складає 0,97/0,03, X(2) – 0,96/0,04, X(3) – 0,93/0,07, X(4) – 0,88/0,12, відповідно). Разом з аніонами $[\text{CuX}_4]^{2-}$ структуру формують два кристалографічно незалежні $[\text{CNC}_5\text{H}_4\text{NC}_3\text{H}_5]^+$ катіони (незначно відрізняються значеннями міжатомних віддалей та валентних кутів). Додатково структура стабілізована сіткою слабких C–H...Br зв'язків.

Тетраедричне координаційне оточення атома Cu(I) в кристалічній структурі комплексу **II** утворюють чотири атоми брому. Завдяки містковій функції останніх, поліедри $\{\text{CuBr}_4\}$ з'єднані протилежними вершинами у незначно гофровані нескінченні поліаніонні утворення $\{\text{CuBr}_2\}_n^{n-}$, розташовані вздовж напрямку *a* елементарної комірки. Незважаючи на потенційну можливість π -комплексотворення алільної групи N-аліл-4-ціанопіридинію, подвійний зв'язок не бере участі в координації з атомами металу, а органічні катіони закріплені в порожнинах структури як електростатичною взаємодією, так і слабкими водневими зв'язками C–H...Br.

NEW TERNARY LAVES PHASES FROM THE Mg-Ni-Ga SYSTEM

Pavlyuk N. V.¹, Kowalczyk G.², Krzyczmonik M.², Balińska A.², Dmytriv G. S.¹,
Pavlyuk V. V.^{1,2}

¹Department of Inorganic Chemistry, Ivan Franko National University of Lviv,
6 Kyryla i Mefodiya St., 79005 Lviv, Ukraine

²Institute of Chemistry, Environment Protection and Biotechnology,
Jan Długosz University of Częstochowa, Poland
nazar.pavlyuk@gmail.com

New ternary Laves phases were prepared from pure elements which were melted in induction furnace under continuous argon flow. Metallic grey lamine-like crystals were found using a conventional light microscope. Single crystal data were collected by using a four-circle diffractometer (*Xcalibur Oxford Diffraction diffractometer*) with CCD detector. Scans were taken in the ω mode, the empirical absorption corrections were made by CrysAlisRed. The crystal structure of $\text{MgNi}_{1.11}\text{Ga}_{0.89}$, MgNiGa and Mg_2NiGa_3 compounds were successfully solved by direct methods. The $\text{MgNi}_{1.11}\text{Ga}_{0.89}$ is cubic (MgCu_2 -type), space group $Fd-3m$ and refined lattice parameters are: $a = 7.0781(8) \text{ \AA}$. The MgNiGa is hexagonal (MgZn_2 -type), $P6_3/mmc$ and refined lattice parameters are: $a = 5.0781(3) \text{ \AA}$, $c = 8.194(1) \text{ \AA}$. The Mg_2NiGa_3 is orthorhombic (Mg_2MnGa_3 -type), $Cmcm$ and refined lattice parameters are: $a = 5.4152(10) \text{ \AA}$, $b = 8.6512(13) \text{ \AA}$, $c = 8.5621(15) \text{ \AA}$. The starting atomic parameters were taken from an automatic interpretation of direct methods followed by difference Fourier syntheses using SHELX-97 package programs. Atomic coordinates and thermal displacement parameters are listed in the Table 1. Finally, all parameters for $\text{MgNi}_{1.11}\text{Ga}_{0.89}$ phase are refined to $R[F^2 > 2s(F^2)] = 0.0173$, for MgNiGa phase are refined to $R[F^2 > 2s(F^2)] = 0.0143$, for Mg_2NiGa_3 are refined to $R[F^2 > 2s(F^2)] = 0.0599$. The unit cell of Mg_2NiGa_3 and atomic nets is presented in Fig.

Table. Crystallographic data for Laves phases of the Mg-Ni-Ga system

Atom	Wyck.	x/a	y/b	z/c	B _{eqv.}
Mg₂NiGa₃					
Ga1	4a	0	0	1/2	1.48(7)
Ni1	4c	0	0.15806	1/4	2.09(8)
Ga2	8g	-0.26372	-0.09114	1/4	1.39(6)
Mg3	8f	0	0.32705	0.56468	1.6(1)
MgNi_{1.11}Ga_{0.89}					
Mg	8a	1/8	1/8	1/8	0.8(1)
Ni+Ga	16d	0	1/2	0	1.12(5)
MgNiGa					
(Ga+Ni)1	6h	0.17017	0.34033	1/4	1.38(3)
(Ni+Ga)2	2a	0	0	0	1.75(3)
Mg	4f	2/3	1/3	1/16	1.25(6)

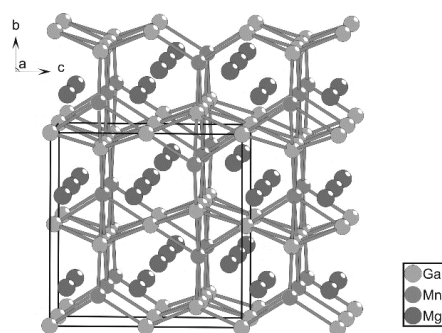


Fig. Atomic nets in the Mg_2NiGa_3 structure

Funding for this research was provided by National Science Centre, Poland
(award No. 2017/25/B/ST8/02179).

ГЕТЕРОМЕТАЛЕВІ p-ЕЛЕМЕНТВМІСНІ КООРДИНАЦІЙНІ СПОЛУКИ КУПРУМУ(II) І НІКОЛУ(II) З ОСНОВАМИ ШИФФА

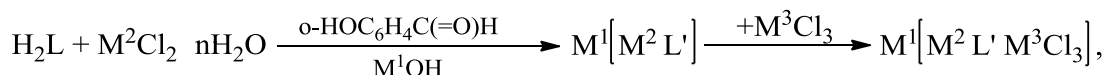
Панченко Т. І., Євсєєва М. В., Ранський А. П., Прадівляна А. С.

Вінницький національний технічний університет

tranchenko88@gmail.com

Гетерометалеві координаційні сполуки є об'єктами досліджень як перспективні нові матеріали з цінними електрохімічними, магнітними, електричними, електронними, біологічними властивостями і також можуть використовуватись як прекурсори для отримання оксидних керамік різного типу та призначення. Проте отримання таких координаційних сполук традиційним методом синтезу у порівнянні з прямим та матричним способами має ряд недоліків та є багатостадійним і складним процесом.

У даній роботі нами синтезовано нові гетерометалеві координаційні сполуки загальної формули $M^1[M^2L'M^3Cl_3]$ за схемою:

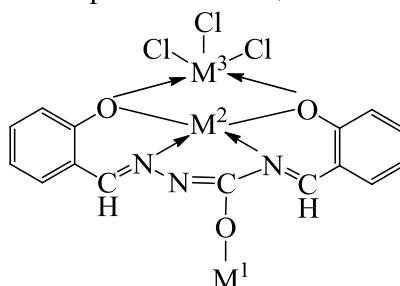


де $M^1 = K^+, NH_4^+$; $M^2 = Cu^{2+}, Ni^{2+}$; $M^3 = Sb^{3+}, Bi^{3+}$;

H_2L = семикарбазон саліцилового альдегіду; $H_3L' = N,N'$ -біс(саліциліден)семикарбазид.

Синтез проводили при незначному нагріванні (65 °C) суміші калій або амоній [N,N'-біс(саліциліден)семикарбазидатокупратів(II)] чи ніколатів(II) в хлороформі і хлоридів стибію(III) або бісмуту(III) в ацетоні та перемішуванні реакційної маси. При цьому для купрумвмісних сполук коричневий колір реакційної маси змінювався на темно-зелений, а для ніколвмісних – оранжевий на коричневий, що вказує як на проходження реакції комплексоутворення, так і очевидно, на зміну координації катіонів металу. Встановлено, що синтезовані комплексні сполуки практично нерозчинні у спиртах, етері, ацетоні, бензені, гексані, погано розчинні в ДМФА і ДМСО, у воді при нагріванні розкладаються.

На основі даних елементного аналізу, ІЧ-спектроскопічних, магнетохімічних та термогравіметричних досліджень доведено, що гетерометалеві стибій(III)- та бісмут(III)вмісні координаційні сполуки купруму(II) і ніколу(II) з N,N'-біс(саліциліден)семикарбазидом мають у своєму складі три різних за хімічною природою метали (s-, p-, d-) та чотири хелатних цикли такого типу:



де $M^1 = K^+, NH_4^+$; $M^2 = Cu^{2+}, Ni^{2+}$; $M^3 = Sb^{3+}, Bi^{3+}$.

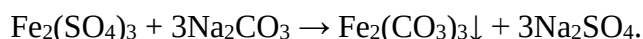
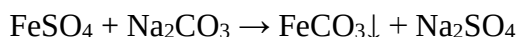
Утворення трьох хелатних циклів: двох M^2NO та одного M^2N_2 досліджено у цілому ряді робіт, тоді як координаційні сполуки наведеного типу до складу яких входить четвертий хелатний цикл з координаційним вузлом M^3O_2 отриманий вперше.

Дослідження електричних властивостей синтезованих сполук показало, що вони є низькоомними напівпровідниками, на параметри яких впливає як природа центрального йона d-елемента так і природа кислоти Льюїса. Отримані гетерометалеві комплексні сполуки можуть знайти застосування на практиці при виготовленні термочутливих елементів в терморезисторах.

**ВИДАЛЕННЯ ІОНІВ ВАЖКИХ МЕТАЛІВ ІЗ ВОДИ ШЛЯХОМ
ЗВ'ЯЗУВАННЯ З КАРБОНАТ-АНІОНАМИ***Радовенчик Я. В.*

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
r.yar@ukr.net

В процесах очищення стічних вод від іонів важких та кольорових металів досить ефективним вважається відомий метод карбонатного осадження, який передбачає попередню обробку води карбонатами чи гідрокарбонатами лужних металів. Очевидно, що в результаті реалізації карбонатного осадження наприклад, іонів заліза, в розчині матимуть місце реакції, записані в спрощеному вигляді як:



Ефективність методу досить висока, однак проблема полягає в тому, що в процесі реалізації методу утворюється значна кількість високодисперсних твердих часток, котрі можливо відділити від очищеної води тривалим відстоюванням в присутності додаткових реагентів – коагулянтів та флокулянтів. Тому нами було запропоновано реалізувати карбонатний метод в динамічних умовах. Це дозволяє фіксувати іони важких та кольорових металів безпосередньо на завантаженні та відмовитись від додаткових процесів відстоювання чи фільтрування. В якості завантаження ми використовували природний карбонат кальцію з розміром часток 1,0–1,5 мм. Висота завантаження із часток карбонату кальцію складала 17 см.

Цілком очевидно, що перш, ніж рекомендувати той чи інший метод для використання, необхідно визначити його вплив на характеристики води. Тому на першому етапі нами було досліджено зміну параметрів води при фільтруванні через гранульований карбонат кальцію. В результаті досліджень встановлено, що при використанні дистильованої води та води з київського водопроводу, для дистильованої води при фільтруванні через карбонат кальцію спостерігається ріст рН від початкового 6,3 до 8,8–10,0. Причому, ріст рН в значній мірі залежить від швидкості фільтрування. Жорсткість дистильованої води при низьких швидкостях фільтрування зростає від 0,1 мг-екв/дм³ до 0,9 мг-екв/дм³, але при збільшенні швидкості фільтрування до 2 м/год вона знижується до 0,5 мг-екв/дм³. Вода з київського водопроводу також суттєво змінює свої параметри. Як і в попередньому випадку водневий показник зростає від початкового 7,0 до 8,6–10,1. Щодо жорсткості, то варто зауважити, що із збільшенням швидкості фільтрування вона починає зростати, що можна пов'язати із зниженням рН.

В промисловості зустрічається багато стічних вод із різними водневими показниками, тому було цікаво дослідити, які в цьому випадку наслідки матиме фільтрування їх через карбонат кальцію. Як встановлено, при фільтруванні через завантаження стічних вод із різним значенням рН спостерігається їх нейтралізація та переведення рН в лужну область. Цей факт суттєво впливає на умови видалення важких металів і не допускає використання даного методу для обробки питних вод. Варто також відмітити, що при початковому водневому показнику нижче 4,0 спостерігається інтенсивне розкладання карбонату кальцію з виділенням вуглекислого газу та руйнуванням завантаження. Варто також звернути увагу на той факт, що фільтрування води через завантаження із часток карбонату кальцію супроводжується збільшенням лужності обробленої води. Так, при швидкості фільтрування 0,6 м/год лужність дистильованої води зростає з 0,7 до 1,0 ммоль/дм³, а лужність водопровідної води – з 0,8 до 2,0 ммоль/дм³. Такі зміни не завжди прийнятні, особливо у випадку повторного використання оброблених вод.

HYDROGEN ELECTROSYNTHESIS WITH ANODE PROCESS DEPOLARIZATION BY ALUMINUM ALLOYS

Rudenko N. O., Zhelavskaya Yu. A., Smirnova O. L.

National Technical University "Kharkiv Polytechnic Institute"

rudenko231@ukr.net

One direction of research into new methods of electrochemical hydrogen synthesis is the aluminium-hydrogen cycle operating in the USA, Canada, Russia, which is based on the anodic dissolution of widely available aluminum alloys in alkaline and alkaline chloride solutions.

Hydrogen electrosynthesis method with anode process depolarization with aluminum alloys is proposed. The depolarization effect is based on aluminum alloy dissolution on anode instead of oxygen discharge. Aluminum dissolution parameters are influenced by a number of factors: the concentration of the electrolyte components, the composition of the aluminum alloy, the current density, the temperature, the surface structure of the alloy.

The influence of the aluminum alloy composition (table) on the process of its anodic dissolution in 1 M NaOH with the addition of 1 % NaCl solution as an activator was investigated within a temperature range of 25–30 °C. Polarization characteristics in the electrode materials research were obtained with using of the PI-50.1 potentiostat with "TeleMax" analog-to-digital converter data-transferring to a computer. Electrolysis in galvanostatic mode was carried out using a stabilized direct current source Power Supply 15V-15A.

Table. Aluminum alloy composition

Alloy type	Chemical composition, %						
	Al	Mn	Mg	Cu	Fe	Zn	Si
AMts	Main component	1–1,6	0,2	0,1	0,7	0,1	0,5
AMg	Main component	0,2	0,7–1,6	0,1	0,1	–	0,1
AK8	Main component	0,2–0,6	0,2–0,55	1,5	1	–	6–8

According to the analysis of the anodic polarization characteristics obtained with using electrodes made from the investigated alloys, it was established that the highest dissolution rates of alloys are occurred at potentials $E = -0,5 \div -0,3$ V after which the limit current density connected with the formation of oxide-chloride compounds due to chlorine-ions adsorption is appeared. The anode dissolution rate of the AMg alloy electrode is maximal, because of the magnesium impurity complete dissolution and diffusion into the solution under the anodic polarization conditions. Manganese and silicon impurities in the AMts and AK8 alloys compositions form insoluble oxides compounds on the anodes surface, which prevents their dissolution.

Electrolysis in galvanostatic mode was carried out using an anode made from an aluminum alloy AMg. Hydrogen electrosynthesis with a gradual change of the operating current density from 3 to 1 A/dm² can be implemented continuously for 8–10 hours. The voltage on the cell is 0,7–1 V.

Voltage reduction in the electrolyzer for 1,0–1,5 V in comparison with alkaline electrolysis, which leads to electricity saving up to 50 %, can be reached by aluminum alloys depolarization of anode process. This process is safer because of absence of oxygen discharge.

STRUCTURAL CHEMISTRY OF COPPER(I) π -COMPLEXES WITH ALLYL ESTERS OF SOME HETEROCYCLIC SUBSTITUTED ACETIC ACIDS

Slyvka Yu. I.¹, Goresnik E. A.², Myskiv M. G.¹

¹Ivan Franko National University of Lviv, Kyryla i Mefodiya 6, 79005 Lviv, Ukraine

²Jožef Stefan Institute, Jamova 39, SI-1000 Ljubljana, Slovenia

yurii.slyvka@lnu.edu.ua

Copper(I) π -complexes with alkenes have received considerable theoretical and practical interest because of their remarkable catalytic, luminescent activities and of other useful properties. Among them, a key role of heterocyclic allyl derivatives in crystal engineering of copper compounds with extremely rare occurred inorganic fragments were found in recent years. The synergy of a flexible allyl group and a conformationally rigid heterocyclic core plays an exceptionally crucial role in a stabilization of the unique fragments, resulting in compounds with enhanced nonlinear optical susceptibilities and a range of useful properties. In our work we firstly explored π -coordination activity of allyl esters of heterocyclic substituted acetic acids regarding copper(I) salts. For these purpose, two heterocyclic ligands have been prepared: allyl 1*H*-benzotriazol-1-ylacetate (Lig1) and diallyl 2,2'-(1,3,4-thiadiazole-2,5-diyl)disulfanediyl)diacetate (Lig2) (Fig.).

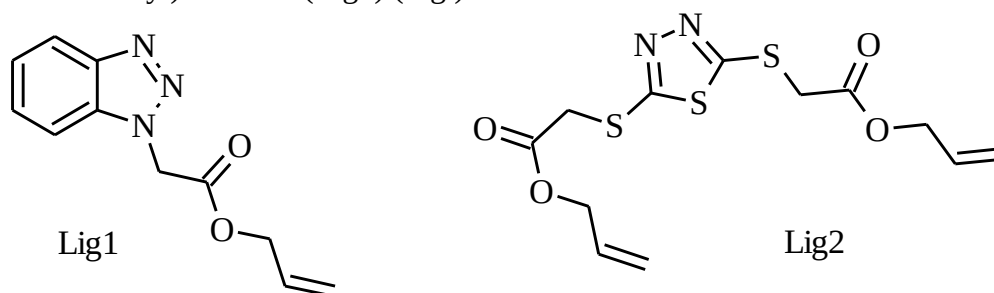


Fig. Ligands used for the complexes preparation

Crystalline copper π -compounds **1-4** (Table) were obtained under *ac* electrochemical conditions from alcohol solution of Lig1 or Lig2 and the corresponding copper(II) salts.

Table. Selected crystal data for copper(I) π -complexes with Lig1 and Lig2

	Composition	Space group	V, Å ³	Z	Density, g/cm ³	Coordination
1	[Cu ₂ (Lig1) ₄ (BF ₄) ₂]	<i>P</i> -1	1222.76(7)	1	1.59	$\sigma / \pi, \sigma$
2	[Cu ₂ (Lig1) ₄ (ClO ₄) ₂]	<i>P</i> -1	1241.09(12)	1	1.60	$\sigma / \pi, \sigma$
3	[Cu ₂ (Lig2)Cl ₂]	<i>P</i> -1	906.62(7)	2	1.99	π, σ
4	[Cu ₂ (Lig2)Br ₂]	<i>P</i> -1	940.23(3)	2	2.23	π, σ

Complexes **1** and **2** are isostructural and crystallize in centrosymmetric *P* $\bar{1}$ space group with two Lig1 molecules and one Cu(I) atom in the asymmetric unit. One independent Lig1 molecule is coordinated to the metal ions in a π, σ -bridging mode, being attached to copper by means of allylic C=C bond and one triazole N atom. Second Lig1 molecule (is σ -bonded only) together with F or O anion atoms completes coordination environment of Cu(I). Complexes **3** and **4** are also isostructural but their asymmetric units contain one organic ligand and two crystallographically independent copper(I). Molecule Lig2 is π, σ -bonded to copper atoms via allylic C=C bond and two thiadiazole N atoms. Different coordination environment of Cu1 and Cu2 in the structures **3** and **4** leads to a formation of stepped cubane {Cu₄Hal₄} fragments.

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА $\text{Er}_{2.36}\text{R}_{0.65}\text{Ge}_{1.28}\text{S}_7$ ($\text{R} = \text{Ce}, \text{Pr}$)*Смітюх О. В.*, Марчук О. В., Олексюк І. Д.

Східноєвропейський національний університет імені Лесі Українки,
кафедра неорганічної та фізичної хімії,
пр. Волі 13, 43025 м. Луцьк, Україна
Marchuk.Oleg@eenu.edu.ua

Детальне вивчення кристалічної структури тетрарних сполук є вагомим елементом поетапного дослідження нових матеріалів, які мають практичне використання у сучасних напівпровідникових технологіях. Міжатомні відстані та координаційне оточення атомів дають уявлення про внутрішню структуру речовини, а природа самих атомів є першопричиною її властивостей. У цьому контексті варто зазначити, що речовини до складу яких входять рідкісноземельні елементи володіють унікальними магнітними характеристиками.

Зразки для дослідження складу $\text{Er}_{2.36}\text{R}_{0.65}\text{Ge}_{1.28}\text{S}_7$ ($\text{R} = \text{Ce}, \text{Pr}$) готували сплавленням простих речовин напівпровідникової чистоти у вакуумованих кварцевих контейнерах циліндричної форми (величина залишкового тиску становила 0,1 Па). Синтез проводили у муфельній печі з програмним управлінням технологічними процесами МП-30. Максимальна температура синтезу – 1420 К, гомогенізуючий відпал тривав 500 годин за температури 770 К. Розрахунок кристалічної структури нових тетрарних сполук $\text{Er}_{2.36}\text{Ce}(\text{Pr})_{0.65}\text{Ge}_{1.28}\text{S}_7$ здійснювали за дифрактограмами, що були отримані на дифрактометрі ДРОН 4-13 в межах $2\Theta = 10\text{--}100^\circ$ ($\text{CuK}\alpha$ – випромінювання, крок сканування – 0.02° , експозиція у кожній точці – 20 с). Обробку даних та визначення кристалічної структури проводили використовуючи пакет програм WinCSD.

Нами встановлено, що сполуки $\text{Er}_{2.36}\text{Ce}(\text{Pr})_{0.65}\text{Ge}_{1.28}\text{S}_7$ кристалізуються у гексагональній сингонії (ПГ $P6_3$, символ Пірсона $hP23$) з параметрами елементарних комірок: $a = 0.97386(5)$ нм і $c = 0.58698(5)$ нм для $\text{Er}_{2.36}\text{Ce}_{0.65}\text{Ge}_{1.28}\text{S}_7$ та $a = 0.97481(5)$ нм і $c = 0.58459(4)$ нм для $\text{Er}_{2.36}\text{Pr}_{0.65}\text{Ge}_{1.28}\text{S}_7$.

Кристалічна структури досліджених сполук належать до структурного типу $\text{Dy}_3\text{Ge}_{1.25}\text{S}_7$. У положеннях 6с, які займають атоми Dy, локалізована статистична суміш ($\text{Er} + \text{Ce}(\text{Pr})$), атоми Ge у структурі заповнюють дві ПСТ – 2a і 2b (рис.).

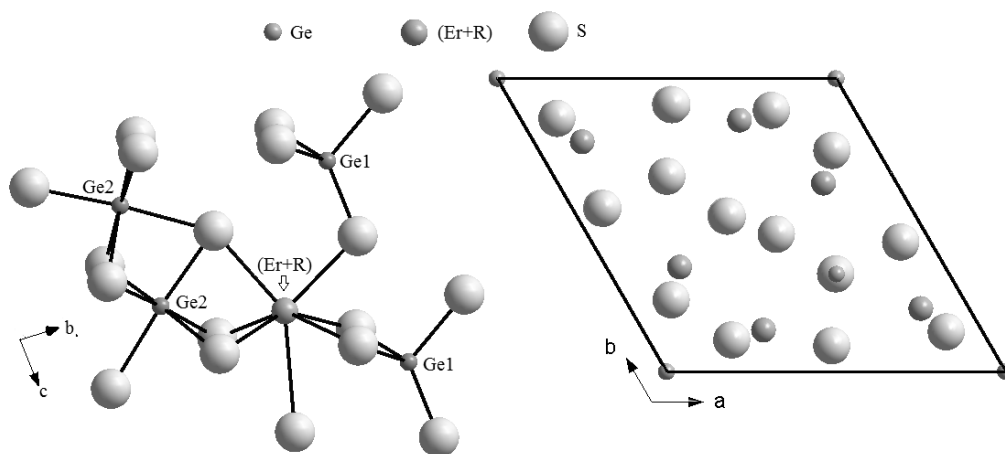


Рис. Розташування атомів Ge1 та Ge2 навколо статистичної суміші ($\text{Er} + \text{Ce}(\text{Pr})$) у сполуках $\text{Er}_{2.36}\text{Ce}(\text{Pr})_{0.65}\text{Ge}_{1.28}\text{S}_7$ та проекція елементарної комірки на площину ab

ВИЩІ ПОТРІЙНІ ФОСФІДИ Та

Смоляк О.¹, Ломницька Я.¹

Кафедра аналітичної хімії Львівського національного університету імені Івана Франка,
Львів, вул. Кирила і Мефодія 6
o_smolyak@ukr.net

Досить повно досліджені потрійні системи двох перехідних 3d- або 3d- і 4d- металів з Фосфором, побудовані діаграми фазових рівноваг переважно при 1070 К та розшифровані кристалічні структури тернарних сполук. Менше досліджені системи з 5d-металами, зокрема ті, що містять Та. Нами досліджені системи Та-Ti-P, Та-Mn-P, та системи, які містять Fe, Co, Ni, на предмет утворення вищих фосфідів.

Зразки синтезували спіканням порошків металів та червоного фосфору високої чистоти у вакуумованих кварцових ампулах при 1070 К. Зразки з вмістом до 0,35 мол. частки Р після спікання переплавляли в електродуговій печі. Усі зразки гомогенізували відпалом при 1070 К (800 год). Дослідження проводили методами рентгенівського аналізу, для обчислень використовували комплекси програм CSD та Fullprof.

У системі Та-Р відомий вищий фосфід TaP_2 зі структурою типу OsGe_2 . Ми синтезували зразки складу TaP_2 при 870, 1070 та 1170 К, однак при 1070 та 1170 К не отримали цієї бінарної сполуки, а лише ТаР. Дифосфід TaP_2 отримали при 870 К (прост. група $C2/m$, $a=8,87000(2)$, $b=3,26700(2)$, $c=7,49700(3)$, $\beta=119,400(2)^\circ$).

У системах Та-(Ti, Cr, Mn)-Р, які досліджені нами у повному концентраційному інтервалі при 1070 К, та у системах Та-(Fe, Co, Ni)-Р отримали сполуки $\text{Ta}_{1-x}\text{M}'_x\text{P}_2$ структурного типу OsGe_2 , вміст 3d-металу в яких 0,03-0,05 мол. частки (табл.). Тому ці фосфіди можна вважати стабілізованою 3d- металом бінарною сполукою TaP_2 при 1070 К.

Таблиця. Тернарні фосфіди $\text{Ta}_{1-x}\text{M}'_x\text{P}_2$ структурного типу OsGe_2

Сполука	Періоди ґраток, Å			$\beta, ^\circ$
	a	b	c	
$\text{Ta}_{0,93(3)}\text{Ti}_{0,07(3)}\text{P}_2$	8,8556(9)	3,2654(4)	7,4846(8)	119,307(2)
$\text{Ta}_{0,91(2)}\text{Mn}_{0,09(2)}\text{P}_2$	8,8591(3)	3,2667(1)	7,4873(2)	119,310(1)
$\text{Ta}_{0,83(5)}\text{Fe}_{0,17(5)}\text{P}_2$	8,855(2)	3,2634(5)	7,482(1)	119,33(1)
$\text{Ta}_{0,82(4)}\text{Co}_{0,18(4)}\text{P}_2$	8,862(2)	3,2674(6)	7,486(2)	119,33(2)
$\text{Ta}_{0,91(1)}\text{Ni}_{0,09(1)}\text{P}_2$	8,85716(5)	3,26529(3)	7,48572(4)	119,310(1)

Позиція атома металу в структурі цих вищих фосфідів заповнена статистичною сумішшю Та/М' (М' – Ti, Cr, Mn, Fe, Co, Ni). Помітної області гомогенності сполуки не мають. У структурі сполук $\text{Ta}_{1-x}\text{M}'_x\text{P}_2$ атоми Фосфору мають більше координаційне число та більші поліедри, ніж атоми металу, яким властивий поліедр у формі тригональної призми з атомів Фосфору з центрованими боковими гранями. Тригональні призми з атомів металу сполучаються між собою по двох гранях у суцільні колони. Ці колони зміщені вздовж осі z на половину комірки (рис.).

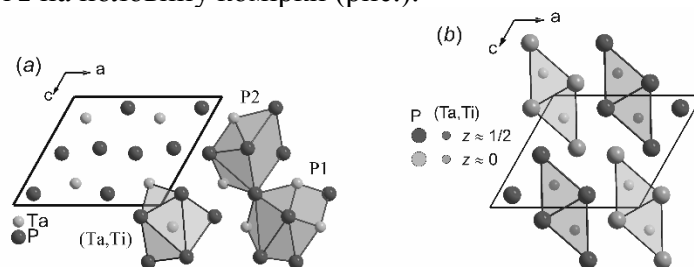


Рис. Проекція структури сполуки $\text{Ta}_{1-x}\text{Ti}_x\text{P}_2$ (СТ OsGe_2) на площину xz (ac) і координаційні поліедри атомів (а) та укладка тригональних призм атомів металу (б)

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ОЧИСТКА ВОЗДУХА ОТ ДИОКСИДА СЕРЫ МОНО- И БИМЕТАЛЛЬНЫМИ СИСТЕМАМИ НА ОСНОВЕ БЕНТОНИТА

Киосе Т. А.¹, Голубчик К. О.², Соколова Т. И.¹

¹Одесский национальный университет имени И. И. Мечникова

²Одесский национальный медицинский университет

kioresetatyana@gmail.com

Очистка воздуха от диоксида серы путем его окисления с помощью жидкофазных металлокомплексных систем активно изучалась. Поскольку применение жидкофазных систем в средствах индивидуальной защиты органов дыхания невозможно, для решения проблемы респираторной очистки воздуха от SO_2 возможна гетерогенизация металлокомплексных соединений и более сложных композиций путем их закрепления на твердых носителях, инертных или обладающих сорбционными свойствами в отношении этого токсиканта. В работе в качестве адсорбента диоксида серы и носителя в составе сложных хемосорбционно-каталитических композиций используется природный бентонит (П-Бент) Дашуковского месторождения Украины. Химически модифицированные образцы бентонита получали методом пропитки П-Бент по влагоемкости водными растворами CoCl_2 или CuCl_2 (монометалльные композиции), а

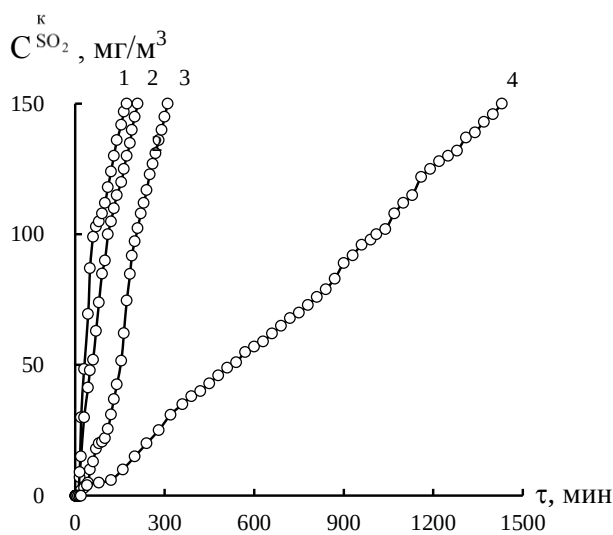


Рис. Изменение C^{SO_2} во времени в процессе хемосорбционно-каталитической очистки воздуха от SO_2 природным бентонитом (1) и композициями:

Cu(II)/П-Бент (2), Co(II)/П-Бент (3), $\text{Cu(II)-Co(II)/П-Бент}$ (4) $C_{\text{Cu(II)}} = C_{\text{Co(II)}} = 5,9 \cdot 10^{-5}$ моль/г;

$t = 20^\circ\text{C}$. $C^{\text{H}}_{\text{SO}_2} = 150$ мг/м³

также $\text{CuCl}_2 + \text{CoCl}_2$ (биметалльная композиция) при заданных концентрациях компонентов с последующей стадией «созревания» в течение 20 часов. Все образцы были протестированы в процессе очистки воздуха, содержащего, помимо диоксида серы, пары воды. Природный бентонит полностью поглощает диоксид серы в течение 10 минут, после чего концентрация SO_2 на выходе из реактора через 15 минут достигает предельно допустимой (ПДК = 10 мг/м³), а через 170 минут – начальной концентрации. Композиции $\text{CuCl}_2/\text{П-Бент}$ (2) и $\text{CoCl}_2/\text{П-Бент}$ (3) с очень низким содержанием солей демонстрируют аналогичную кинетику, однако время достижения ПДК увеличивается до 25 и 30 мин,

соответственно. Количество поглощенного SO_2 составляет для носителя $1,1 \cdot 10^{-4}$ моль SO_2 , а для вышеуказанных монометалльных композиций $1,6 \cdot 10^{-4}$ и $3,0 \cdot 10^{-4}$ моль SO_2 , соответственно. Для биметалльной композиции $\text{CuCl}_2\text{-CoCl}_2/\text{П-Бент}$ (4) увеличивается продолжительность участка, на котором происходит полное поглощение SO_2 (50 мин); время защитного действия возрастает до 90 мин, после чего C^{SO_2} медленно повышается до начальной концентрации, при этом количество вступившего в реакцию диоксида серы ($12,1 \cdot 10^{-4}$ моль SO_2) значительно превышает рассчитанное суммарное его количество для двух монометалльных систем, указывая на синергизм действия ионов Cu(II) и Co(II) при их совместном присутствии.

SILICA-SUPPORTED ERBIUM–YTTERBIUM NANOCOMPOSITES: THE STRUCTURAL AND MORPHOLOGICAL PROPERTIES

*Sulym I. Ya.*¹, Tomanová K.², Pálková H.³, Veteška P.², Borysenko M. V.¹, Janek M.^{2,4}

¹Chuiko Institute of Surface Chemistry, NAS of Ukraine,
17 General Naumov Str., Kyiv 03164, Ukraine

²Department of Inorganic Materials, Faculty of Chemical and Food Technology,
Slovak University of Technology, Radlinského 9, Bratislava 812 37, Slovak Republic

³Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9,
SK-842 36 Bratislava, Slovak Republic

⁴Comenius University, Faculty of Natural Sciences, Department of Physical and Theoretical
Chemistry, Mlynská dolina Ch-1, SK-842 15 Bratislava, Slovak Republic
irynasulym@ukr.net

In recent decades, the rare earth doped nanostructured materials have received great attention due to their potential applications in the fabrication area of sensors, laser materials, solar cells, and optical communication. From these reasons, microstructure and morphology of $\text{Er}_2\text{O}_3\text{--Yb}_2\text{O}_3$ mixed oxides supported on amorphous SiO_2 was studied by FTIR, XRD and SEM techniques. $\text{Er}_2\text{O}_3\text{--Yb}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ nanocomposites were prepared using a liquid-phase method. For the synthesis the water salt solutions of $\text{Er}(\text{NO}_3)_3$ and $\text{Yb}(\text{NO}_3)_3$ were added to 15 g fumed silica powder at room temperature (Evonik A-300; $S_{\text{BET}} = 300 \pm 30 \text{ m}^2/\text{g}$). The mixtures were stirred in the beaker using propeller stirrer for 0.5 hour. Water was removed from the mixtures in rotary evaporator. The solid produced was then dried and calcined at 550°C for 1 hour. The content of Er_2O_3 added varied from 0.5 to 10 wt. % while the content of Yb_2O_3 was held constant at 4 wt. %. The XRD patterns indicated that all samples remained amorphous after their heating at 550°C . The FTIR spectra for SiO_2 and $\text{Er}_2\text{O}_3\text{--Yb}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ shows the absorption bands that correspond to vibrations of physically adsorbed water as well as the bands including 1096 cm^{-1} of Si–O–Si asymmetric stretching vibration, 809 cm^{-1} of Si–O–Si stretching vibration. Only in the case of the initial SiO_2 , the narrow band at 3745 cm^{-1} representing the O–H stretching vibration of silanol groups present can be observed.

The surface morphology of the initial silica and nanocomposites can be seen at SEM images shown in the Fig.. The SEM images shows presence of rounded aggregates and/or spherical-like SiO_2 particles (Fig. a) varying in size between 40 and 180 nm (Fig. c). The aggregates size slightly decreases and more narrow size distribution after silica modification with $\text{Er}_2\text{O}_3\text{--Yb}_2\text{O}_3$ mixed oxides (Fig. b) can be observed. According to the histograms observed (Fig. c, d) the average sizes of nanoparticles present are in the range of 90 nm and 75 nm for SiO_2 , and $\text{Er}(\text{10})\text{Yb}(\text{4})\text{Si}(\text{86})$ samples, respectively.

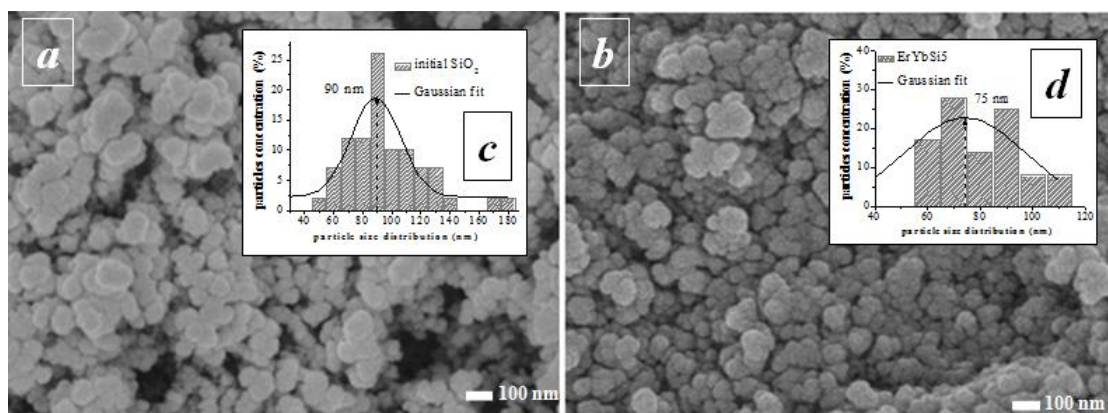


Fig. SEM images (a, b) and calculated particle size distribution using the software MEMO v.1.0.2. (c, d) for initial silica (a) and $\text{Er}(\text{10})\text{Yb}(\text{4})\text{Si}(\text{86})$ samples

Acknowledgement. This study was supported by the National Scholarship Programme of the Slovak Republic (Contract number 19862).

**НАНОКОМПОЗИТНІ ІОНОТРОННІ
СТРУКТУРИ, СФОРМОВАНІ НА ОСНОВІ 2D ШАРУВАТОГО
НАПІВПРОВІДНИКА InSe І ІОННОЇ СОЛІ RbNO₃**

Ткачук І. І.

Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАНУ, Чернівецьке
відділення, вул. І. Вільде, 5, Чернівці
chimsp@ukrpost.ua

Селенід індію є одним з найбільш перспективних 2D матеріалів. Структурно досконалі 2D кристали InSe характеризуються більш високими значеннями рухливості електронів ($>10^3 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$ при $T = 300 \text{ K}$) в порівнянні з іншими 2D матеріалами. В свою чергу нітрат рубідія має найвищу іонну провідність серед нітратів. Для цього матеріалу спостерігається серія фазових переходів в діапазоні температур 437–583 K, які супроводжуються різкими змінами іонної провідності. Тому саме ці матеріали є привабливими для створення даних структур.

Виготовлення наноккомпозитних іонотронних структур проводилось за наступною технологією. Розплавлена іонна сіль RbNO₃ впроваджувалась між шарами кристалів InSe при температурах 360 °C і 412 °C, час експозиції складав 12 хвилин. Значення температури вибиралися з врахуванням можливості протікання процесу окислення поверхонь шарів кристалу при їх взаємодії з розплавленою іонною сіллю. Відомо, що воно може мати місце як з участю розчиненого в іонних солях кисню, так і при термічному розкладанні солей. Термічне розкладання розплаву RbNO₃ на нітрити і нітрати має місце при нормальних умовах при температурах $>380 \text{ °C}$. Цей процес протікає згідно хімічній реакції $\text{RbNO}_3 = 2 \text{ RbNO}_2 + \text{O}_2 \uparrow$ і супроводжується бурним виділенням молекулярного кисню. Бінарний іонний наноккомпозит RbNO₃–RbNO₂, який формується при цьому, має значну іонну провідність. В наноккомпозитних структурах “InSe – іонна сіль” вона спостерігається навіть при зменшенні розмірів нанокристалів іонної солі до величини $\sim 0,35 \text{ нм}$ (ширини ван-дер-ваальсової щілини InSe).

Вперше досліджено зв'язок між морфологією, хімічним складом і фотоелектричними властивостями вертикальних іонотронних наноструктур, сформованих на основі шаруватого напівпровідника InSe і іонної солі RbNO₃. Встановлено, що максимальну фоточутливість мають наноструктури, які складаються з 2D шарів InSe, ультратонких шарів оксиду In₂O₃ і кільцевих наноструктур іонної солі, які розташовані в площинах (0001) кристалу InSe періодично вздовж його кристалічної вісі C. Вони можуть бути виготовлені за принципом формування ван-дер-ваальсівських гетероструктур шляхом самоорганізації при температурах, які перевищують значення температури розпаду іонної солі RbNO₃ на нітрити і нітрати рубідію. Необхідною умовою для досягнення високої фоточутливості в іонотронних структурах є створення іонного наноккомпозиту з високою іонною провідністю на гетерограницях між іонною сіллю і оксидом $n\text{-In}_2\text{O}_3$, який добре проводить електричний струм.

В рамках сучасної моделі формування таких твердих електролітів розглянуті процеси формування твердого електроліту на основі InSe і RbNO₃ на ван-дер-ваальсовій поверхні (0001) InSe. Показано, що при прикладанні до іонотронних структур вздовж вісі кристалу C постійної напруги, вибраної з інтервала (5÷10 В), в них спостерігається збільшення електричної ємності. Вона обумовлена електричним подвійним шаром, сформованим іонами Rb⁺ і електронами напівпровідника In₂O₃ на гетерограницях іонного наноккомпозиту.

**NOVEL COPPER(I) π -COMPLEXES WITH ALLYL DERIVATIVES
OF DISUBSTITUTED PSEUDOTHIOHYDANTOINS: SYNTHESIS,
CRYSTAL STRUCTURE AND NLO PROPERTIES**

Fedorchuk A. A.¹, Slyvka Yu. I.¹, Kityk I. V.², Mys'kiv M. G.¹

¹Department of Inorganic Chemistry, Ivan Franko National University of Lviv,
Kyryla i Mefodiya Str., 6, 79005, Lviv, Ukraine

²Institute of Optoelectronics and Measuring Systems, Faculty of Electrical Engineering,
Czestochowa University of Technology,
17 Armii Krajowej Str., 42-200 Czestochowa, Poland
fa95@i.ua

Using alternating current-electrochemical synthesis we have synthesized and studied by single crystal X-ray diffraction and IR-spectroscopy three novel Cu(I) π -complexes of the $[\text{Cu}_4(\text{dapt})_2\text{Cl}_4] \cdot 0.375(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH})$ (**1**), $[\text{Cu}_2(\text{papt})_2\text{Cl}_2]$ (**2**) and $[\text{Cu}(\text{papt})\text{NO}_3]$ (**3**) compositions (*dapt* – (2Z)-3-allyl-2-(allylimino)-1,3-thiazolidin-4-one, *papt* – (2Z)-2-(phenylimino)-3-allyl-1,3-thiazolidin-4-one).

The structure of compound **1** is built of dimeric tetranuclear $[\text{Cu}_4(\text{dapt})_2\text{Cl}_4]$ fragments and ethanol molecules, which are located on the three-fold inversion axis and partially fill voids in the crystal structure. Central part of $[\text{Cu}_4(\text{dapt})_2\text{Cl}_4]$ coordination dimer is formed by $\{\text{Cu}_4\text{Cl}_4\}$ cluster, in which Cu atoms are bonded by bridging Cl atoms. Ligand molecule in **1** acts as tridentate chelating ligand and plays a bridged role being bonded simultaneously to the both crystallographically independent Cu atoms.

Papt molecule in **2** and **3** acts as bidentate chelate π, σ -ligand, being coordinated to the metal center through the imino N atom and C=C double bond of allyl group being located at the basal plane positions of the Cu atom's trigonal-pyramidal environment. Cl^- anions in **2** as well as O atoms of NO_3^- in **3** occupy two remaining positions (one basal and one apical) of the metal coordination polyhedron. Due to the anions (Cl^- and NO_3^-) specificity, centrosymmetric dimeric $[\text{Cu}_2(\text{papt})_2\text{Cl}_2]$ fragments with central planar $\{\text{Cu}_2\text{Cl}_2\}$ moiety in **2** and polymeric structure **3**, built of the $[\text{Cu}(\text{papt})\text{NO}_3]_n$ chains, are formed.

For all three compounds nonlinear-optical properties (NLO) were measured, namely – second harmonic generation (SHG) and third harmonic generation (THG), using 7 ns pulsed Nd: YAG laser (1064 nm), pulse reception 10 Hz. Interferometer filters for spectral selection at 355 nm and 532 nm were applied. All the samples have shown promising nonlinear optical efficiencies achieved up to about 3 pm/V.

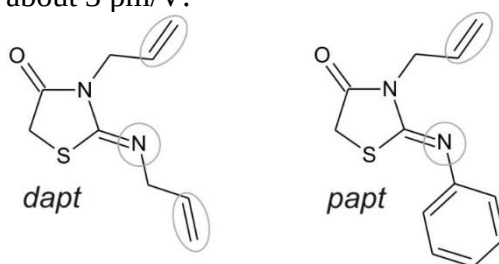


Fig. Ligand molecules with marked coordination sites

Table. Selected crystal data of **1–3**

№	Composition	Space group	Main Cu(I) fragment	Coordination type
1	$[\text{Cu}_4(\text{dapt})_2\text{Cl}_4] \cdot 0.375\text{EtOH}$	<i>R</i> -3	Tetranuclear dimer	σ, π
2	$[\text{Cu}_2(\text{papt})_2\text{Cl}_2]$	<i>P</i> 2 ₁ / <i>n</i>	Binuclear dimer	σ, π
3	$[\text{Cu}(\text{papt})\text{NO}_3]$	<i>P</i> 2 ₁ / <i>n</i>	Coordination chain	σ, π

SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE CHARACTERIZATION OF NOVEL COPPER(I) π -COMPLEXES WITH N-ALLYL-1,2,3-TRIAZOLE

Fedko A. M., Slyvka Yu. I., Mys'kiv M. G.

Ivan Franko National University of Lviv, Kyryla i Mefodiya 6, 79005 Lviv, Ukraine
af98@i.ua

1,2,3-Triazoles, being an important type of heterocyclic compounds, have a wide range of application in different spheres, in particular, they known as photostabilizers of polymers, optical brightening agents, corrosion inhibitors, dyestuffs. Due to their biological activity they find application in medicine as antibacterial, antiviral and anticancer agents. Moreover, due to triazole structure features they can mimic different functional groups, justifying their wide employment as bioisosteres. It was also investigated that triazole-based complexes with Cu(I) display NLO properties. Its exploration may be useful in the study of cancer progression mechanism which is accompanied with the change of copper(I) level in damaged tissues. Since a number of copper(I) π -complexes with benzotriazole allyl derivatives has been already studied, we present in this work firstly obtained Cu(I) π -compounds with allyl derivatives of monocyclic 1,2,3-triazole.

[Cu(C₅H₇N₃)Br] (**1**),
[Cu(C₅H₇N₃)₂CH₃C₆H₄SO₃] (**2**) and
[Cu(C₅H₇N₃)CF₃COO] (**3**) are novel π -complexes, which are obtained by means of an alternating current electrochemical technique starting from non-water solution of CuBr₂, Cu(CH₃C₆H₄SO₃)₂·xH₂O, Cu(CF₃COO)₂·xH₂O with the mixture of 1- and 2-allyl-1,2,3-triazole-1,2,3. The crystal structures of **1–3** (Table) were determined by means of single crystal X-ray diffraction. In all of the structures the crystallographically independent copper(I) atom with trigonal pyramidal environment is present. Isomer-selective complexation has been observed: in compounds **1** and **2** 1-N-allyl-1,2,3-triazole plays bridging role, but, in the complex **3** (Fig.) tridentate 2-N-allyl-1,2,3-triazole fully realizes its coordination abilities performing chelate-bridging π,σ -function. The structures of complexes **1–3** possess polymeric chains. Presence of Br[–] anion in **2** leads to doubling of infinite chains. These chains, in turn, are associated into 3D structure by non-valent weak interactions.

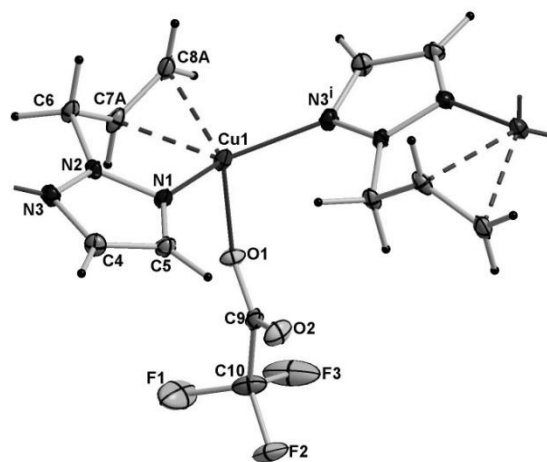


Fig. Fragment of crystal structure 3

Table. Selected crystal data for **1–3** π -compounds

No	Composition	Space group	V, Å ³	Z	Density g/cm ³	Coordination type
1	[Cu(L1)Br]	P-1	377,2(3)	2	2,224	σ, π
2	[Cu(L1) ₂ CH ₃ C ₆ H ₄ SO ₃]	P2 ₁ /c	1970,4(12)	4	1,527	σ, σ, π
3	[Cu(L2)CF ₃ COO]	P2 ₁ /n	964,8(6)	4	1,967	σ, π

It should be noted, that complex **2** is the first example of structurally characterized copper(I) *p*-toluenesulfonate π -complex.

**ОСОБЛИВОСТІ СИНТЕЗУ ТА БУДОВИ РІЗНОМЕТАЛЬНО-
РІЗНОЛІГАНДНИХ КОМПЛЕКСІВ ГЕРМАНІЮ(IV) ТА ДЕЯКИХ 3d-МЕТАЛІВ
З 1-ГІДРОКСІЕТИЛІДЕНДИФОСФОНОВОЮ КИСЛОТОЮ
ТА 1,10-ФЕНАНТРОЛІНОМ**

Хрїстова Н. М., Чебаненко О. А.

Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

khristova-nadiya@ukr.net

Координаційні сполуки германію(IV) на основі 1-гідроксіетилідендифосфонові кислоти (H_4Hedp) викликають особливий інтерес з точки зору їх застосування в медицині, сільському господарстві, мікробіології. Будова гомо- та гетерометалічних гідроксіетилідендифосфонатогерманатів вивчена достатньо повно: визначена структура (гексамернатаполімерно-ланцюгова) близько двох десятків сполук даного класу [1]. Мета даного дослідження: виділити продукти комплексоутворення в системах $\text{GeO}_2 - \text{H}_4\text{Hedp} - 1,10\text{-фенантролін (Phen)} - \text{CoCl}_2 (\text{CuCl}_2)$, встановити їх склад, структуру та вивчити властивості.

При синтезі сполук до суміші сухих наважок GeO_2 і H_4Hedp додавали певний об'єм води і нагрівали до кипіння. Отриманий розчин концентрували і охолоджували при кімнатній температурі (робочий розчин). Окремо готували спиртовий розчин, що містить суміш солі кобальту (комплекс I) або купруму (комплекс II) з Phen, який додавали до робочого розчину і перемішували. Через 2 доби з реакційного середовища випадали кристалічні осадки I і II, що містили монокристали.

Одержані сполуки є кристалічними, їх дифрактограми характеризуються індивідуальним набором міжплощинних відстаней, не містять рефлексів вихідних речовин та домішок. Згідно даним елементного аналізу, співвідношення елементів в сполуках I і II: $\text{Ge:P:Co:N} = 3:6:2:8$ і $\text{Ge:P:Cu:N} = 3:6:1:6$. Отже, в них реалізується різне мольне співвідношення $\text{Ge: Hedp: Co: Phen} = 3: 3: 2: 4$ і $\text{Ge: Hedp: Cu: Phen} = 3: 3: 1: 3$.

При інтерпретації ІЧ спектрів були виявлені смуги валентних коливань зв'язку P-O при ~ 1055 і $\sim 979 \text{ см}^{-1}$, що вказує на наявність в їх молекулах тільки повністю депротонованих груп PO_3^{2-} . В спектрах зафіксовані також смуги, відповідальні за коливання зв'язків германію з гідроксильними і фосфоновими групами $\delta(\text{GeOH})$, $\delta(\text{Ge-O}_{\text{фосф}})$ і d-металів з киснем і нітрогеном $\nu(\text{M-O})$, $\nu(\text{M-N})$. Смуги деформаційних коливань $\delta(\text{HOH})$ при 1630 см^{-1} вказують на наявність в обох комплексах молекул координованої води. Набір смуг в області характеристичних частот для гетероциклічних ароматичних молекул підтверджує присутність в їх складі 1,10-фенантроліна.

Встановлено, що одержані різнометально-різнолігандні комплекси належать до катіон-аніонного типу $[\{\text{Co(Phen)}_3\}_2\{\text{Co(Phen)(H}_2\text{O)}_4\}_2][\{\text{Ge}(\mu\text{-OH})(\mu\text{-Hedp})\}_6\text{Cl}_2]$ (I), $[\{\text{Cu(Phen)}_2(\text{H}_2\text{O})\}_2(\text{HPhen})_2][\{\text{Ge}(\mu\text{-OH})(\mu\text{-Hedp})\}_6\cdot 20\text{H}_2\text{O}]$ (II) ($\text{H}_4\text{Hedp} = 1\text{-гідроксіетилідендифосфонові кислота}$, Phen = 1,10-фенантролін). В них роль аніонів виконує $\{\{\text{Ge}(\mu\text{-OH})(\mu\text{-Hedp})\}_6\}^{6-}$ і два додаткових Cl^- у випадку структури I, а катіонів - $[\text{Co(Phen)}_3]^{2+}$, $[\text{Co(Phen)(H}_2\text{O)}_4]^{2+}$ в I і $[\text{Cu(Phen)}_2(\text{H}_2\text{O})]^{2+}$, HPhen^+ в II. В кристалах сполук I і II катіони, аніони і молекули води об'єднані численними міжмолекулярними водневими зв'язками, в результаті чого утворюється тривимірна сітка.

Відмінністю розглянутих координаційних сполук I і II від раніше вивчених гідроксіетилідендифосфонатогерманатів є формування складних супрамолекулярних ансамблів, що обумовлено введенням до їх складу 1,10-фенантроліна, здатного одночасно виконувати роль бідентатного хелатуючого ліганда і зовнішньосферного катіона в монопротонованій формі HPhen^+ .

1. Сейфуллина И.И., Марцинко Е.Э. Гомо- и гетерометаллические комплексонаты германия (IV) // Одеса: Фенікс, 2011. - 168 с.

ОДЕРЖАННЯ ПОДВІЙНИХ СИЛІКАТІВ ЗІ СТРУКТУРОЮ АПАТИТУ

Шульжук Б. В., Борисова К. В., Дремлюга А. В.

Донецький національний університет імені Василя Стуса

shulzhuk.b@donnu.edu.ua

У зв'язку з розвитком нових напрямків в сучасній техніці збільшився інтерес до матеріалів з особливими властивостями, які використовуються і можуть бути використані в якості паливних елементів, квантових генераторів, модуляторів світлового пучка, гідродинамічних перетворювачів, жаростійких матеріалів, що відрізняються високою оптичною активністю, механічною міцністю, стійкістю до дії високих температур, радіації, хімічних та інших середовищ. В орбіту подібних досліджень все більше залучаються рідкісноземельні елементи, сполуки на основі яких набувають певного наукового та практичного значення. Це можна сказати і про силікати рідкісноземельних елементів. У цьому класі сполук утворюються особливі гомологічні групи. Завдяки винятковому багатству кристалографічних форм і ряду унікальних властивостей ці сполуки особливо цінні для вчених, які працюють в області вивчення твердого тіла. Інтерес до подвійних силікатів рідкісноземельних елементів зі структурою апатиту викликаний широким спектром можливостей їх застосування. Завдяки високій кисневій провідності вони є перспективними кандидатами електролітів в твердооксидних паливних елементах, використовуються у якості каталізаторів, для створення люмінофорів і лазерів, матриць для поглинання актиноїдів, а також як біоматеріали.

Зразки $\text{Sm}_{9-x}\text{Nd}_x\text{Si}_6\text{O}_{25,5}$, де $x = 0, 2, 4, 6, 8, 9$ були синтезовані керамічним методом. Синтез зразків системи проводився при поступовому підвищенні температури. Прожарювання проводилося при температурах від 800 до 1200 °С. Зразки були досліджені методами рентгенофазового аналізу, скануючої електронної мікроскопії та інфрачервоної спектроскопії. При прожарюванні при 1200 °С на рентгенограмах зразків відсутні піки фази самарій і неодим силікатів із загальною формулою $\text{Ln}_2\text{Si}_2\text{O}_7$ ($\text{Ln} = \text{Sm}, \text{Nd}$). В результаті дослідження умов синтезу подвійних силікатів вдалося понизити температуру синтезу з 1700–1900 °С для силікатів лантанойдів зі структурою апатиту до 1200 °С для системи $\text{Sm}_{9-x}\text{Nd}_x\text{Si}_6\text{O}_{25,5}$.

**ORGANIC CHEMISTRY /
ОРГАНІЧНА ХІМІЯ**

**БИМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ КАТАЛИЗАТОРЫ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ Ag-Ni
ДЛЯ ОРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА***Абишева А. К., Турсунова Р. Т.*

Казахский национальный исследовательский технический университет
им. К. И. Сатпаева, г. Алматы, Казахстан
abishevaainur@mail.ru

В последние годы возрос интерес мировой науки, общественности и бизнеса к нанонауке. Особенно в последние годы приобретает огромный интерес синтез наночастиц металлов, разработка новых методов создания наночастиц и эффективных катализаторов на их основе. А использование биметаллических систем позволяет получать каталитические системы с уникальными физическими и химическими свойствами, которые нехарактерны для отдельных монометаллических систем, в результате проявления так называемого синергетического эффекта.

Нами была проведена серия опытов по получению биметаллических катализаторов на основе наночастиц Ag-Ni. В ходе работы был получен упомянутый комплекс методом восстановления. В качестве восстановителя был использован боргидрит натрия. В ходе исследования был выбран оптимальный стабилизирующий компонент – поливинилпирролидон. Путем варьирования условий реакции разработан оптимальный метод получения нанокатализатора в мягких условиях. Было установлено влияние на физико-химические свойства катализатора соотношения количества металла и стабилизирующего агента, молекулярной массы последнего, формы наночастиц.

Каталитическая активность наноразмерного биметаллического комплекса Ag-Ni была исследована на реакции гидрирования нитрофенола, в результате которой образуется один из важных компонентов, применяющийся в анилиноокрасочной, химико-фармацевтической промышленности, производстве гербицидов, пестицидов, бактерицидных и противомикробных препаратов – аминфенол.

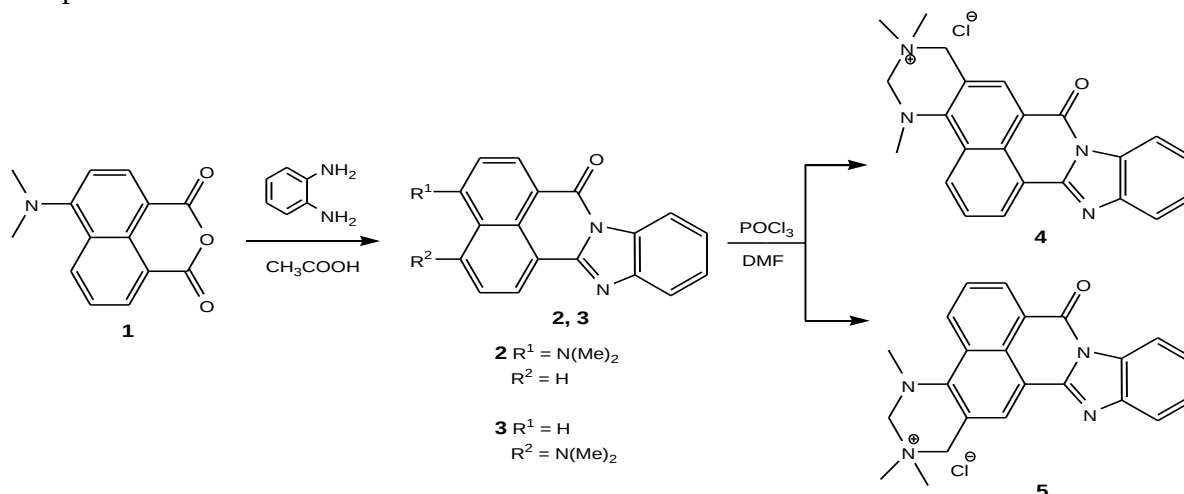
Полученные в ходе работы данные предоставляют возможность использования в реакции гидрирования нитрофенола нанокатализатора на основе частиц Ag-Ni и получать катализаторы селективного гидрирования широкого спектра непредельных соединений. Модифицирование полимерами дает возможность формировать катализаторы с однородными частицами активной фазы значительно снизить содержание дорогостоящих металлов, повысить их эффективность в низкотемпературных процессах.

WATER-SOLUBLE NAPHTHOYLENE-BENZIMIDAZOLE DERIVATIVES AND THEIR SPECTRAL PROPERTIES

Bohdan K. I., Semenova O. M., Yermolenko I. G.

SSI "Institute for Single Crystals" NASU, 61072, 60 Nauky Ave., Kharkiv, Ukraine
bohdan.kei@gmail.com

The Vilsmeier-Haack reaction was used to obtain water-soluble quaternary salts of naphthoylene-benzimidazole derivatives. Spectral properties of the products were studied and compared.



Condensation of 4-dimethylaminonaphthalic anhydride (1) and ortho-phenylenediamine in acetic acid results in a mixture of isomers **2** and **3** that contain benzimidazole moiety. The isomers were isolated and purified by column chromatography. Each of the dimethylamino derivatives **2** and **3** reacts with complex POCl_3 —DMF to form water-soluble products **4** and **5**, respectively, which contain quaternized 1,3-diazine cycle.

Spectral properties of dyes **2-5** were studied in toluene, methanol, and water. The position of dimethylamino group in compounds **2, 3** and 1,3-diazinium cycle in products **4, 5** greatly affects their spectral properties. Derivatives **2** and **4** absorb at 410–440 nm and emit light at 483–515 nm in methanol. Absorption and emission maxima of products **3** and **5** are red-shifted in comparison to dyes **2** and **4**, respectively. This effect is much more pronounced in emission spectra.

Positive solvatochromic (15 nm) and solvatofluorochromic (30 nm) effects were observed for compounds **2** and **3** when the solvent was changed from non-polar (toluene) to more polar (methanol). Due to their highly polar structure, the quantum yields of these products are dramatically decreased in methanol as compared to toluene solutions.

Introduction of the 1,3-diazinium cycle into compounds **2** and **3** leads to a blue-shift of the absorption and emission maxima by 20–30 nm. Fixation of the dimethylamino group with the diazine cycle formation in product **2** leads to a 56-fold increase of quantum yield in methanol.

Considering that compounds **2** and **3** exhibit significant Stokes shifts and bright fluorescence in a non-polar environment, they can be used as light shifters in polymeric matrixes. Water-soluble derivatives **4** and **5** can be further modified to include reactive groups for covalent labelling of biomolecules.

MULTIPLE NONCOVALENT BONDING IN HALOGEN COMPLEXES WITH OXYGEN TERTIARY AMIDES

Burakov N. I., Kanibolotsky A. L.

L. M. Litvinenko Institute of Physical Organic and Coal Chemistry NAS of Ukraine
n_burakov@ukr.net

The present work describes the structure and binding of adducts of N,N'-diacetylpiperazine with halogens and interhalogens based on combination of different experimental methods and quantum chemical calculations. On the basis of conductometric and spectro-photometric experimental results, behavior of complexes in the acetonitrile solution was described.

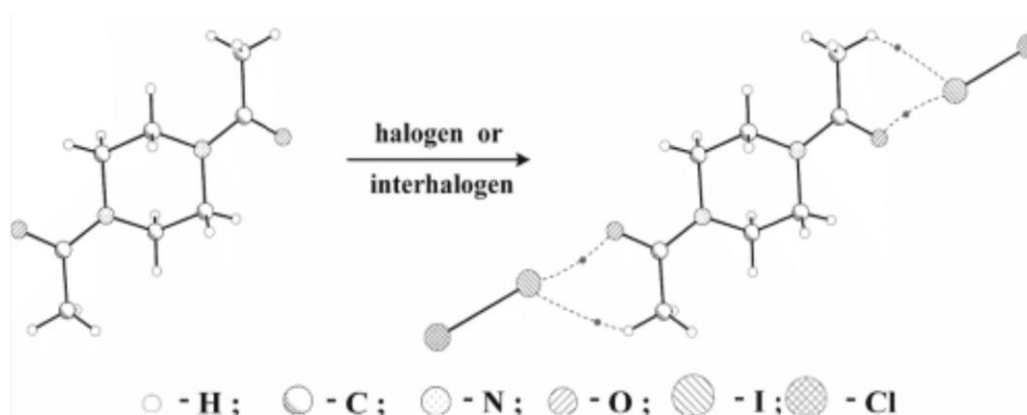


Fig. Formation of DAP...halogen adduct via simultaneous via $C=O \cdots I$ and $C-H \cdots I$ interactions

The iodine adduct with N,N'-diacetylpiperazine fully degrades into components. Adducts of interhalogens $I-X$ ($X = Cl$ or Br) with N,N'-diacetylpiperazine in acetonitrile partially dissociate to anionic $[X-I-X]^-$ and cationic species. In the solid state, molecules are connected via $C=O \cdots I$, $C-H \cdots I$, and $Cl \cdots Cl$ (or $Br \cdots Br$) attractive interactions. N,N'-diacetylpiperazine...dihalogen complex is stabilized by simultaneous $C=O \cdots I$ and $C-H \cdots I$ interactions. Such binding mode allows to explain the problems of the direct halogenation of acetyl-containing compounds with molecular halogens as reagents. We believe that the observed binding pattern can be used as prototypical for future design of halogeno complexes.

**DEVELOPMENT OF WAYS OF IMPROVING EFFECTIVENESS OF IZOPREN
PRODUCTION BY "DIOXANE" METHOD IN PRESENCE OF ZEOLITES
OF GROUP Si_xO_y**

Buranshina A. A.¹, Pasko P. A.¹, Vakulin I. V.¹, Talipova G. R.¹, Vakulina A. I.²

¹Bashkir state University, Ufa, Russia

²Ural State University of Economics, Yekaterinburg, Russia

buranshina_a@mail.ru

The possibility of increasing the selectivity of the formation of the 4,4-dimethyl-1,3-dioxane of Prins reaction, which is a key intermediate in the synthesis of isoprene by the "dioxane" method, has been studied using quantum chemistry and molecular dynamics.

We have considered the stabilization of the transition state (TS) of this reaction on zeolites of Si_xO_y composition with pores of different cross sections (Table, Fig.). It is shown that the TS stabilization of the formation of 1,3-dioxane becomes most advantageous on zeolites with pore sizes of 6.25–7.01, 7.24–7.59 Å. Obviously, in this case, the TS can most conveniently be placed inside the pore of the zeolite and stabilized by intermolecular interactions with the entire inner surface of the pore.

At a pore diameter of 6.8, 7.47 Å, the TS stabilizes only partly due to interaction with the zeolite surface. In the case of zeolites with a large pore diameter, intermolecular interactions can be performed with a fragment of the inner or outer surface of the pore.

Table. Dependence of the energy of adsorption of transition states on the pore diameter of zeolites, kJ/mol

Zeolite	d, Å	ethylene	propylene	buthene-1	isobuthylene	trans-2-buthene
MTF	6.25	136.68	158.88	171.88	130.45	174.724
VET	6.39	110.89	130.95	147.67	139.31	151.39
SFE	6.66	127.99	94.67	112.77	87.02	112.19
STO	6.8	78.04	73.73	74.82	66.37	68.8
ISV	7.01	108.13	125.56	144.62	146.63	138.14
IFR	7.24	118.29	131.37	154.45	150.68	152.73
CFI	7.47	93.59	112.9	129.91	132.25	132.92
SFF	7.59	114.78	137.52	158.79	155.95	158.54
STF	7.63	110.39	129.58	152.02	151.94	153.4
ITE	8.3	109.18	129.78	146.35	150.81	149.01

This type of TS stabilization indicates the possibility of increasing the selectivity of the formation of 1,3-dioxanes by the Prince reaction in the presence of zeolites with pore sizes of 6.25–7.01, 7.24–7.59 Å.

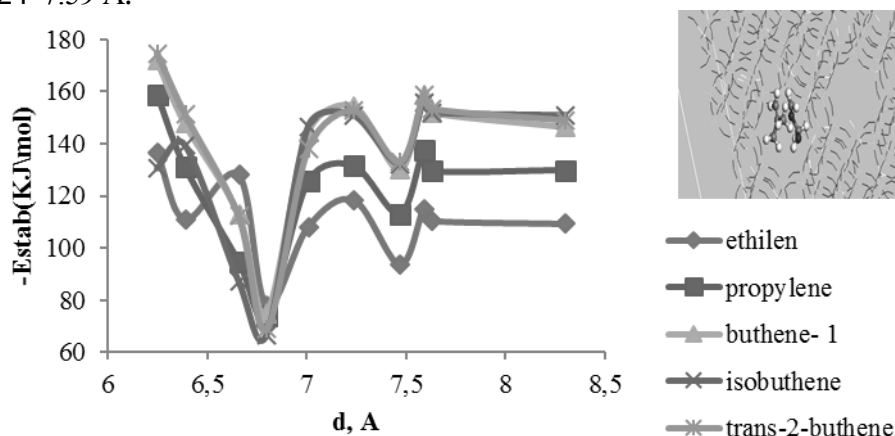


Fig. Stabilization of the transition state of the formation of 1,3-dioxanes in the presence of group zeolites Si_xO_y

Acknowledgements. This research is supported by the grant № 17-43-020754 of Russian Fund of Basic Researches.

**DEVELOPMENT OF WAYS TO INCREASE EFFICIENCY OF ISOPRENE
PRODUCTION BY "DIOXANE" METHOD IN PRESENCE OF ZEOLITES
OF GROUP OF $\text{Ca}_x[\text{H}_2\text{O}]_y\text{Al}_a\text{Si}_b\text{O}_c$**

Buranshina A. A.¹, Pasko P. A.¹, Vakulin I. V.¹, Talipova G. R.¹, Vakulina A. I.²

¹Bashkir state University, Ufa, Russia

²Ural State University of Economics, Yekaterinburg, Russia

buranshina_a@mail.ru

By the methods of quantum chemistry and molecular dynamics, the possibility of increasing the selectivity of the formation of the 4,4-dimethyl-1,3-dioxane by the Prins reaction, which is a key intermediate in the synthesis of isoprene by the "dioxane" method, has been studied.

We have considered the stabilization of the transition state (TS) of this reaction on zeolites $\text{Ca}_x[\text{H}_2\text{O}]_y\text{Al}_a\text{Si}_b\text{O}_c$ with pores of different sizes (Table, Fig.). It is shown that the stabilization of the TS of the reaction for the formation of 1,3-dioxane becomes most advantageous on the zeolites of the considered group with pore sizes of 6.04–7.37 Å. Obviously, in this case the TS can be placed inside the pore of the zeolite and stabilized by intermolecular interactions with the entire inner surface of the pore.

With a pore diameter of less than 6.04 Å, the TS is no longer able to fit inside and only partially stabilizes due to interaction with the zeolite surface. In the case of zeolites with a large pore diameter, intermolecular interactions can be carried out with a fragment of the inner or outer surface of the pore.

Table. The dependence of the adsorption energy of transition states on the pore diameter of zeolites, kJ/mol

Zeolite	d, Å	ethylene	propylene	buthene-1	isobuthylene	trans-2-buthene
PAR	4,21	12.3	15.4	17.2	16	16.9
GIS	4,97	12.9	14	14.7	15.5	15.3
EPI	5,47	20.9	22.8	25.6	20.3	22
LAU	6,04	33	36.1	27.7	26.1	26.4
LEV	7,1	29.3	34.5	38.5	38.5	35.7
CHA	7,37	26.2	30.7	33.8	34.4	34.4

This type of TS stabilization indicates the possibility of increasing the selectivity of the formation of 1,3-dioxanes by the Prins reaction in the presence of zeolites of the considered group with pore sizes from 6.04 to 7.37 Å. In the case of zeolites $\text{Ca}_x[\text{H}_2\text{O}]_y\text{Al}_a\text{Si}_b\text{O}_c$, as the reacting alkene increases (from C2 to C4 chain), the diameter also increases from 6.04 Å (ethylene and propylene) to 7.1 Å (alkenes C4).

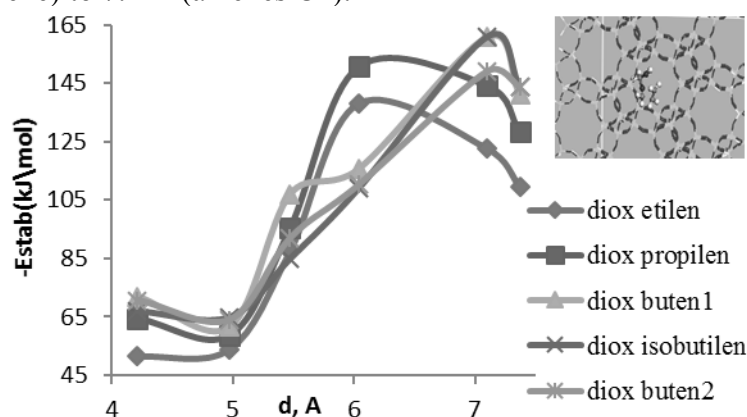


Fig. Stabilization of the transition state of the reaction of the formation of 1,3-dioxanes in the presence of group zeolites $\text{Ca}_x[\text{H}_2\text{O}]_y\text{Al}_a\text{Si}_b\text{O}_c$

Acknowledgements. This research is supported by the grant № 17-43-020754 of Russian Fund of Basic Researches.

DEVELOPMENT OF WAYS OF IMPROVING EFFECTIVENESS OF IZOPREN PRODUCTION BY "DIOXANE" METHOD IN PRESENCE OF ZEOLITES OF GROUP $\text{Na}^+_x(\text{H}_2\text{O})_y[\text{Al}_a\text{Si}_b\text{O}_c]$

Buranshina A. A.¹, Pasko P. A.¹, Vakulin I. V.¹, Talipova G. R.¹, Vakulina A. I.²

¹Bashkir state University, Ufa, Russia

²Ural State University of Economics, Yekaterinburg, Russia

buranshina_a@mail.ru

The possibility of increasing the selectivity of the formation of the 4,4-dimethyl-1,3-dioxane reaction of Prins reaction, which is a key intermediate in the synthesis of isoprene by the "dioxane" method, has been studied using quantum chemistry and molecular dynamics.

We have considered the stabilization of the transition state (TS) of this reaction on zeolites $\text{Na}^+_x(\text{H}_2\text{O})_y[\text{Al}_a\text{Si}_b\text{O}_c]$ with pores of different sections (Table, Fig.). It is shown that the TS stabilization of the formation of 1,3-dioxane becomes most advantageous on zeolites with pore sizes of 6.08–7.72 Å. Obviously, in this case the TS can be placed inside the pore of the zeolite and stabilized due to intermolecular interactions with the entire inner surface of the pore.

With a pore diameter of less than 6.08 Å, the TS is no longer able to fit inside and only partially stabilizes due to interaction with the zeolite surface. In the case of zeolites with a large pore diameter, intermolecular interactions can be carried out with a fragment of the inner or outer surface of the pore.

Table. The dependence of the adsorption energy of transition states on the pore diameter of zeolites, kJ/mol

Zeolite	d, Å	ethylene	propylene	buthene-1	isobutylene	trance-2-buthene
ANA	4.21	-11.8	-12.4	-13.3	-12.9	-16.5
NAT	4.52	-13.2	-13.9	-15.5	-15.2	-15
TON	5.71	-30.8	-21.1	-23	-21.1	-25.7
MTW	6.08	-29.2	-33.6	-38.6	-31.7	-37.1
LOS	6.36	-34	-40.8	-44.1	-45.5	-43.7
EUO	7.00	-32.1	-36.8	-41	-42.7	-40.9
MEL	7.72	-27.7	-32.6	-36.6	-36.3	-36.5
MEI	8.06	-24.9	-27.3	-30.4	-31	-30.4
KFI	10.67	-27	-28.9	-28.3	-29.3	-29.7

This type of TS stabilization indicates the possibility of increasing the selectivity of the formation of 1,3-dioxanes by the Prins reaction in the presence of zeolites with pore sizes from 6.08 to 7.72 Å.

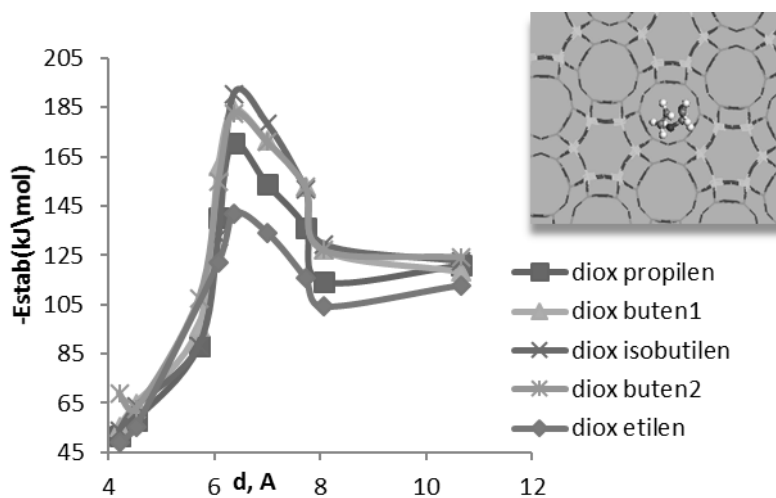


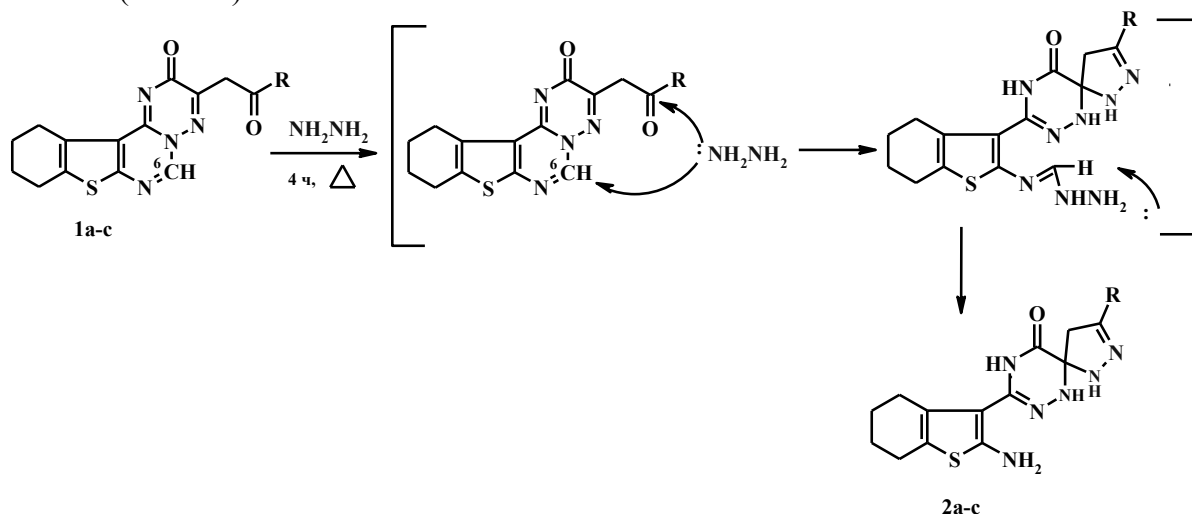
Fig. Stabilization of the transition state of the formation reaction of 1,3-dioxanes in the presence of group zeolites $\text{Na}^+_x(\text{H}_2\text{O})_y[\text{Al}_a\text{Si}_b\text{O}_c]$

Acknowledgements. This research is supported by the grant № 17-43-020754 of Russian Fund of Basic Researches.

СИНТЕЗ НОВЫХ СПИРОПРОИЗВОДНЫХ 2-АМИНО-БЕНЗОТИЕН-3-ИЛ-ОНОВ

Токарева С. В., Бусыгина М. В., Варениченко С. А., Марков В. И.
ГБУЗ «Украинский государственный химико-технологический университет»
maftuna.busygina@gmail.com

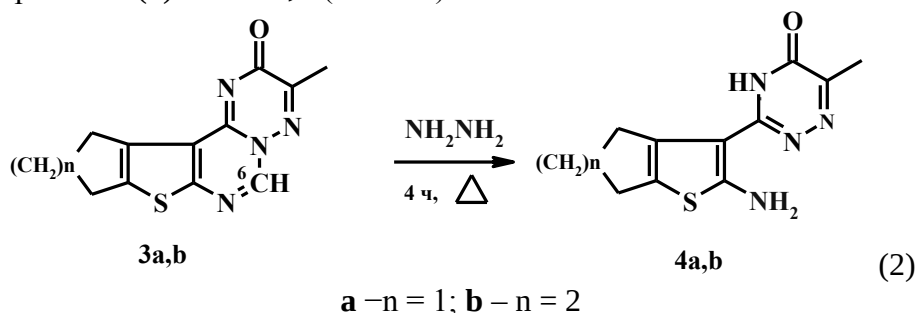
Многостадийные превращения в последнее время стали приоритетом развития современной органической химии. Хорошими объектами для изучения подобного рода превращений являются производные тиено[2,3-d]пиримидинов, благодаря наличию нескольких реакционных центров. В продолжения наших исследований^{1,2} реакционной способности производных тиено[2,3-d]пиримидинов было изучено взаимодействие с гидразином. В результате кипячения соединений **1a-c** с избытком гидразина в ДМФА получены amino производные бензотиен-1,2,6,7,9-пентазаспиро[4.5]дека-2,7-диеноны **2a-c** (схема 1).



(1)

a – R = C₆H₂(OCH₃)₃; **b** – R = 1H-инден-2-ил (95 %); **c** – R = 2-тієніл

Предполагаемая схема включает два возможных пути прохождения реакции – атака нуклеофила может идти по атому углерода экзоциклической карбонильной группы или по атому С-6 пиримидинового цикла. Дальнейшее изучение реакции было проведено на тиено[2,3-d]пиримидинах **3a,b**, в которых атака должна преимущественно идти по атому С6 пиримидинового цикла. В результате получены amino производные бензотиен-3-ил-1,2,4-триазин-5(4)-онов **4a,b** (схема 2).



(2)

1. K. Gajda, V. Astakhina, K. Ejsmont, D. Kolomietsev, S. Kovalenko, B. Zarychta // J. of Molecular Structure. – 2015. – 1083. – P. 137–143.

2. Д. О. Коломейцев, В. И. Марков, С. А. Варениченко, В. О. Астахина, С. И. Коваленко, А. В. Харченко, А. В. Мазепа // ХГС. – 2016. – Vol. 52, № 7. – P. 498–502.

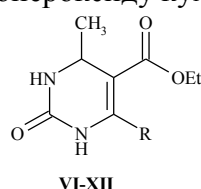
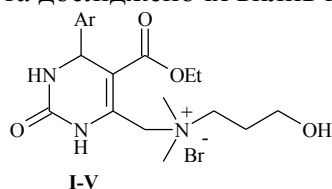
ПОХІДНІ 3,4-ДИГІДРОПІРИМІДИН-2-ОНУ ЯК ІНГІБІТОРИ РОЗКЛАДУ ГІДРОПЕРОКСИДУ КУМЕНУ

Бучковська О. С., Кошова Я. І., Єфтенєва Р. І., Лявинець О. С.

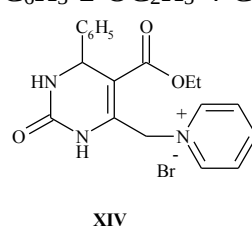
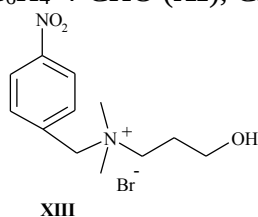
Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича
o.liavinets@chnu.edu.ua

Пошук нових типів ефективних антиоксидантів та вивчення механізму їх дії є важливим і актуальним завданням. Це зумовлено тим, що вони здатні сповільнювати або усувати небажані процеси вільно-радикального окиснення органічних речовин, утворення та перетворення пероксидних сполук. Однак висока токсичність багатьох фенольних та аміних антиоксидантів, недостатня ефективність, висока вартість є причинами їх обмеженого використання. Тому, незважаючи на широкий спектр уже відомих інгібіторів, пошук нових, ефективніших стабілізаторів окиснення продовжується. Перспективними у цьому плані виявилися похідні 3,4-дигідропіримідин-2-ону, які володіють широким спектром біологічної дії.

У даній роботі на основі реакції циклоконденсації Біджинеллі одержані сполуки, які відрізняються природою замісника у 4-ому та 6-ому положеннях дигідропіримідинонового циклу, та досліджено їх вплив на розклад гідропероксиду кумену (ГПК).



Ar = C₆H₅ (I), 4-Cl-C₆H₄ (II), 4-Br-C₆H₄ (III), 4-CH₃O-C₆H₄ (IV), 4-O₂N-C₆H₄ (V);
R = CH₃ (VI), CH₂Cl (VII), CH₂Br (VIII), CH₂I (IX), CH₂-O-C₆H₅ (X),
CH₂-O-C₆H₄-4-CHO (XI), CH₂-O-C₆H₃-2-OC₂H₅-4-CHO (XII).



Сполуки (I-V) з амонієм утворюють у 6-му положенні дигідропіримідинонового циклу володіють гальмівною дією щодо розкладу ГПК. Причому у випадку I-IV, які містять у 4-му положенні фенільний замісник (I) або фенільний замісник з орієнтантами I-го роду (II-IV), розклад ГПК сповільнюється приблизно в 1,5 рази, і не залежить від природи замісника. При використанні сполуки V розклад ГПК сповільнюється майже в 3,5 рази, тобто електроноакцепторні замісники посилюють гальмівну дію цих сполук. Дослідження сполуки XIII показало, що гальмування розкладу ГПК зумовлено наявністю позитивно зарядженого амонійного нітрогену, так і дигідропіримідинонового фрагменту в молекулах досліджуваних речовин. На основі дослідження сполуки XIV зроблено висновок, що природа четвертинного позитивно зарядженого атома нітрогену у структурі похідних 3,4-дигідропіримідин-2-ону не впливає на розклад ГПК. При дослідженні впливу сполук VI-XII на розклад ГПК встановлено, що введення в алкіларильний радикал у 6-му положенні дигідропіримідинонового циклу електроноакцепторних замісників посилює, а електронодонорних – послаблює їх гальмівну дію у даному процесі. Водночас за присутності сполуки IX розклад гідропероксиду кумену повністю гальмується. Помітний розклад ГПК спостерігається за концентрації сполуки IX 5,0·10⁻⁴ моль/л. Подальше зменшення концентрації IX призводить до підвищення швидкості розкладу.

ДОСЛІДЖЕННЯ РЕАКЦІЇ ОКИСНЕННЯ ЕТИЛБЕНЗЕНУ ТА ЙОГО ПОХІДНИХ ОЗОНОКИСНЕВОЮ СУМІШШЮ В ОЦТОВІЙ КИСЛОТІ

Бушувєв А. С., Скороход К. С.

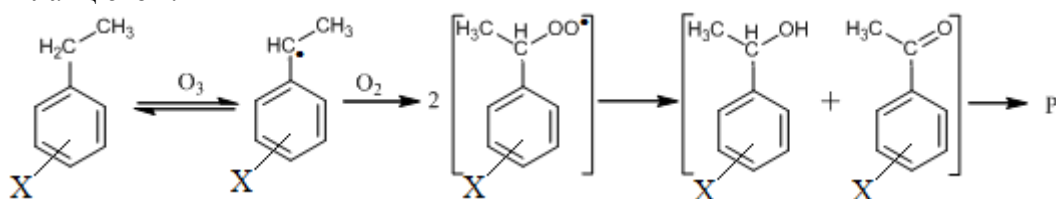
Інститут хімічних технологій Східноукраїнського національного університету
ім. Володимира Даля (м. Рубіжне)
bushuev@i.ua

Вважається, що озон у реакціях з алкілароматичними вуглеводнями, переважно, реагує за ароматичним кільцем тоді як окиснення за альфа вуглецевим атомом бічного ланцюга етилбензену в літературі майже не описано. Систематичне вивчення механізму реакції озонування його похідних, зокрема 4-нітроетилбензену взагалі не розглядалось. Тому, дослідження реакції озону з етилбенzenом (ЕБ) та 4-нітроетилбенzenом (4-НЕБ) з метою накопичення даних, необхідних для встановлення основних закономірностей процесу і розробки перспективної маловідходної технології отримання фенілметилкарбінолу (ФМК) та ацетофенону (АФ) а також нітро- заміщених даних сполук, є актуальною задачею.

Дослідження кінетичних особливостей реакції ЕБ та 4-НЕБ з озоном проводили в розчині крижаної оцтової кислоти при температурі 15 °C та атмосферному тиску. Було встановлено, що озоноліз бензенового кільця перебігає на 63 та 44 % відповідно. Вихід продуктів окиснення за альфа вуглецевим атомом етильної групи становить 34 % та 55 % при окисненні ЕБ та 4-НЕБ. За результатами експериментів було з'ясовано, що серед продуктів окиснення за етильною групою основним є відповідний кетон – АФ 25 % та 4-нітроацетофенон (4-НАФ) 50 %. Ароматичний спирт є проміжним продуктом, який при окисненні дає відповідний ароматичний кетон. Встановлено, що спирт і кетон накопичується паралельно на початкових стадіях. ФМК максимально накопичується з виходом 10 %, тоді як 4-нітрофенілметилкарбінол (4-НФМК) 4 %. В обох випадках спирт надалі окислюється до відповідного кетону майже з кількісним виходом 98 та 99 % відповідно.

З'ясовано, що в умовах дослідів ($[O_3]_0 = 5,2 \cdot 10^{-4}$; $[ArCH_2CH_3]_0 = 0,4$ моль $\cdot$ л $^{-1}$; об'єм реакційної маси 0,01 л; $T = 15$ °C) АФ та 4-НАФ також є проміжним продуктом реакції, проте очікуваної відповідної бензойної кислоти, котра утворюється при окисненні ЕБ та 4-НЕБ киснем повітря в реакційній масі знайдено не було. Було зафіксовано виділення CO_2 – 0,2 моль на 1 моль ЕБ, що в свою чергу може вказувати на можливе декарбоксилювання продуктів реакції.

Встановлено, що на відміну від окиснення ЕБ наявність електроноакцепторної нітрогрупи в пара-положенні ароматичного кільця призводить до підвищення стійкості бензенового кільця відносно дії озону і тим самим сприяє збільшенню виходу ароматичних продуктів у два рази. Це у свою чергу підтверджується встановленою ефективною константою швидкості в реакціях озонолізу ЕБ та 4-НЕБ. Так k_{ef} для ЕБ становить $0,4$ л $\cdot$ (моль $\cdot$ с) $^{-1}$ тоді як для 4-НЕБ k_{ef} є значно нижчою і становить $0,04$ л $\cdot$ (моль $\cdot$ с) $^{-1}$. Запропоновано наступну схему окиснення АФ і 4-НАФ озоном за бічним ланцюгом:



X – нітрогрупа в пара-положенні;

P – продукти окиснення і окисного декарбоксилювання карбонових кислот.

ВЗАЄМОДІЯ 2-АЦИЛАМІНО-3,3-ДИХЛОРОАКРИЛОНІТРИЛІВ З 5-АМІНОПІРАЗОЛАМИ

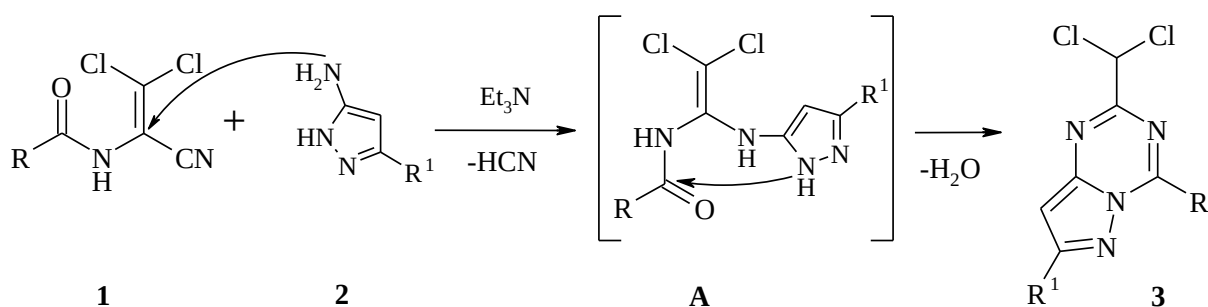
Велігіна Є. С., Абдурахманова Е. Р., Качаєва М. В., Пільо С. Г.

Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України

esma14617@gmail.com

Інтерес до вивчення нових азотовмісних гетероциклічних систем та пошуку нових типів таких сполук зумовлений тим, що вони володіють широким спектром біологічної активності, зокрема, протипухлинною, антибактеріальною, жарознижуючою, анагетичною, протизапальною тощо. В численних дослідженнях показана очевидна роль цих систем у виробництві ефективних лікарських засобів, барвників, пестицидів і т. д. Тому є доцільною розробка методів синтезу та перетворення нових гетероциклічних систем, вивчення їх хімічних та біологічних властивостей.

Попередні дослідження реакції 2-ациламіно-3,3-дихлороакрилонітрилів **1** з нуклеофілами показали, що в результаті їх взаємодії утворюються гетероциклічні продукти, серед яких знайдені біологічно активні речовини. Нашим завданням було розширити спектр таких сполук. Для реалізації поставленої задачі нами досліджено взаємодію енамідів **1** з бінуклеофілами **2** – похідними 5-амінопіразолу, що містять різні замісники в третьому положенні піразольного кільця.



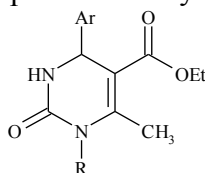
$\text{R} = \text{Me}, (\text{Me})_3\text{C}, \text{Ph}, 4\text{-MeC}_6\text{H}_4, 4\text{-ClC}_6\text{H}_4$; $\text{R}^1 = \text{Me}, \text{Ph}, 4\text{-MeC}_6\text{H}_4$.

В результаті реакції через проміжні продукти **A** були одержані нові конденсовані гетероциклічні сполуки **3** — заміщені 2-дихлорометилпіразоло[1,5-*a*][1,3,5]триазини. Будова синтезованих речовин доведена і підтверджена за допомогою елементного аналізу, ЯМР ^1H , ^{13}C та ІЧ-спектроскопії, мас-спектрометрії, а також рентгеноструктурного аналізу одного з продуктів реакції.

**ВПЛИВ ПОХІДНИХ 3,4-ДИГІДРОПІРИМІДИНОНУ
З КОНДЕНСОВАНИМИ АРОМАТИЧНИМИ ЗАМІСНИКАМИ
НА РОЗКЛАД ГІДРОПЕРОКСИДУ КУМЕНУ**

Вереща Б. Б., Крупич С. М., Єфтенєва Р. І., Лявинець О. С.
Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича
verbor96@gmail.com

Незважаючи на досить широкий спектр уже відомих антиоксидантів, пошук нових ефективніших і доступніших інгібіторів продовжується. Останнім часом увага дослідників зосереджена на вивченні антиоксидантних властивостей речовин, які містять декілька активних центрів з різним механізмом дії, тобто поліфункціональних інгібіторів. До них можна віднести похідні 3,4-дигідропіримідинону, які містять у 4-му положенні дигідропіримідинового циклу фенольне угруповання. Стабільні радикали також здатні утворювати сполуки, які містять конденсовані ароматичні ядра. Тому заслуговує на увагу дослідження антиоксидантних властивостей похідних 3,4-дигідропіримідинону, які містять у 4-му положенні дигідропіримідинового циклу конденсоване ароматичне угруповання, вплив яких на розклад гідропероксиду кумену (ГПК) вивчений у даній роботі. Використані наступні сполуки:



I-VI

де R = H; Ar = Ph (**I**), 4-аценафтил (**II**), 9-антраніл (**III**);
R = CH₃; Ar = Ph (**IV**), 4-аценафтил (**V**), 9-антраніл (**VI**).

Їх отримували трикомпонентною конденсацією Біджинеллі.

У присутності **I**, яка містить у 4-му положенні фенільний замісник, спостерігається деяке сповільнення розкладу ГПК. Оскільки фенільний радикал не володіє сповільнюючою дією, то це зумовлено впливом дигідропіримідинового циклу. При використанні **II** (аценафтильний замісник) спостерігається подальше сповільнення процесу. Дана сполука містить дві реакційно здатні метиленові групи, від яких відносно легко відривається атом гідрогену з утворенням стабільного радикала. У присутності **III** (антранільний замісник) розклад ГПК ще більше гальмується, що зумовлено утворенням стабільнішого радикала у 10-му положенні антраценового циклу. Отже, у сполуках **II** і **III** гальмуючою дією володіє і дигідропіримідиноний цикл, і конденсоване ароматичне угруповання. Сповільнююча дія досліджених сполук у реакції розкладу ГПК зменшується у такому ряду: **III** > **II** > **I**.

Далі вивчено вплив на розклад ГПК сполук **IV** – **VI**, у яких один атом гідрогену у сечовинному фрагменті дигідропіримідинового циклу заміщений на метильну групу. Встановлено, що наявність метильної групи у сечовинному фрагменті дигідропіримідинового циклу приводить до зниження гальмівної дії похідних 3,4-дигідропіримідинону. Найбільше це проявляється у випадку сполуки **VI** (антраніловий замісник), а найменше – у випадку сполуки **IV** (фенільний замісник). Таким чином, і в процесі розкладу ГПК дигідропіримідиноний цикл володіє сповільнюючою дією, мабуть, за рахунок гальмування індукованого розкладу гідропероксиду внаслідок утворення стабільніших радикалів.

Отже, похідні 3,4-дигідропіримідинону, які містять у 4-му положенні дигідропіримідинового циклу конденсовані ароматичні ядра, можуть бути перспективними антиоксидантними системами.

ОДЕРЖАННЯ ПЕГЕЛЬОВАНИХ АНТИБІОТИКІВ ДЛЯ ВЕТЕРИНАРІЇ

Винницька С. І.¹, Дронь І. А.¹, Германович С. Б.¹, Самарик В. Я.¹,

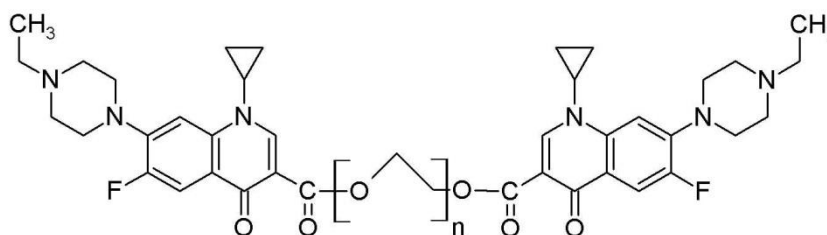
Ільков О. О.², Остапів Д. Д.²

¹Національний університет «Львівська політехніка»

²Інститут біології тварин НААН

kwito4ka12@gmail.com

Антибіотики у складі полімерних молекул володіють підвищеною здатністю до транспорту в клітину. У деяких випадках це вирішує проблему резистентності мікроорганізмів до антибіотиків. В даній роботі розроблено методику одержання пегельованого антибіотика. Об'єктом досліджень було обрано енрофлоксацин, представник групи фторхінолонів, що широко використовується у ветеринарії на сьогодні. Наявність у молекулі даного антибіотика реакційноздатної карбоксильної групи робить можливим проведення модифікації його структури з одержанням нових антибактеріальних препаратів. Важливим при такій модифікації є збереження бактерицидних властивостей препарату в залежності від методу модифікації та шляху її проведення. В ході створення методу одержання енрофлоксацину, модифікованого поліетиленгліколевыми ланцюгами розглядались наступні реакції: пряма естерифікація карбоксильних груп (реакція рефлюкс), естерифікація за реакцією Стегліха та одержання естерів через проміжне утворення хлорангідридів.



$$n = 4,5; 9; 13,5$$

У роботі показано, що найбільш придатним для одержання модифікованого енрофлоксацину є шлях через проміжне утворення його хлорангідриду в дві стадії. На першій стадії хлорангідрид енрофлоксацину одержували через його взаємодію з тіонілом хлористим в середовищі ДМФА при 50 °С, протягом 5 год. Друга стадія – одержання пегельованого антибіотика – в присутності триетиламіну, 70 °С, протягом 12 год. Чистота продукту за даними високоефективної рідинної хроматографії становить 98 % при загальному виході 70–85 %.

Вихід продукту при прямій естерифікації та за реакцією Стегліха не перевищував 20–25 %, з великою кількістю продуктів осмолення (у випадку рефлюкс) та продуктів перегрупування (у випадку реакції Стегліха), що не дозволило виділити продукти реакцій.

Антибактеріальну активність пегельованого антибіотика досліджували методом серійних розведень при інкубації дослідних проб при 37 протягом 22 і 44 годин. Кількість мікробних клітин (*Pseudomonas aeruginosa*) реєстрували за допомогою фотокалориметра. Встановлено, що антибактеріальна активність модифікованого енрофлоксацину в 8 разів вища у порівнянні з вихідним антибіотиком. Таким чином показано, що модифікація енрофлоксацину по вільній карбоксильній групі призводить до підвищення його антибактеріальних властивостей.

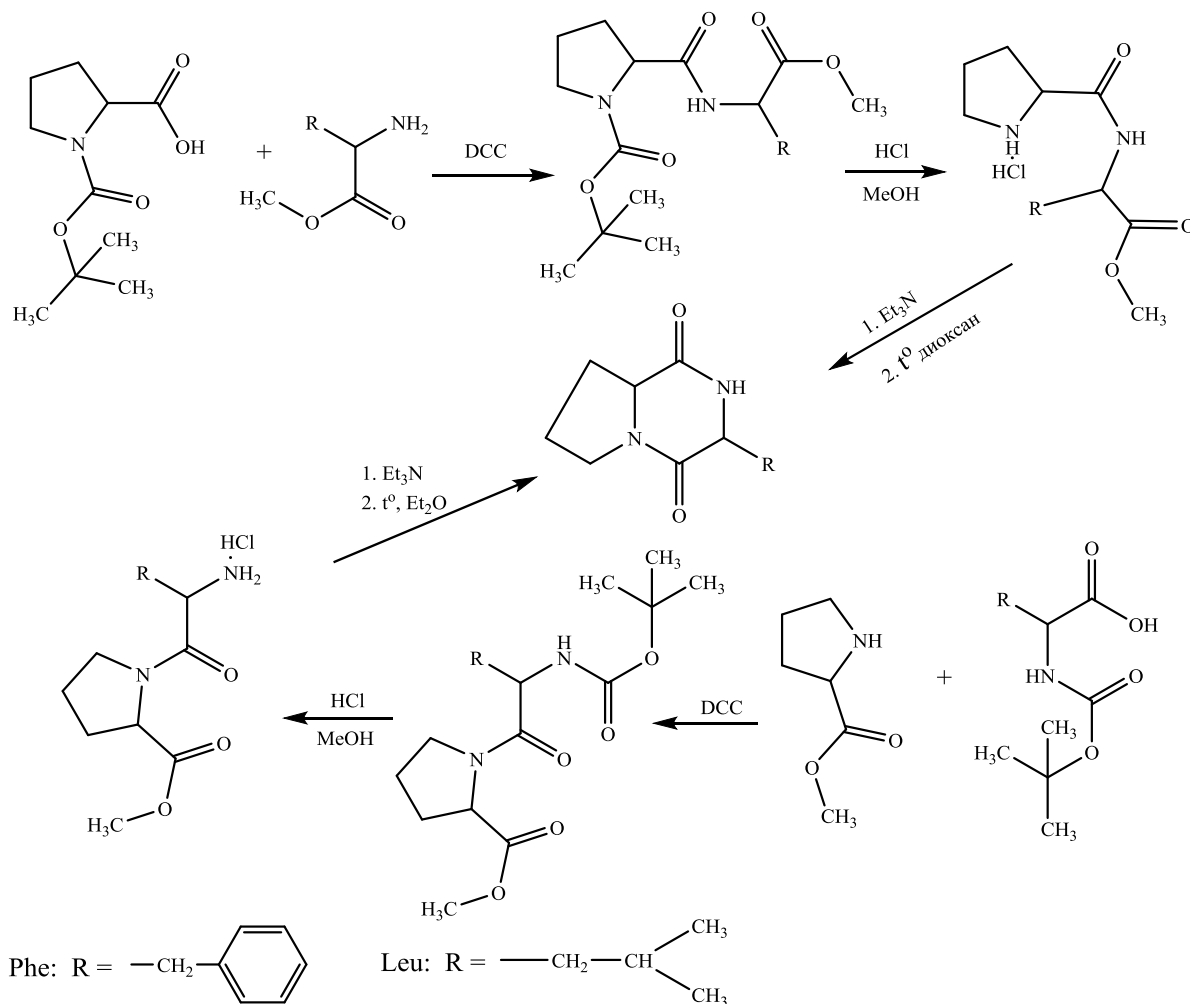
СИНТЕЗ 3-БЕНЗИЛГЕКСАГИДРОПИРРОЛО[1,2-*a*]ПИРАЗИН-1,4-ДИОНА И 3-ИЗОБУТИЛГЕКСАГИДРОПИРРОЛО[1,2-*a*]ПИРАЗИН-1,4-ДИОНА

Гайдукевич В. А., Попова Л. А., Книжников В. А.

Институт физико-органической химии Национальной академии наук Беларуси,
220072, Беларусь, г. Минск, ул. Сурганова, 13;
veronika_haidukevich@mail.ru

Циклические дипептиды (также известные как 2,5-дикетопиперазины), в т. ч. 3-бензилгексагидропирроло[1,2-*a*]пирозин-1,4-дион [(цикло(L-Pro-L-Phe))] и 3-изобутилгексагидропирроло[1,2-*a*]пирозин-1,4-дион [(цикло(L-Pro-L-Leu))], проявляют противоопухолевую, противовирусную и антигипергликемическую активность, действуют как противогрибковые и антибактериальные соединения и могут найти применение в медицине.

Для синтеза цикло-(L-Pro-L-Phe) мы использовали как гидрохлорид метилового эфира L-пролил-L-фенилаланина, так и гидрохлорид метилового эфира L-фенилаланил-L-пролина. Соответственно, для синтеза цикло-(L-Pro-L-Leu) – гидрохлорид метилового эфира L-пролил-L-лейцина и гидрохлорид метилового эфира L-лейцил-L-пролина.



Был сделан вывод, что путь получения цикло-(L-Pro-L-Phe) и цикло-(L-Pro-L-Leu), основанный на использовании в качестве исходных соединений метилового эфира пролина и *трет*-бутилоксикарбонилфенилаланина или *трет*-бутилоксикарбониллейцина, является более предпочтительным, так как позволяет избежать длительного нагрева в высококипящем растворителе на последней стадии синтеза.

**ВИКОРИСТАННЯ 1,2-БЕНЗОКСАТІЇН-4(3H)-ОН 2,2-ДІОКСИДУ
В ТРИКОМПОНЕНТНОМУ СИНТЕЗІ 2-АМІНО-4-R-4H-
ПІРАНО[3,2-С][1,2]БЕНЗОКСАТІЇН-3-КАРБОНІТРИЛ 5,5-ДІОКСИДІВ**

Григорів Г. В., Лега Д. О., Черних В. П., Шемчук Л. А.

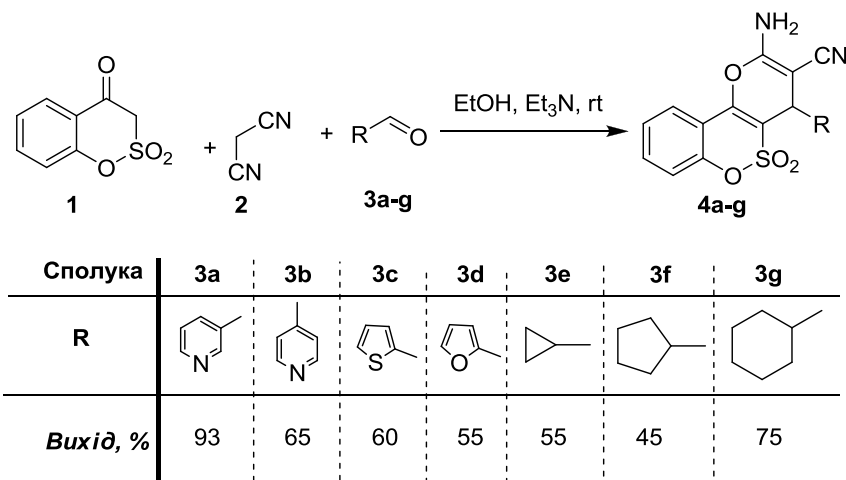
Національний фармацевтичний університет, Харків

galkagrigoriv@gmail.com

Гетероциклічна система 2-аміно-4H-пірану належить до перспективних базових структур, які можуть бути використані задля пошуку нових біологічно активних речовин. На даний час для похідних даного ряду сполук було встановлено зокрема такі різновиди біологічної активності, як протипухлинна, антибактеріальна та проти запальна. В синтезі похідних 2-аміно-4H-пірану широко застосовуються багатокомпонентні реакції. Подібний підхід є зручним та ефективним інструментом сучасної органічної хімії та дозволяє швидко синтезувати ряди нових сполук з метою подальших досліджень їх фармакологічних властивостей.

Так, для синтезу похідних 2-аміно-4H-пірану найчастіше використовується взаємодія енолнуклеofilів, метиленактивних нітрилів та карбонільних сполук, що належить до перетворень типу Кневенагеля/Міхаеля/*гетеро*-Торпа-Циглера. Поєднання у даній доміно-реакції вищезгаданих компонентів, які належать до різних класів органічних сполук забезпечує структурну різноманітність цільових 2-аміно-4H-піранів. Відповідно до даних літературних джерел у наведеній реакції як метиленактивні нітрили найчастіше застосовуються малонодинітрил та естери ціаноцтової кислоти. Карбонільні сполуки представлені переважно ароматичними альдегідами. Найрізноманітнішою є група енолнуклеofilів, що включає дикетони, кетоестери, ціанокетони, нітрокетони та інші типи сполук даного класу.

У даному дослідженні нами було використано новий енолнуклеofil – 1,2-бензоксатіїн-4(3H)-он 2,2-діоксид **1**, у вищезгаданому трикомпонентному підході до синтезу 2-аміно-4H-піранів. Як карбонільну компоненту було обрано гетероциклічні та аlicyclic альдегіди **3a-g**, які також мало досліджені у реакціях даного типу. Нами встановлено, що взаємодія сполук **1** та **3a-g** з малонодинітрилом **2** у середовищі етанолу в присутності каталітичної кількості триетиламіну при кімнатній температурі приводила до однозначного утворення нового структурного класу конденсованих гетероциклів – 2-аміно-4-R-4H-пірано[3,2-с][1,2]бензоксатіїн-3-карбонітрил 5,5-діоксидів **4a-g** із помірними та високими виходами. Одержані речовини не потребували подальшого очищення.



Структуру синтезованих сполук було підтверджено методом ^1H ЯМР спектроскопії та елементним аналізом.

АМІНОМЕТИЛЮВАННЯ УМБЕЛІФЕРОНУ ЗА УЧАСТЮ АМІНОСПИРТІВ

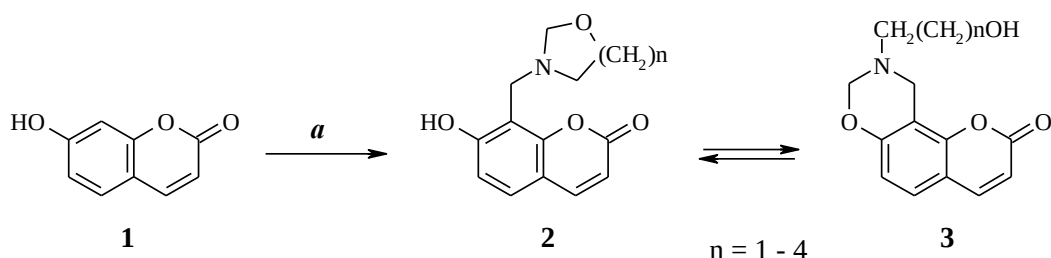
*Данильченко В. Є.¹, Фрасинюк М. С.², Бондаренко С. П.¹*¹Національний університет харчових технологій, Київ, Україна²Інститут біоорганічної хімії і нафтохімії НАН України

vladdanilchenkodune@gmail.com

Як відомо, амінометилування фенолів за участю аміноспиртів протікає неоднозначно і супроводжується утворенням різноманітних продуктів реакції, що залежить від умов проведення реакції та структури вихідних речовин. Метою даної роботи було вивчення взаємодії умбеліферону (7-гідроксикумарину) з 1,ω-аміноспиртами в умовах реакції Манніха.

Як виявилось, реакція Манніха за участю аміноетанолу та надлишку формаліну в пропанолі-2 в присутності каталітичної кількості 4-*N,N*-диметиламінопіридину (DMAP) супроводжується утворенням 7-гідрокси-8-(1,3-оксазолідин-3-ілметил)-2*H*-хромен-2-ону **2** та 9,10-дигідро-2*H*,8*H*-хромено[8,7-*e*][1,3]оксазин-2-ону **3**.

За допомогою ЯМР спектроскопічних методів підтверджено, що продукти **2** і **3** є рівноважними таутомерними формами.



a HOCH₂(CH₂)_nNH₂, CH₂O, *i*-PrOH, DMAP

Показано, що амінометилування умбеліферону **1** за участю 3-амінопропан-1-олу та формальдегіду протікає з утворенням переважно 2-(1,3-оксазинаніл)метильних похідних **2**. Разом з тим, у випадку 4-амінобутан-1-олу або 5-амінопентан-1-олу продуктом амінометилування був переважно таутомер **3**, а **2** – або утворювався в незначній кількості, або ж був відсутній.

Динамічна рівновага між таутомерами значною мірою залежить від розчинника. Так, в малополярному дейтерохлороформі спостерігається зсув рівноваги в сторону утворення таутомера **3**, а в розчині полярного дейтеродиметилсульфоксиду рівновага зміщується в сторону 1,3-оксазинової форми **2**.

Дослідження будови синтезованих сполук проводили спектроскопічними методами: ЯМР ¹H, ЯМР ¹³C, 2D-NOESY.

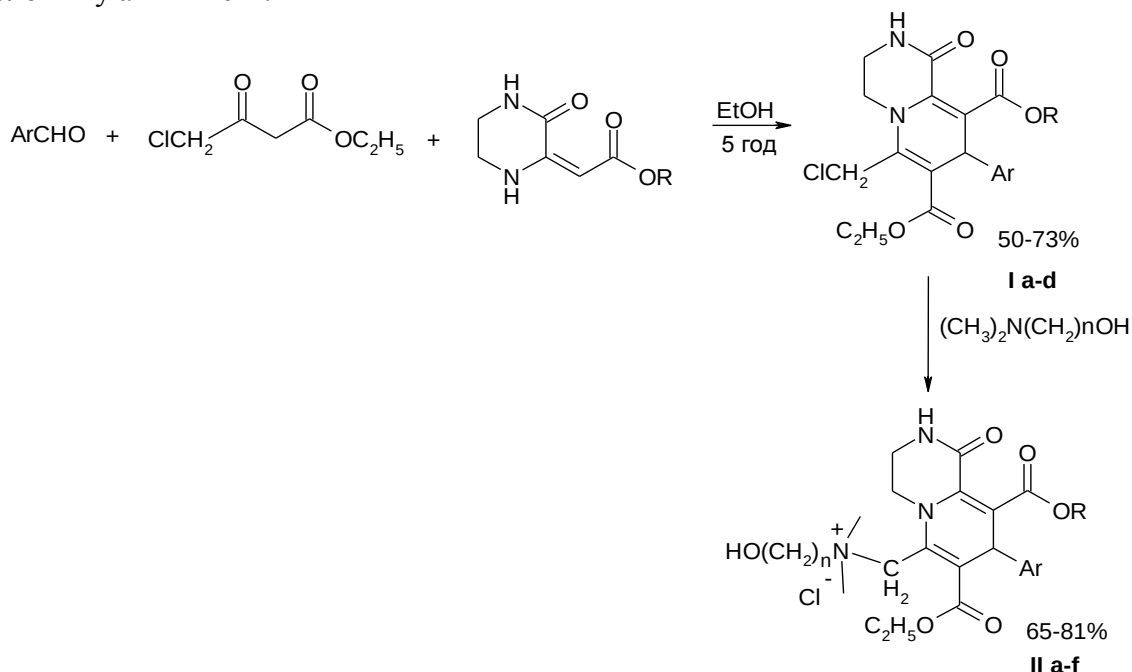
Поєднанням хімічних і спектроскопічних досліджень встановлено, що умбеліферон **1** в умовах реакції Манніха взаємодіє з аміноспиртами й надлишком формальдегіду з утворенням двох таутомерів **2** і **3**, рівновага між якими має динамічний характер. Показано, що співвідношення таутомерних форм визначається полярністю розчинника та структурою аміноспирту.

СИНТЕЗ НОВИХ ПОХІДНИХ ПІРИДО[1,2-а]ПІРАЗИНУ

*Дем'янюк В. В., Лучка С. П., Кушнір О. В.*Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, Чернівці
o.kushnir@chnu.edu.ua

Створення ефективних синтетичних методологій побудови біологічно привабливих систем із доступних реагентів є важливою проблемою сучасної органічної хімії. В більшості випадків такі системи належать до гетероциклічних сполук, подальший розвиток яких передбачає як розроблення оригінальних синтетичних підходів, так і з'ясування особливостей впливу структури на їх властивості. Серед конденсованих азотовмісних сполук особливо перспективними для фармакологічних досліджень є поліфункціонально заміщені піридо[1,2-а]піразини. Зокрема, один із їх представників 9-гідрокси-3-метокси-6Н-піридо[1,2-а]піразин-6-он є новим алкалоїдом названий *xylogranatinin*, який був ізольований з плодів гранату *Chines mangrove Xylocarpus*. Окрім цього, сполуки такого типу проявляють антиконвульсантну, антигіпертензивну та антидепресантну дію. Загалом, свідченням особливої значимості піридопіразинових сполук для медицини є нещодавно розроблені на їх основі лікарські препарати для лікування вірусу імунодефіциту людини (HIV) – Dolutegravir та Cabotegravir.

В поданій роботі нами запропонована нова трикомпонентна реакція, за участю ароматичних альдегідів, 4-хлорацетооцтового естеру і 3-алкоксиметиліденпіперазин-2-ону, як простий та доступний метод синтезу нового типу функціоналізованих піридо[1,2-а]піразинів **1a-d**. В подальшому синтезовані піридо[1,2-а]піразини **1a-d** вводили в реакцію кватернізації з 2-диметиламіноетанолом або 3-диметиламінопропанолом-1, з одержанням сполук **2a-f**, що дало змогу значно підвищити їх розчинність у воді та водно-органічних розчинниках, та може розширити спектр досліджень такого типу сполук на біологічну активність.



R = CH₃, C₂H₅; Ar = 4-ClC₆H₄, 3-NO₂C₆H₄, 4-NO₂C₆H₄; n = 2-3.

Індивідуальність та склад всіх отриманих сполук доведені результатами хромато-мас-спектрометрії та елементного аналізу, а будова ІЧ-, ЯМР ¹H та ¹³C спектроскопією.

ПОХІДНІ ТРИФТОРОПІРИМІДИН-2-ОНУ ЯК ІНГІБІТОРИ ВІЛЬНОРАДИКАЛЬНИХ РЕАКЦІЙ

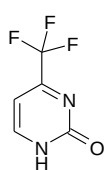
Єфтенська Р. І.¹, Гаврилик О. П.¹, Романенко Х. В.¹, Лявинець О. С.¹, Вовк М. В.²

¹Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича

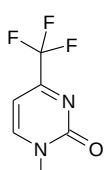
²Інститут органічної хімії НАН України

o.liavinets@chnu.edu.ua

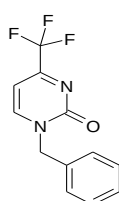
Похідні 3,4-дигідропіримідин-2-ону є потенційними інгібіторами вільно-радикальних реакцій. Як можливі антиоксиданти викликають інтерес і похідні піримідин-2-ону з електороноакцепторними замісниками у гетероциклі. За рахунок лактамно-лактимної таутомерії вони утворюють похідні гідроксипіримідину, які можуть генерувати стабільні вільні радикали. Тому досліджено газометричним методом антиоксидантні властивості таких похідних трифторопіримідин-2-ону:



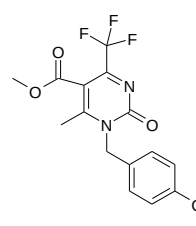
I



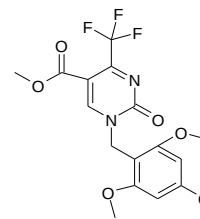
II



III



IV



V

Як модельна використана реакція ініційованого окиснення кумену. Результати дослідження наведені в таблиці.

Таблиця. Результати ініційованого окиснення кумену в присутності сполук **I-V**

$T = 353 \text{ K}$, $[AIBN] = 1 \cdot 10^{-2} \text{ моль/л}$

№	Речовина	$C \cdot 10^3$, моль/л	Швидкість поглинання кисню, $W(O_2) \cdot 10^2$, мл/хв
1.	Без добавки	-	39,7
	I	1,0 2,0 5,0	40,4 15,0 4,0
	II	1,0 2,0 5,0	41,7 40,8 20,9
2.	III	1,0 2,0	Впродовж 60 хвилин досліду кисень не поглинався
3.	IV	1,0 2,0 5,0	19,4 22,1 20,7
4.	V	1,0 2,0 5,0	18,9 16,6 19,1

Найвищу ефективність як інгібітор вільнорадикальних реакцій виявляє сполука **III**. Це зумовлено утворенням стабільного проміжного радикала, який не здатний до продовження ланцюга окиснення. Уведення метоксигруп в ядро бензильного замісника у 1-му положенні піримідинового циклу приводить до зниження антиоксидантної здатності сполук **IV** і **V** за рахунок зміни термодинамічної та кінетичної стабільності проміжних вільних радикалів. Сполуки **IV** і **V** гальмують ініційоване окиснення кумену приблизно удвічі незалежно від їх концентрації. Досить ефективним антиоксидантом є сполука **I**, яка за концентрації $5 \cdot 10^{-3}$ моль/л сповільнює ініційоване окиснення кумену майже на порядок. Сполука **II** сповільнює окиснення кумену тільки за концентрації $5 \cdot 10^{-3}$ моль/л. За нижчих концентрацій вона не впливає на швидкість окиснення. Це зумовлено неможливістю перебігу лактамно-лактимної таутомерії з утворенням похідних гідроксипіримідину.

МЕТОДЫ СИНТЕЗА ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ИЗОМЕРОВ

N,N'-ДИМЕТИЛГЛИКОЛУРИЛА

Жаксыбаева А. Г.¹, Кушербаева В. Р.², Бакибаев А. А.², Ташенов А. К.¹¹Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева, Астана, Казахстан²Национальный Исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

Zhaksy_92@mail.ru

Химия гетероциклических соединений является одним из передовых разделов современной химии. Особый интерес представляют гликолурилы и их производные благодаря наличию биологических свойств. Гликолурил впервые получен Шифом в 1877. Синтез включает в себя катализируемую кислотой конденсацию одного моля глиоксаля с двумя молями мочевины.

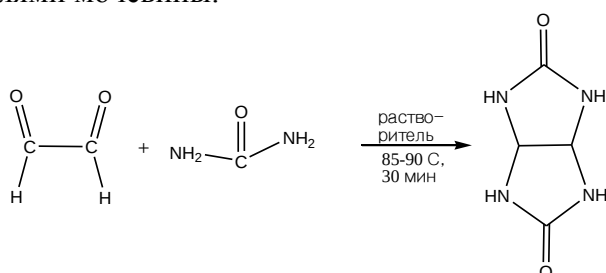


Рис. 1. Реакция синтеза гликолурила

Также гликолурилы можно получить α-уреидоалкилированием мочевины с участием ДГИ.

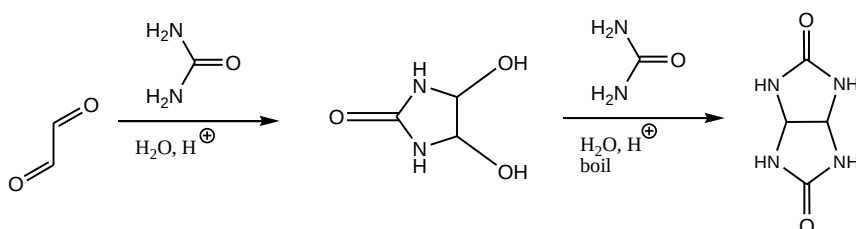


Рис. 2. Реакция синтеза гликолурила

Изомеры диметилгликолурила можно получать синтезом из метилмочевины и глиоксаля.

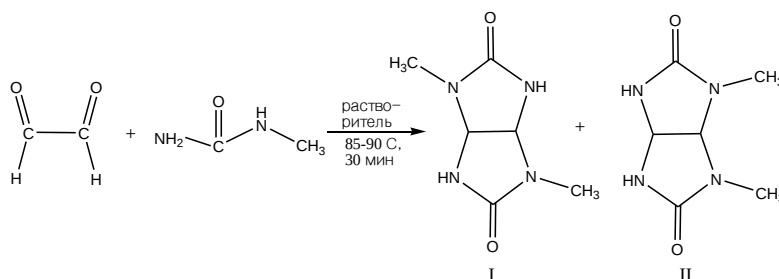


Рис. 3. Реакция синтеза диметилгликолурилов

N-алкил производные гликолурила находят применение во многих областях науки. Так, среди них найдены препараты, нашедшие применения в качестве транквилизаторов. Это свойство является основным фактором, оказывающим интерес для дальнейшего изучения.

СИНТЕЗ КОНФОРМАЦІЙНО ОБМЕЖЕНИХ НАСИЧЕНИХ АМІНОСУЛЬФОХЛОРИДІВ

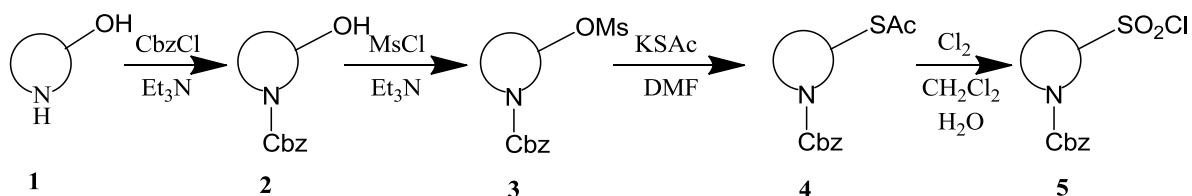
Жерш С. А.^{1,2}, Григоренко О. О.^{1,2}, Толмачов А. О.^{1,2}

¹ТОВ НВП «Єнамін»

²Київський національний університет імені Тараса Шевченка
zhersh@ukr.net

Сульфамідні похідні широко використовуються в медицині з моменту відкриття в 1935 році антимікробних властивостей амідів сульфанілової кислоти. На даний момент більшість сульфамідних лікарських препаратів синтезовані на основі ароматичних сульфохлоридів. В той же час широко використовуються сполуки, які є похідними, або ізостерними таурину – природної аліфатичної сульфоїкислоти. Синтез таких похідних зазвичай пов'язаний з хімічною модифікацією аліфатичних сульфоїкислот, в тому числі з використанням токсичних реагентів типу фосгену.

В рамках даної роботи було синтезовано низку конформаційно обмежених захищених аміносульфохлоридів на базі 4, 5 і 6-членних циклічних аміноспиртів за наступною схемою:



Перехід від спиртів **1** до захищених мезилатів **3** зазвичай проходив з високими, близькими до кількісних, виходами. Нуклеофільне заміщення у **3** з використанням SAc^- також в більшості випадків проходило з доволі високими виходами, за винятком похідної 3-піперидинолу, де йшла конкурентна реакція елімінування. Після хлорування продуктів **4** були отримані відповідні N-захищені сульфохлориди **5**, які завдяки використанню Cbz захисту є стабільні при звичайних умовах.

Також було перевірено масштабування методу в молярній кількості на основі 2-пролінолу і отримано відповідний сульфохлорид з сумарним виходом на чотирьох стадіях 41 %. Це показує можливість використання даного методу для синтезу сульфохлоридів на основі аміноспиртів в багатogramових кількостях.

СИНТЕЗ 2-АМІНОАЛКІЛІМІДАЗОЛІВ НА ОСНОВІ АМІНОАЛЬДЕГІДІВ

Журавель І. О.¹, *Завада О. О.*²¹Харківська медична академія післядипломної освіти, Харків²Харківський національний медичний університет, Харків
o.o.zavada@ukr.net

Проведений аналіз літературних даних свідчить про доцільність пошуку нових низькомолекулярних біорегуляторів в ряду аналогів та продуктів модифікації гістаміну – медіатору багатьох життєво важливих процесів в організмі людини. Цікавими та перспективними об'єктами таких досліджень цілком обґрунтовано можуть стати різноманітні похідні аміноалкілімідазолів.

Найбільш досліджений серед природних неконденсованих похідних імідазолу біогенний амін гістамін – (4-(2-аміноетил)імідазол. Синтетичні ж похідні аналоги ізогістаміну (2-(2-аміноетил)імідазолу) на сьогодні менш вивчені, що пов'язано з відсутністю зручних та ефективних методів їх синтезу.

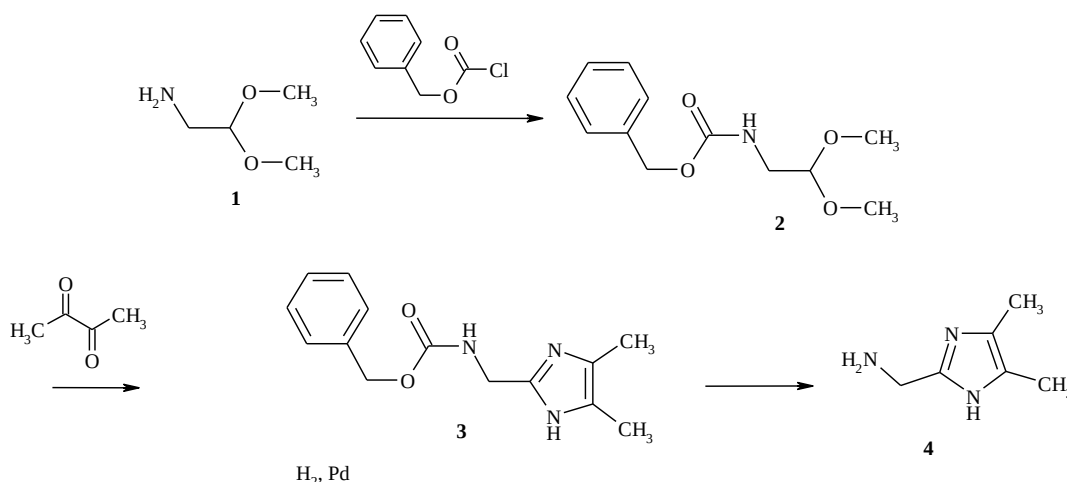
Цей факт спонукав нас проаналізувати та запропонувати ряд ефективних синтетичних підходів до одержання 2-(α,β,ω -аміноалкіл)імідазолів як об'єктів для фармакологічних досліджень або напівпродуктів для подальшої хімічної модифікації.

Перша спроба синтезу ізогістаміну (2-аміноетилімідазолу) була здійснена на основі 2-меркаптоімідазолу. На сьогоднішній день також відомі стратегії синтезу аміноалкілімідазолів, які включають побудову імідазольного фрагменту на основі низки лінійних карбонільних сполук – похідних аміноальдегідів та амінокислот.

Широкі препаративні можливості щодо варіювання аміноалкілним замісником в положенні 2 надають методи синтезу заміщеного імідазолу, що базуються на взаємодії амінокарбонільних сполук з 1,2-дикарбонільними реагентами в присутності амоніаку.

Нами досліджена циклізація бутандіону-2,3 з диметилацеталем амінооцтового альдегіду з захищеною аміногрупою **2**, яка відбувається з утворенням 2-амінометил-4,5-диметилімідазолу **4** і не потребує додаткового гідролізу ацетальної групи (схема).

Схема



¹H ЯМР-спектр напівпродукту **3** містить сигнали протонів двох метильних замісників імідазольного циклу (δ 2.02 м.ч., с., 6H), що підтверджує факт циклізації, і заміщеної амідної групи (δ 5.75 м.ч., уш.с., 1H). Захисну групу видаляли відновленням продукту на каталізаторі (Pd/C).

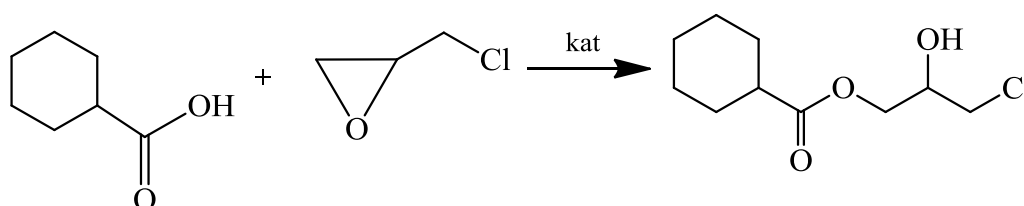
Таким чином, запропоновано синтез 4,5-заміщених 2-аміноалкілімідазолів здійснювати за реакцією аміноальдегідів з 1,2-дикарбонільними сполуками.

КАТАЛІТИЧНИЙ АЦИДОЛІЗ ЕПІХЛОРГІДРИНУ АЛІФАТИЧНИМИ ЦИКЛІЧНИМИ КАРБОНОВИМИ КИСЛОТАМИ

Завидовський О. І., Калінський О. М., Швед О. М.
Донецький національний університет імені Василя Стуса
zavidovskiy.o@donnu.edu.ua

Оксиран та його похідні мають високу реакційну здатність. Взаємодія оксиранів з карбонowymi кислотами використовується для отримання епоксидних композицій, полімерних матеріалів, які мають високі експлуатаційні показники та мають широкий спектр застосування (медицина, електроніка, будівництво). Цілеспрямований синтез епоксидних сполук із заданими властивостями потребує дослідження кінетичних та термодинамічних характеристик процесу.

Метою даної роботи є вивчення кінетичних закономірностей каталітичного ацидолізу реакції епіхлоргідрину (хлорметилоксирану) з циклогексанкарбонowoю кислотою:



Об'єктами дослідження обрано карбонowoю кислоту циклічної будови, що дозволяє проаналізувати вплив стеричного фактору на перебіг реакції. Каталізатором обрано амонієву сіль – тетрабутиламоній йодид. Реакцію проводили при температурі 60 °С в надлишку епіхлоргідрину, який виступає субстратом та розчинником одночасно. Перебіг процесу контролювали по зміні концентрації кислоти рН-потенціометричним титруванням.

За результатами проведених досліджень встановлено порядок реакції за циклогексанкарбонowoю кислотою при різних концентраціях кислотного реагенту і каталізатора. Оцінено вплив концентрації кислотного реагенту і каталізатора на швидкість ацидолізу епіхлоргідрину. На основі отриманих даних запропоновано кінетичне рівняння швидкості реакції, зроблено висновки щодо впливу будови карбонowych кислот, зокрема стеричного чинника, на їх реакційну здатність як нуклеофільних реагентів в реакції розкриття оксиранового циклу епіхлоргідрину.

СИНТЕЗ ЗАМІЩЕНИХ ПІРАЗОЛІВ РЕЦИКЛІЗАЦІЮ ПОХІДНИХ 4-Н-ХРОМЕН-4-ІМІНІВ

Загорулько С. П.¹, Павлова С. Є.¹, Фарат О. К.², Варениченко С. А.¹, Марков В. І.¹

¹ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»

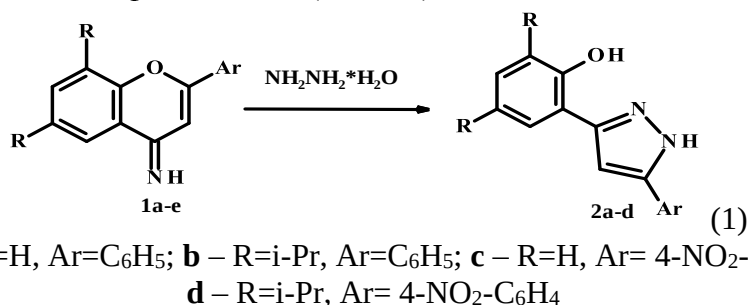
²Московський державний університет ім. М. В. Ломоносова

ZahorulkoSerhii92@gmail.com

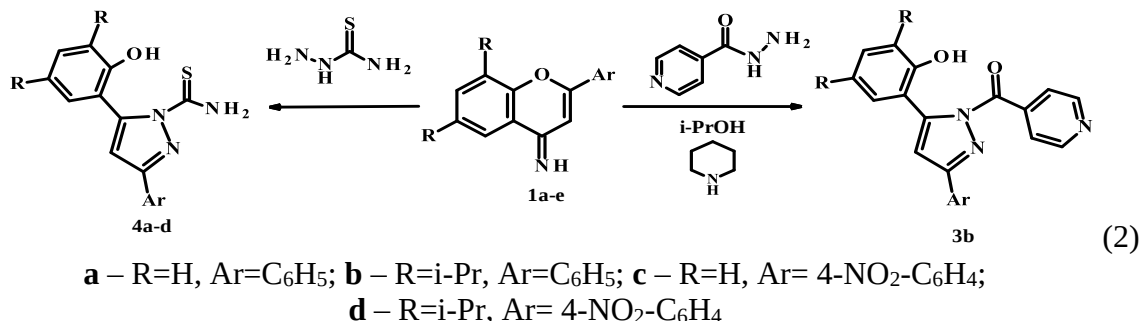
Наявність декількох електрофільних центрів в похідних хроменів дозволила детально дослідити реакції рециклізації з різними нуклеофільними агентами, в результаті чого було отримано о-гідроксифенільні похідні піразолів та оксазолів, піразинів і хіноксалінів, амінопіридинів та ін. Наявність о-гідроксифенільної групи представляє інтерес як структурний фрагмент великої кількості біологічно-активних сполук. Окремо привертає увагу широке застосування похідних фенолів, які містять у складі одну або декілька просторово ускладнених гідроксильних груп, у якості стабілізаторів полімерних матеріалів, антиоксидантів та флуоресцентних маркерів.

Але необхідно підкреслити про відсутність інформації до початку наших досліджень, стосовно вивчення поведінки імін похідних хроменових систем, під дією даних реагентів. Враховуючи різну електронегативність атомів Оксигену в хромоновому циклі та Нітрогену в хроменах представляло інтерес дослідити вплив заміни гетероатому в даній рециклізації.

Взаємодія імінів **1a-d** з гідразин гідратом приводить до утворення очікуваних похідних 1H-піразол-3-іл-фенолів **2a-d** (схема 1).



З метою розширення числа прикладів ефективного методу синтезу заміщених піразолів нами було синтезовано ізонікотиноїл-1H-піразол-5-іл **3b** та 1H-піразол-карботіоаміди **4a-d**, реакцію імінів **1a-d** з гідразидом ізонікотинової кислоти та тіосемикарбазидом (схема 2). Реакцію проводили кип'ятінням у спирті впродовж 2–3 годин, у випадку з гідразидом ізонікотинової кислоти в якості каталізатору використовували піперидин.



Структуру усіх синтезованих сполук підтверджено комплексом даних ЯМР ¹H та ¹³C спектрів.

НОВИЙ ПІДХІД ДО СИНТЕЗУ 4,6-ДИЗАМІЩЕНИХ ПОХІДНИХ ПІРИДО[2,3-*d*]ПІРИМІДИН-7-ОНУ

Зінченко Г. М., Музичка Л. В., Смолій О. Б.

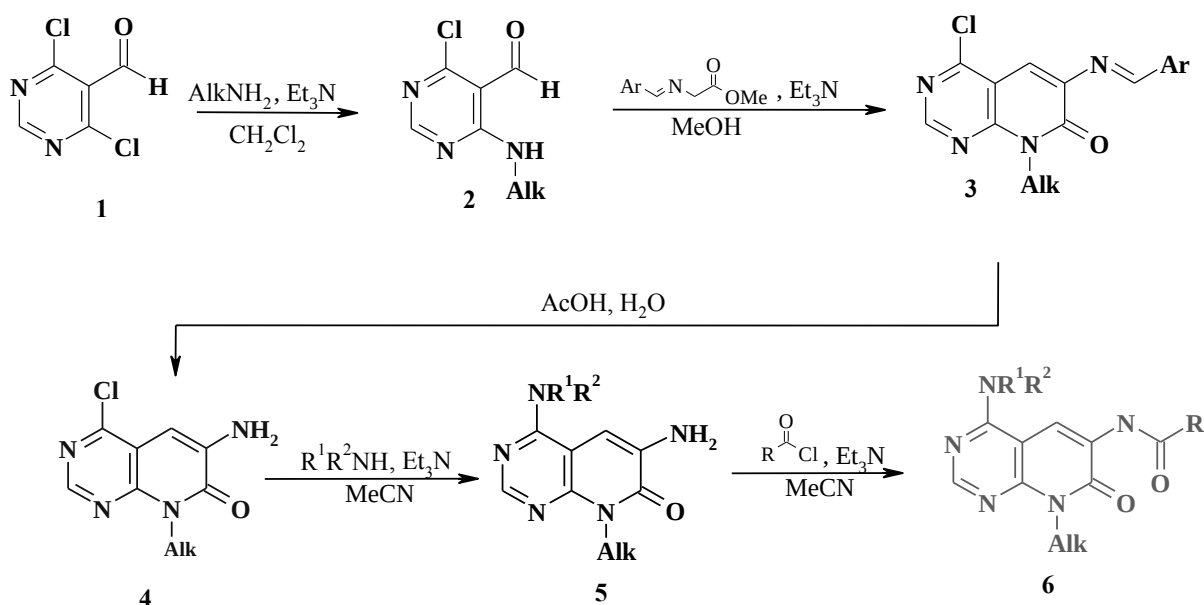
Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України

02660, м.Київ, вул. Мурманська, 1

Smolii@bpci.kiev.ua

Функціоналізовані піридо[2,3-*d*]піримідину є перспективними об'єктами досліджень в органічній та медичній хімії. Особливий інтерес представляють піридо[2,3-*d*]піримідин-7-они, які здатні селективно інгібувати дію різних тирозинкіназ та можуть бути ефективними у лікування автоімунних та онкологічних хвороб.

Для одержання нових синтонів в ряду заміщених піридо[2,3-*d*]піримідинів нами розроблений простий підхід до синтезу похідних 6-аміно-4-хлоропіридо[2,3-*d*]піримідин-7-ону **4**, подальша модифікація яких перспективна для пошуку біологічно активних сполук.



Alk = H, Me, Et, *n*-Pr, *n*-Bu, CH₂Ph, (CH₂)₂Ph, CH₂C(O)OMe, (CH₂)₂C(O)OMe, (CH₂)₃C(O)OMe.

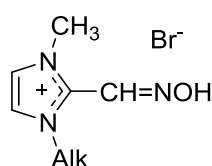
R¹R²N = MeNH, EtNH, *n*-PrNH, (CH₂)₄N, (CH₂)₅N; **Ar** = 4-MeOC₆H₃; **R** = Me, Ph.

На основі 6-амінозаміщених 4-хлоропіримідин-5-карбальдегідів **2**, отриманих з доступного 4,6-дихлоро-5-формілпіримідину **1**, синтезовано 4-хлоропіридо[2,3-*d*]піримідини **3** реакцією конденсації альдегідів **2** з метил *N*-(4-метоксибензиліден)гліцинатом в метанолі в присутності триетиламіну. Обробкою сполук **3** оцтовою кислотою (70 %) отримані нові похідні 6-аміно-4-хлоропіридо[2,3-*d*]піримідин-7-ону **4**, котрі виявились перспективними реагентами для синтезу ряду функціонально заміщених піридо[2,3-*d*]піримідин-7-онів **6**.

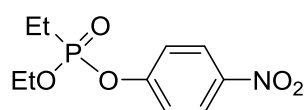
РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ 1-МЕТИЛ-3-АЛКИЛ-2-(ГИДРОКСИМИНО-МЕТИЛ)ИМИДАЗОЛИЙ БРОМИДОВ В ПРОЦЕССАХ ПЕРЕНОСА ФОСФОНИЛЬНОЙ ГРУППЫ

Капитанов И. В., Сердюк А. А., Бураков Н. И., Шумейко А. Е., Карпичев Е. А.
Институт физико-органической химии и углехимии им. Л. М. Литвиненко НАНУ
Институт органической химии НАНУ
ivkapitanov@gmail.com

Амфифильные 1-метил-3-алкил-2-(гидроксиминометил)имидазолий бромиды (I – III) являются привлекательной основой для мицеллярных систем, способных эффективно расщеплять эфиры кислот фосфора и серы. Преимуществом данных соединений является оптимальное соотношение основности и нуклеофильности их функциональной оксимной группы, позволяющее проводить процессы расщепления сложноэфирных связей с высокими наблюдаемыми скоростями в относительно «мягких» условиях ($\text{pH} \leq 9.5$).



Alk:
 $\text{C}_{12}\text{H}_{25}$ (I);
 $\text{C}_{14}\text{H}_{29}$ (II);
 $\text{C}_{16}\text{H}_{33}$ (III)



4-Нитрофенилдиэтилфосфонат (НФДЭФС)

Изучение реакционной способности соединений I – III в процессах расщепления модельного фосфорорганического субстрата НФДЭФС и их анализ в рамках псевдофазной распределительной модели (см. табл.) показало, что нуклеофильность оксиматной группы при варьировании длины алкильного заместителя существенно не изменяется, в то время как наблюдаемые мицеллярные эффекты отличаются весьма существенно. Это является следствием того, что наибольший вклад в увеличение наблюдаемой скорости вносит эффект концентрирования участников реакции в мицеллах, который, в свою очередь, напрямую зависит от гидрофобных свойств веществ I – III.

Таблица. Физико-химические свойства соединений I – III и их реакционная способность в процессе расщепления НФДЭФС (вода; 25 °C)

№	pK_a	χ	$k_2^M / V_M, \text{с}^{-1}$	$k_2^M, \text{л моль}^{-1} \text{с}^{-1}$	$K_S, \text{л/моль}$	ККМ, моль/л
I	8.48 ($\chi = 1.0$) 7.93 ($\chi = 0.1$)	1.0	0.58	0.29	55	$1.1 \cdot 10^{-3}$
II	8.53 ($\chi = 1.0$) 7.77 ($\chi = 0.1$)	1.0	0.54	0.22	100	$3.5 \cdot 10^{-4}$
III	7.74 ($\chi = 0.1$)	0.25 0.125	0.50 0.53	0.20 0.21	190 200	$2.5 \cdot 10^{-4}$ $2.5 \cdot 10^{-4}$

Примечания. Величины pK_a получены спектрофотометрическим методом; χ – мольная доля соединений I – III в сомицеллах с ЦТАБ.

**СИНТЕЗ НОВИХ СПІРОЦИКЛОАЛКЕНІЛЬНИХ
ПОХІДНИХ 4,6-ДИГІДРОКСИ-2-ТІОПІРИМІДИНІВ РЕАКЦІЯМИ
МЕТАТЕЗИСУ З ЗАКРИТТЯМ ЦИКЛУ**

Кобижча Н. І., Головатюк В. М., Безуглий Ю. В., Кашковський В. І.

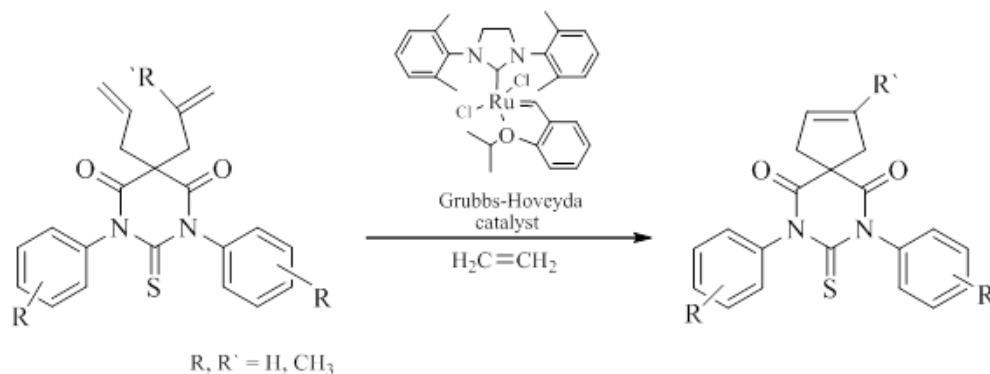
Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України

Kobyzhcha@nas.gov.ua

Реакції метатезису олефінів є унікальним та оригінальним видом хімічних перетворень, в яких за участю металокарбенових комплексів відбувається перерозподіл подвійних зв'язків з подальшим утворенням нових молекул. Крім того, в отриманих таких чином сполуках зберігається ненасичений зв'язок, який в подальшому, при необхідності, може бути функціоналізований різними фармакофорними групами.

Раніше ми повідомляли про одержання реакціями метатезису із закриттям циклу нових N,N'-дизаміщених 5-спіроциклопентен-3-іл 2,4,6-триоксопіримідинів, однак застосування цих реакцій для синтезу тіоаналогів даного класу сполук на сьогодні мало вивчено.

Нами встановлено, що метатезис із закриттям циклу з використанням рутенійвмісного каталізатора Граббса-Ховейди дозволяє отримувати з діалкенільних 4,6-діоксо-2-тіопіримідинів відповідні нові спіроциклоалкенільні похідні за схемою:



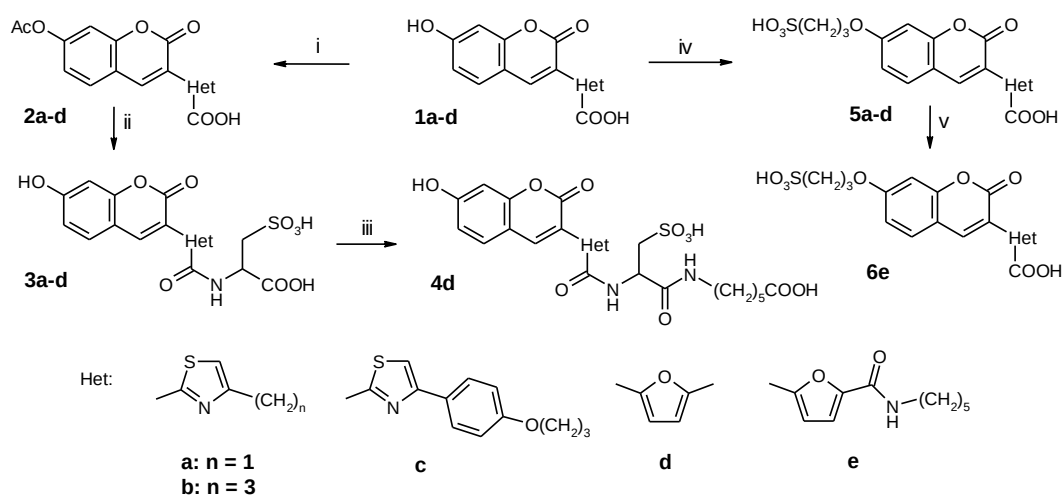
Будова та хімічна чистота всіх отриманих сполук доведена даними спектроскопії ЯМР ¹H, ¹³C та мас-спектрометрії.

NEW WATER-SOLUBLE DERIVATIVES OF 7-HYDROXY-3-HETARYL COUMARINS FOR THE FLUORESCENT LABELING OF BIOMOLECULES

Kuziv Ia. B., Dubey I. Ya.

Institute of Molecular Biology and Genetics, NAS of Ukraine,
150 Zabolotnogo str., 03143 Kyiv, Ukraine
ya.b.kuziv@imbg.org.ua

Fluorescent labeling of biomolecules is widely used in both life sciences and medical diagnostics. We have previously synthesized a number of blue-emitting coumarin-based reagents **1** by the introduction of carboxyalkyl groups into 7-hydroxy-3-hetarylcoumarins, and corresponding 7-methoxy derivatives. They are suitable for the labeling of compounds containing aliphatic amino groups. However, the disadvantage of these derivatives as reagents for the conjugation with biomolecules being typically performed in aqueous medium is their poor solubility in water. Only 7-hydroxycoumarin derivatives are soluble at high pH. Here we propose a new way to increase water solubility of coumarin reagents by their derivatization with 1,3-propanesultone or cysteic acid.



Scheme. Synthesis of water-soluble derivatives of 3-hetarylcoumarins.

Synthesis of cysteic acid derivatives **3a-d** and **4d** started with blocking the phenolic hydroxyl of compounds **1a-d** with Ac_2O (Scheme, step (i)). Resulting acylated coumarins **2a-d** were activated with DCC and HOBt and then condensed with cysteic acid methyl ester in the presence of diisopropylethylamine with subsequent ester hydrolysis by NaOH (ii) in one-flask process. Dye **4d** with COOH group on an extended linker was prepared by the activation of **3d** with DCC and 6-sulfobenzotriazole followed by the condensation with ϵ -aminocaproic acid methyl ester and alkaline hydrolysis of methyl ester group (iii). 6-Sulfobenzotriazole synthesis and use for amide bond formation is described in our accompanying abstract.

Sulfopropyl derivatives **5a-d** were obtained by alkylating compounds **1a-d** with 1,3-propanesultone in the presence of K_2CO_3 (iv). 3-Furylcoumarin reagent **6e** was prepared from **5d** via its activation with DCC and 6-sulfobenzotriazole followed by condensation with methyl aminocaproate and ester group cleavage by NaOH (v).

Compounds **2a-d** were purified by silica column chromatography, whereas reverse-phase chromatography on TMS-silica was used for target dyes containing the sulfonate group. These compounds were obtained as triethylamine and potassium salts and fully characterized by ^1H NMR and LC-MS. Coumarin derivatives **3-6** are well soluble in water and can be used as reagents for the fluorescent labeling of proteins, nucleic acids and other biomolecules.

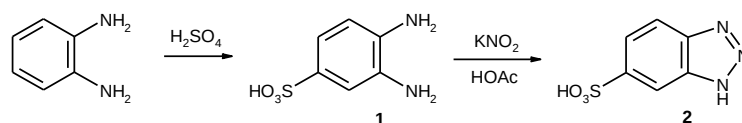
6-SULFOBENZOTRIAZOLE AS A NEW REAGENT FOR AMIDE BOND FORMATION IN AQUEOUS MEDIUM

Kuziv Ia. B., Dubey I. Ya.

Institute of Molecular Biology and Genetics, NAS of Ukraine,
150 Zabolotny str., 03143 Kyiv, Ukraine
ya.b.kuziv@imbg.org.ua

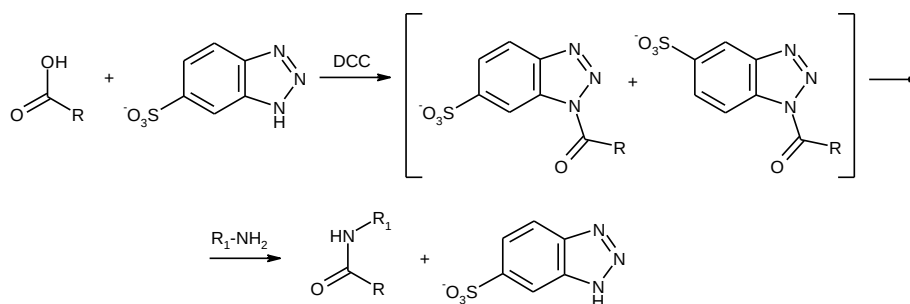
Covalent labeling and conjugation of biomolecules is most commonly performed by active ester approach via the formation of amide bond. But this method requires active esters sufficiently soluble in aqueous or aqueous-organic medium. This can be achieved using the esters containing anionic or cationic functional groups, e.g. sulfonic or ammonium-type functions. Additional requirement for active esters to be used in aqueous conditions is low rate of their hydrolysis at pH 8–8.5 typical for biomolecular coupling reactions. Here we propose the use of sulfobenzotriazolides as new efficient reagents for amide synthesis. N-acylbenzotriazoles are stable in water, and at the same time demonstrate high reactivity towards aliphatic amines due to the presence of a good leaving group that allows amide bond formation under mild reaction conditions in aqueous-organic solutions.

The synthesis of 6-sulfobenzotriazole (Scheme 1) started from the sulfonation of *o*-phenylene diamine with conc. sulfuric acid. Its cyclization to form benzotriazole ring was then performed by diazotization reaction with potassium nitrite and acetic acid. Sulfobenzotriazole was isolated by column chromatography. Ion-exchange chromatography on QAE-Sephadex provided free acid **2**, whereas reverse-phase chromatography on TMS-silica allowed to obtain its triethylammonium salt.



Scheme 1. Synthesis of 6-sulfobenzotriazole.

The mechanism of coupling reaction using 6-sulfobenzotriazole is shown in Scheme 2. Carboxylic acid is first activated with a suitable condensing reagent (for example, N,N'-dicyclohexylcarbodiimide, DCC) in the presence of sulfobenzotriazole salt. Two isomers of water-soluble N-acylbenzotriazole active intermediate can be formed. After the addition of corresponding amine fast nucleophilic substitution reaction (~one hour) results in the smooth formation of amide bond.



Scheme 2. Mechanism of amide formation in the presence of sulfobenzotriazole

We have used sulfobenzotriazole for the introduction of carboxyalkyl linkers into the coumarin dyes to prepare fluorescent labeling reagents (see the accompanying abstract).

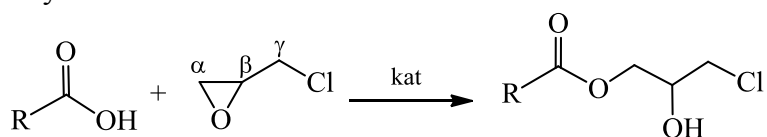
КВАНТОВОХІМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПОВЕДІНКИ КАРБОНОВИХ КИСЛОТ В РЕАКЦІЇ АЦИДОЛІЗУ ЕПІХЛОРГІДРИНУ

Марценюк Н. С., Кравчук А. В., Гембарук В. В., Ютілова К. С., Швед О. М.

Донецький національний університет імені Василя Стуса

martseniuk.n@donnu.edu.ua

Епіхлоргідрин (1-хлор-2,3-епоксіпропан, ЕХГ) використовується для виробництва синтетичного гліцерину, епоксидних смол, стабілізаторів для хлорорганічних сполук, іонообмінних смол в хімічній промисловості, в гумотехнічній та інших галузях промисловості. Висока активність епіхлоргідрину обумовлена конформаційно напруженою епоксидною групою та значною полярністю молекули. Вивчення закономірностей механізму та напрямку розкриття оксиранового циклу нуклеофільними реагентами є актуальною задачею хімії як складова частина досліджень реакцій нуклеофільного заміщення. Реакція хлорметилоксирану з карбоновими кислотами є модельною для дослідження механізму нуклеофільного розкриття оксиранового циклу:



Метою роботи є вивчення реакційної здатності карбонових кислот у реакції ацидолізу ЕХГ методами квантової хімії. Об'єктом дослідження є серія карбонових кислот: *цис*-бутендіова, гексанова і циклогексанкарбонова кислоти. Всі квантовохімічні розрахунки в даній роботі було проведено з використанням програмного комплексу Firefly 8.2.0. Побудова та візуалізація структур модельних об'єктів реалізована за допомогою програми ChemCraft 1.8. З використанням методу функціонала густини в наближенні B3LYP/6-31+G** було визначено структури перехідних станів (ПС). Належність локалізованих перехідних станів відповідній реакції доведена спусками за процедурою IRC у долини реактантів і продуктів. Знайдено рівноважні конфігурації ПС реакції аніонів карбонових кислот з ЕХГ у випадку тилової атаки на α -атом Карбону.

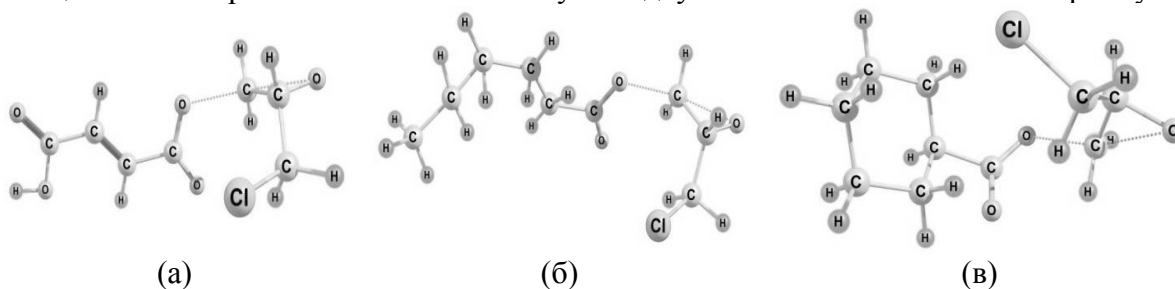


Рис. ПС реакції аніону *цис*-бутендіової (а), гексанової (б) і циклогексанкарбонової (в) кислоти з ЕХГ

Побудовано енергетичні профілі реакції аніонів карбонових кислот з ЕХГ. Показано вплив стеричних параметрів реактантів на швидкість розкриття оксиранового циклу. Здійснено розрахунок енергетичних параметрів реакції, з яких встановлено, що на енергію активації впливає об'єм замісника при карбоксильній групі. Визначено, що швидкості взаємодії ЕХГ з одноосновними кислотами і з двоосновною кислотою за однією карбоксильною групою є співставними. Отримані значення ентальпії, ентропії та енергії Гіббса показують, що реакція перебігає із виділенням енергії. Одержані результати є важливими для прогнозування кінетичних особливостей розкриття оксиранового циклу ЕХГ карбоновими кислотами.

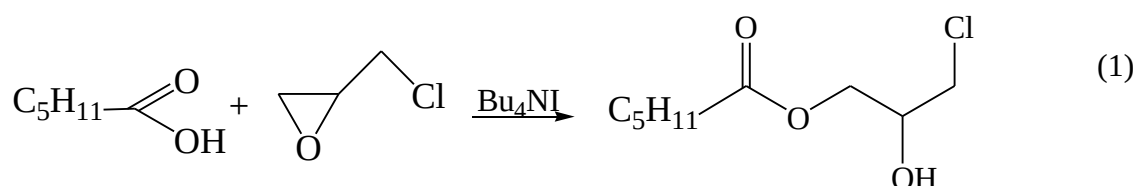
ГЕКСАНОВА КИСЛОТА ЯК НУКЛЕОФІЛЬНИЙ РЕАГЕНТ КАТАЛІТИЧНОГО РОЗКРИТТЯ ЦИКЛУ ХЛОРМЕТИЛОКСИРАНУ

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

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

Реакція карбонових кислот з хлорметилоксираном (епіхлоргідрин, ЕХГ) лежить в основі синтезу гліцидилкарбонових ефірів, які є перспективними мономерами для отримання полімерних композицій з різноманітними властивостями та широким спектром використання, а саме герметиків, клеїв, компонентів фарб та антикорозійних покриттів, цементних модифікаторів тощо. Реакція каталітичного ацидолізу 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. З літературних даних відомо, що збільшення ступеню розгалуженості замісника в карбоновій кислоті сприяє перебігу реакції. Проте варіювання просторової будови кислот відбувається не лише завдяки використанню кислот розгалуженої будови, але й завдяки збільшенню кількості атомів Карбону в молекулі лінійної будови. Тому актуальним є здійснення систематичних дослідів щодо впливу будови карбонових кислот на закономірності розкриття оксиранового циклу.

Метою даної роботи є вивчення реакційної здатності гексанової кислоти в реакції з хлорметилоксираном. Реакція перебігає за схемою:



В якості нуклеофільного реагента обрана гексанова кислота, яка має достатньо лінійну будову та достатньо велику кількість атомів Карбону. Каталізатором реакції (1) обрано тетрабутиламоній йодид. Дослідження проводились при температурі 60 °С у надлишку епіхлоргідрину, що є і розчинником, і субстратом одночасно. Для встановлення кінетичного закону та порядку реакції (1) за каталізатором та кислотою здійснено варіювання концентрації каталізатора в межах 0,00375÷0,015. Контроль за ходом процесу здійснювався по витрачанням кислотного реагента методом потенціометричного кислотно-основного титрування.

За результатами роботи визначено порядок реакції за гексановою кислотою, тетрабутиламоній йодидом, встановлено кінетичний закон реакції. Знайдено константи швидкості некаталітичної та каталітичної стадій. Визначено, що у відсутності каталізатора реакція на декілька порядків більш повільніша, ніж при наявності каталізатора, що доводить ефективність тетрабутиламоній йодиду як каталізатора реакції (1). Порівняння добутих результатів з відповідними даними для оцтової кислоти, показує що збільшення вуглеводного радикалу карбонової кислоти впливає на спостережуваний порядок реакції. Це дозволяє деталізувати механізм каталітичної взаємодії аліфатичних карбонових кислот в присутності солей тетрабутиламонію.

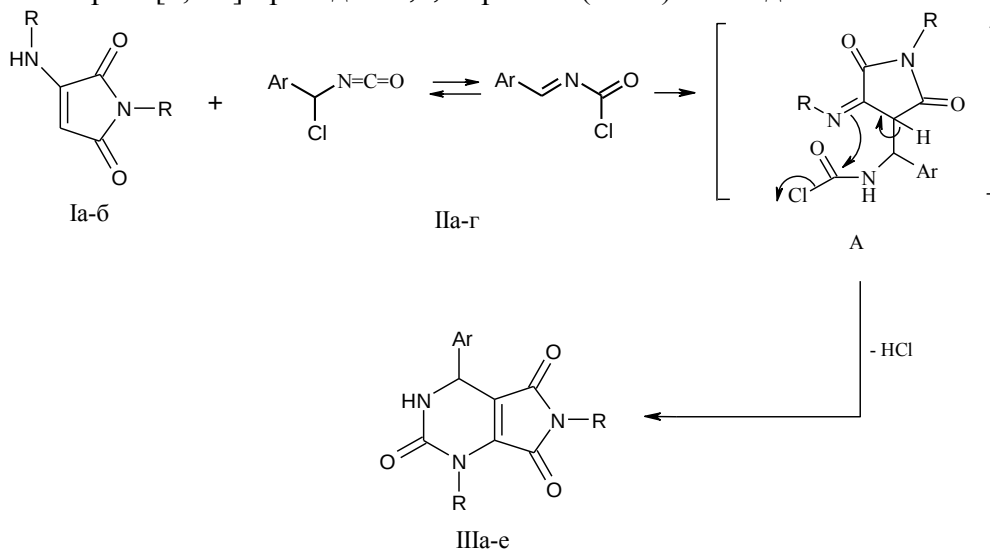
СИНТЕЗ ПІРОЛО[3,4-*d*]ПІРИМІДИН-2,5,7-ТРИОНІВ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ЇХ ПРОТИГРИБКОВОЇ АКТИВНОСТІ

Мельничук Н. П., Роман І. Т., Манич Т. В., Кушнір О. В.

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, Чернівці
o.kushnir@chnu.edu.ua

Піримідини та конденсовані з пірольним ядром піримідинові системи володіють різноманітними біологічними активностями, серед яких слід відзначити: антагоністи кортикотропін-релізінг фактора (CRF), антагоністи допамін D4 рецептора, інгібітори HIV-1 зворотної транскриптази, інгібітори дигідрофолат редуктази, антиконвульсанти, протиракові агенти.

Нами розроблено ефективний підхід до одержання нових представників піроло[3,4-*d*]піримідинонів, який базується на внутрішньомолекулярній циклоконденсації доступних N,N-дизаміщених пірол-2,5-діонів (I а,б) з 1-хлоробензилоціанатами (II а-г). Установлено, що взаємодія реагентів (I а,б) та (II а-г), яка гладко перебігає при їх нагріванні в розчині дихлорметану впродовж 8 год, приводить до 4-арил-1,6-діалкіл-3,4-дигідро-1H-піроло[3,4-*d*]піримідин-2,5,7-трионів (IIIа-е) з виходами 45–72 %.



I, R = CH₃ (a), PhCH₂ (б);

II, A = 3-BrC₆H₄ (a), 3-NO₂C₆H₄ (б), 4-NO₂C₆H₄ (в), 3,4-Cl₂C₆H₃ (г);

III, Ar = 3-BrC₆H₄, R = CH₃ (a); Ar = 4-NO₂C₆H₄, R = CH₃ (б), Ar = 3-BrC₆H₄, R = C₆H₅CH₂ (в), Ar = 3-NO₂C₆H₄, R = C₆H₅CH₂ (г), 4-NO₂C₆H₄, R = C₆H₅CH₂ (д); 3,4-Cl₂C₆H₃, R = C₆H₅CH₂ (е).

Проведено вивчення антимікробної і протигрибкової активності синтезованих сполук за методом двократних серійних розведень з використанням як тест-мікроорганізмів культур стандартних штамів *S.aureus* ATCC 25922 і *C.albicans* ATCC 885-653. Аналіз отриманих результатів показує, що досліджувані препарати володіють помірною антимікробною та протигрибковою активністю у концентраціях від 62,5 до 500 мкг/мл на досліджуваних тест-культурах мікроорганізмів, що робить перспективним їх подальше поглиблене дослідження.

Індивідуальність та склад всіх отриманих сполук доведені результатами хромато-мас-спектрометрії та елементного аналізу, а будова ІЧ-, ЯМР ¹H та ¹³C спектроскопією.

DETERMINATION OF POTENTIALLY CATALYTICALLY ACTIVE ZEOLITES IN THE CONVERSION OF PIPERYLENE IN ISOPRENE

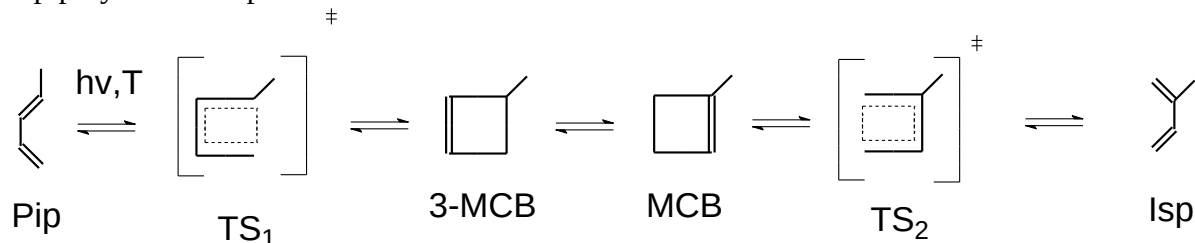
Mirgaleev D. S.¹, Vakulin I. V.¹, Talipov R. F.¹, Talipova G. R.¹, Vakulina A. I.²

¹Bashkir State University. Zaki Validi St., 32. Ufa, 450076. Russia

²Ural State University of Economics, Yekaterinburg, Russia

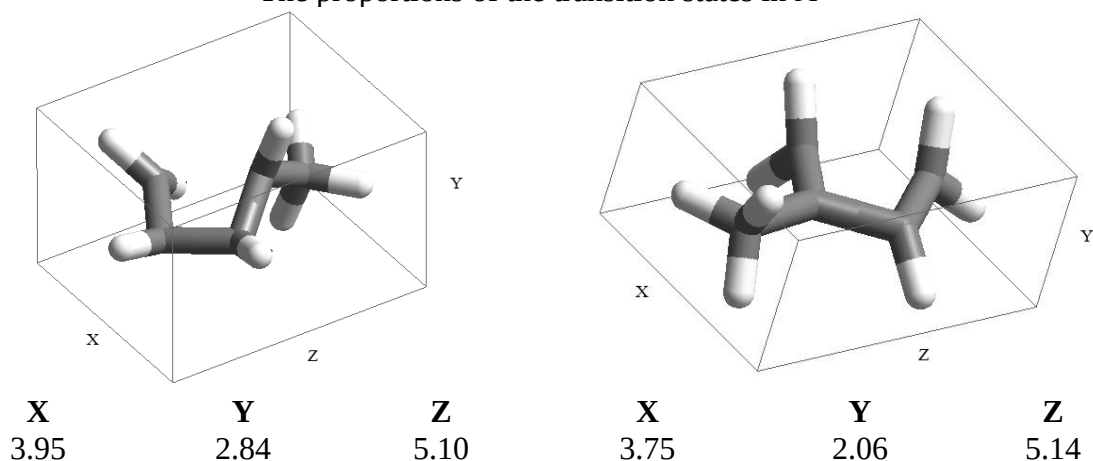
denso190995@mail.ru

We have considered possible ways of reducing the activation energy of the conversion of piperylene to isoprene.



In the B3LYP/6-31G (d,p) approximation, the structures of the transition states of the [2 + 2] cyclization reactions of piperylene (PS1) and the disclosure of methylcyclobutene (PS2) are determined.

The proportions of the transition states in Å



According to the principles of molecular imprinting, the activation energy can be reduced by the use of porous substances conducive to the formation of a transition state. For this purpose, cavities of such substances, for example zeolites, should have cavities complementary in shape to the transition state with cavity diameters comparable in size.

The measured PS proportions show that in our case, zeolites with a pore diameter in the range of 4.00 to 5.45 Å should be catalyzed activity, for example zeolites of the following Frame Work Type: ANA, NAT, PAR, GIS, EPI.

This research is supported by the grant № 17-43-020754 of Russian Fund of Basic Researches.

DFT STUDY OF FREE GIBBS ENERGY ACTIVATION OF STAGES OF CONVERSION OF PIPERYLENE TO ISOPRENE

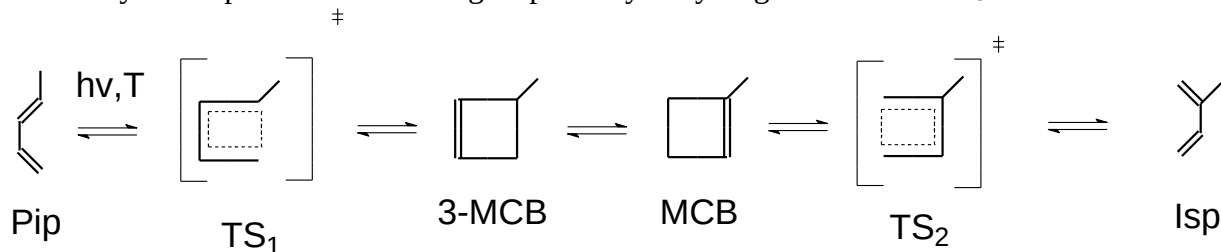
Mirgaleev D. S.¹, Vakulin I. V.¹, Talipov R. F.¹, Talipova G. R.¹, Vakulina A. I.²

¹Bashkir State University. Zaki Validi St., 32. Ufa, 450076. Russia

²Ural State University of Economics, Yekaterinburg, Russia

denso190995@mail.ru

The proposed scheme for the conversion of isoprene to piperylene can improve the efficiency of the process of obtaining isoprene by dehydrogenation of the C₅ fraction.



Using DFT methods, we calculated the Gibbs energies of activation of various stages of the scheme under consideration.

Table. Free Gibbs energies of activation $\Delta G_r^\ddagger$ (kJ/mol) of direct and inverse conversion stages

Stage	Transition State	$\Delta G_r^\ddagger$ (U)B3LYP/6-31G/d,p)		Exp.[1]
		singlet	triplet	
Pip → 3-MCB	TS ₁	194.7	439.5	-
3-MCB → Pip	TS ₁	127.4	372.1	127.5
Isp → MCB	TS ₂	186	408.8	-
MCB → Isp	TS ₂	139.9	362.7	146.7

When calculating, we took into account two variants of the spin states of the reagents: a triplet and a singlet. In the first case, the UHF approximation was used, in the second case - RHF. Calculations show that singlet reactions have lower values of activation energies, which are consistent with the literature data. The activation energies of the cyclization reactions are much larger than the activation energies of the cyclobutane ring opening reactions, in both cases, which is due to the known steric intensity of this cycle.

The activation energy of cyclization of piperylene in 3-methylcyclobutene is 8.7 kJ/mol greater activation energy of isoprene cyclization in methyl cyclobutene. In this case, the opening of the 3-methylcyclobutene ring to form piperylene is 12.5 kJ/mol higher than the analogous reaction for methylcyclobutene.

This research is supported by the grant № 17-43-020754 of Russian Fund of Basic Researches.

**THEORETICAL STUDY ON THE INFLUENCE OF TEMPERATURE
ON THE FREE GIBBS ENERGY OF THE PROCESS OF THE CONVERSION
OF PIPERYLENE TO ISOPRENE**

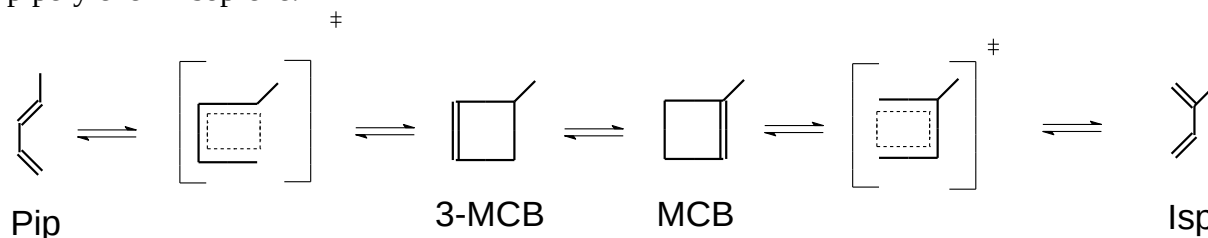
Mirgaleev D. S.¹, Vakulin I. V.¹, Talipov R. F.¹, Talipova G. R.¹, Vakulina A. I.²

¹Bashkir State University. Zaki Validi St., 32. Ufa, 450076. Russia

²Ural State University of Economics, Yekaterinburg, Russia

denso190995@mail.ru

In attempts to increase the efficiency of isoprene synthesis during the dehydrogenation of the C₅ fraction, we considered the basic thermodynamic parameters of the isomerization of piperylene in isoprene.



To study the temperature features of this scheme, we calculated the dependence of the Gibbs energy on temperature:

Table 1. The dependence of the free Gibbs energy ΔG_r^T (kJ/mol) of the conversion of piperylene to isoprene on the temperature (K)

Reagent	Product	T								
		298	323	348	373	398	423	448	473	498
Pip	3-MCB	67.3	59.8	60.1	60.4	60.9	70	70.4	71	61
3-MCB	MCB	-12.2	-12	-11.8	-11.6	-11.5	-11.3	-11	-10.8	-10.6
MCB	Isp	-46.1	-38.8	-39.1	-39.5	-39.8	-40.2	-40.5	-40.9	-41.3
Pip	Isp	9	9	9.2	9.3	9.6	18.5	18.9	19.3	19.7

In the same way, we obtained data on the dependence of the entropy of the reaction on temperature: the entropy, in this case, changes discontinuously. Then there is a sharp decrease with increasing temperature from 398 K (125 °C) to 423 K (150 °C).

Table 2. The dependence of the entropy of the reaction ΔS_r^T (J/mol·K⁻¹) on the temperature

Stage	298	323	348	373	398	423	448	473	498
Pip>3MCB	-18.8	-11.6	-12.3	-13	-13.6	-21.7	-22	-22.3	-22.6
3MCB>MCB	-6.1	-6.6	-7.2	-7.6	-8.1	-8.6	-9.1	-9.5	-9.9
MCB>Isp	11.6	12.3	13	13.5	14	14.4	14.9	15.2	15.5
Pip>Isp	-13.3	-5.9	-6.5	-7.1	-7.7	-15.9	-16.2	-16.6	-17

According to the calculated data, the conversion of piperylene to isoprene appears to be a weak endothermic reaction. With increasing reaction temperature, the free Gibbs energy increases nonlinearly. Thus, when the 423 K (150 °C) is reached, the ΔG_r reaction increases by a factor of two. The subsequent increase in temperature slightly increases the free energy of Gibbs. Obviously, the conversion must be carried out at temperatures not higher than 150 °C with removal of the reaction product from the mixture.

This research is supported by the grant № 17-43-020754 of Russian Fund of Basic Researches.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМАЗАНОНАФТАЛИМИДОВ

Немченко Н. В., Мироненко Л. С., Дистанов В. Б., Фалалеева Т. В., Дистанов В. В.

Национальный технический университет
«Харьковский политехнический институт»
distanov@ukr.net

На данный момент обращается внимание на получение свободных радикалов. Одним из таких классов соединений являются вердазины. Они относятся к группе наиболее стабильных радикалов. Вердазины занимают большое значение в химической технологии, физике, гетерогенном катализе, фармакологии, биологии. В присутствии свободных радикалов происходят такие важные процессы, как крекинг нефти, цепные реакции взрыва, горения и медленного окисления, фотохимические и радиационно-химические реакции, полимеризация и стабилизация полимеров.

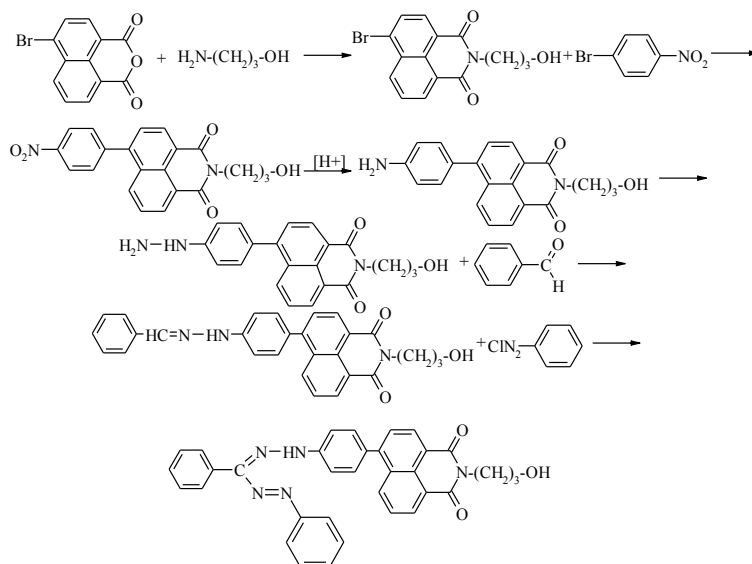
Одним из путей получения вердазинов, наиболее стабильных свободных радикалов является циклизация формазанов под воздействием формальдегида или галоидалкилов. Формазаны, в свою очередь, можно получить взаимодействием гидразонов с диазониевыми солями арильных или гетерильных производных.

Природа арильных или гетерильных заместителей существенно влияет как на спектральные характеристики соответствующих вердазинов, так и на их стабильность.

Синтез формазанов, которые излучают свет, позволит расширить их области использования, например, в качестве фотохромных и термохромных материалов, а также может привести к получению люминесцирующих стабильных свободных радикалов с новыми возможностями.

В то же время, стереоизомеры оказывают существенное влияние на люминесцентные характеристики соединения и на их способность к циклизации и превращению формазана в вердазиновый радикал. Предыдущий изомер из-за своей конфигурации не дал возможности его перевода в вердазил.

В связи с этим, нами был разработан способ получения другого изомера – 1-[*n*-(4-фенилнафтоил)]-3,5-дифенилформазана по следующей схеме:



Анализ квантово-химических расчетов показал, что такие производные не имеют запрета на получение циклической структуры.

Исследованы спектрально-люминесцентные свойства полученных соединений. Максимумы люминесценции синтезированных соединений излучают свет в области 500–510 нм. При этом абсолютный квантовый выход формазанонафталенового ангидрида составляет 79 %.

СИНТЕЗ α -АМІНОАМІДИНІВ ТА ЇХ ВИКОРИСТАННЯ В СИНТЕЗІ НОВИХ НІТРОГЕНОВІСНИХ ГЕТЕРОЦИКЛІВ

Onipko O. B.^{1,2}, Гладков Є. С.^{1,2}, Чебанов В. А.^{1,2}

¹Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

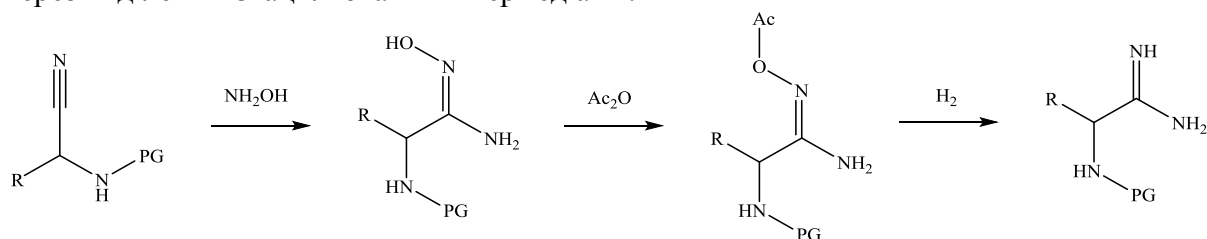
²ДНУ НТК «Інститут монокристалів» НАН України, м. Харків

onipko_o@outlook.com

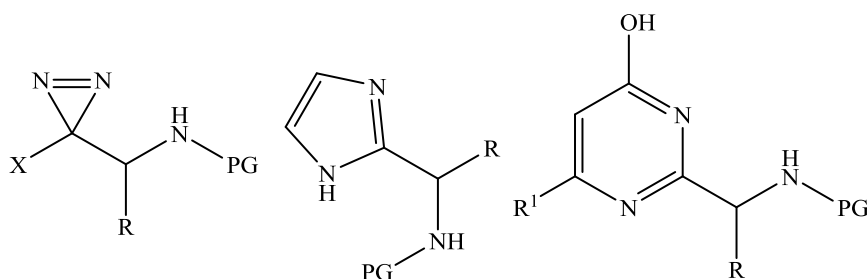
α -Аміноамідини – відносно маловивчений, але поширений у природі підклас амідинів. Речовини, що містять α -аміноамідинове угруповання, є інтермедіатами в біосинтезі інозин монофосфату – спільного попередника всіх пуринових нуклеотидів. Крім того, ці речовини, як повні безоксигенові нітрогенові аналоги α -амінокислот, є об'єктом вивчення астробіології. Проте найбільшу цінність вони становлять як реагенти для отримання нових гетероциклічних сполук, таких як аміноімідазоли, амінопіримідини та ін.

Синтез α -аміноамідинів – важлива й не до кінця вирішена задача синтетичної органічної хімії. Існуючі методи не є універсальними й мають ряд обмежень. Тому пошук нових та вдосконалення вже відомих шляхів отримання α -аміноамідинів – актуальне завдання органічної хімії.

Для синтезу цільових α -аміноамідинів з різними бічними ланцюгами нами було обрано лінійну стратегію, яка зводилася до перетворення захищених α -амінонітрилів в α -аміноамідоксими. Двох стадійна конверсія останніх в цільові молекули здійснювалася через виділення О-ацильованих інтермедіатів.



Досліджуються властивості та реакційна здатність отриманих α -аміноамідинів, а також можливість отримання гетероциклічних сполук декількох різних класів на їх основі:



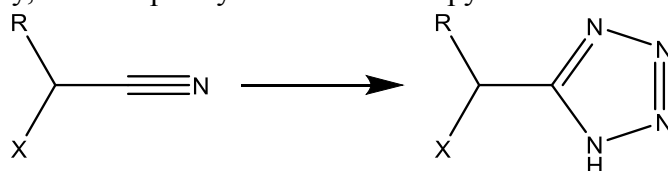
Структуру отриманих речовин підтверджено за допомогою методів ^1H та ^{13}C ЯМР спектроскопії та мас-спектрометрії.

СИНТЕЗ НОВИХ ОКСИ- ТА АМІНОПОХІДНИХ 5-МЕТИЛТЕТРАЗОЛУОнiпко О. В.^{1,2}, Демидов О. О.², Манвелян А. А.², Гіюк В. М.¹, Гладков Є. С.^{1,2}¹ДНУ НТК «Інститут монокристалів» НАН України²Харківський національний університет ім. В. Н. Каразіна

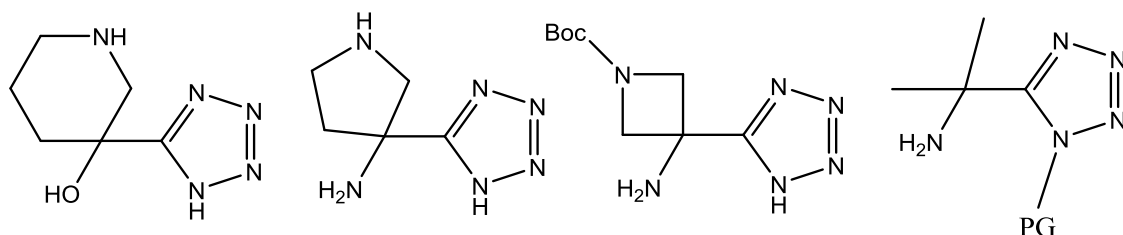
onipko_o@outlook.com

Пошук нових похідних тетразолу та розробка високоефективних методів їх синтезу є перспективним напрямком синтетичної хімії гетероциклічних сполук. Вивчення цих речовин дозволяє вирішувати задачі теоретичної органічної хімії, пошуку нових фізіологічно активних сполук та отримання нових білдинг-блоків для подальшого синтезу бібліотек нових представників цього класу. Ці сполуки є перспективними з точки зору медичної хімії як синтетичні біоізостери різноманітних функціональних груп у біологічно активних речовинах. Особливої уваги заслуговують відносно мало досліджувані оксі- та амінопохідні тетразолу, що містять первинну або вторинну функціональні групи, не зв'язані безпосередньо з азольним циклом.

Нами було розроблено та вивчено декілька методик синтезу похідних оксі- та амінотетразолу. В результаті нашої роботи було отримано ряд похідних 5-метилтетразолу, які містять як первинну, так і вторинну оксі- або аміногрупи.



R = Alkyl, Aryl, Hetaryl, Cycloalkyl; X = NH-PG, O-PG



Формування тетразольного циклу здійснювалось реакцією відповідних захищених аміонітрilів із азидом у присутності солі цинку з наступним зняттям захисної групи.

Повнота протікання реакції контролювалася методом тонкошарової хроматографії. Структури цільових і проміжних сполук підтверджені даними ¹H і ¹³C ЯМР-спектроскопії, ІЧ-спектроскопії та мас-спектрометрії.

MECHANISM OF BENZIMIDAZO[2,1-*b*]THIAZANIUM SALTS RECYCLIZATION UNDER THE ACTION OF EPICHLOROHYDRIN

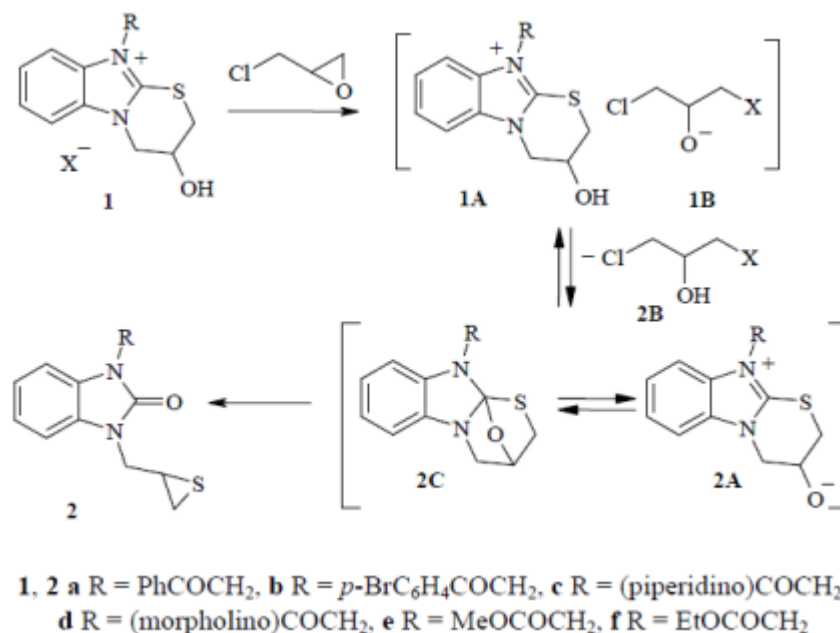
Orlov M. A.

L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic Chemistry and Coal Chemistry

NAS of Ukraine

orlovinfou@yandex.ru

In our previous works we have found the elegant way of thiazanium salts **1** transformation under the action of epichlorohydrin into thiirane derivatives **2**. The mechanism of this unusual reaction is very interesting and its analysis can give a new information about possible driving force of recyclization processes.

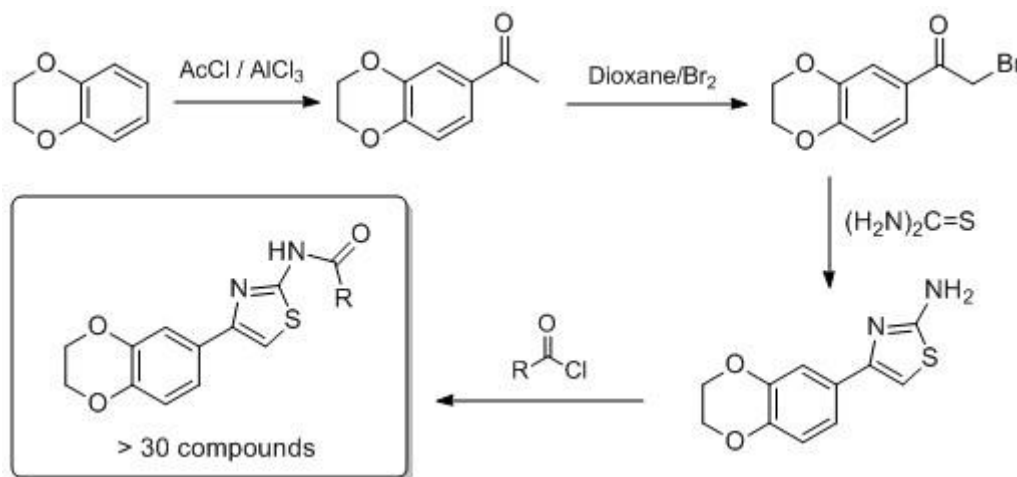


The conversion of compounds **1** → **2** is caused by the fact that epichlorohydrin is able to bind halide anions forming the alkoxide anion of glycerin dihalohydrin **1B** which is rapidly protonated as a result of the hydroxyl group of thiazanium salt **1**, assisting the irreversible course of recyclization of the latter to thiirane through the oxidothiazanium zwitterion **2A** and its covalent form **2C**. The synchronous occurrence of a reaction with addition of chloride ion to the oxirane with cleavage of proton from the thiazanium salt is also possible. If the OH group is protected by acylation then recyclization does not occur, which is caused by the impossibility of carrying out the stage of forming intermediate **2A**. It is interesting that with perchlorate salts of **1**, the reaction also does not proceed due to the low nucleophilicity of this anion.

**SYNTHESIS OF NOVEL SERIES OF SUBSTITUTED
4-(2,3-DIHYDROBENZO[b][1,4]DIOXIN-6-YL)THIAZOLES***Orlov M. A.*

L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic Chemistry and Coal Chemistry
NAS of Ukraine
orlovinfou@yandex.ru

Substituted 4-(2,3-dihydrobenzo[b][1,4]dioxin-6-yl)thiazoles are interesting objects for pharmacological studies. In this work we present novel series of acylamides (more than 30 examples), which containing 4-(2,3-dihydrobenzo[b][1,4]dioxin-6-yl)thiazole residue. For synthesis of target products we have used next scheme:



Structure and purity of obtained compounds was conformed by NMR techniques, TLC and elemental analysis. The expected pharmacological activity was evaluated using PASS software (<http://www.pharmaexpert.ru/passonline/>).

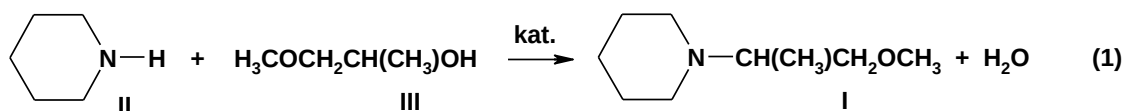
КАТАЛІТИЧНЕ АМІНУВАННЯ 1-МЕТОКСИ-ПРОПАНОЛУ-2

Павлов О. В., Білов В. В.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»

bvv1956@rambler.ru

Промислове значення азотовмісних органічних сполук стимулює дослідження економічних каталітичних способів синтезу останніх. Так, алкоксиалкіламіни використовуються в якості проміжних продуктів для отримання фармацевтичних та агрохімічних препаратів. Відомості про потенціал реакції каталітичного амінування піперидином моноетерів 1,2-діолів, в особливості від будови останніх, практично відсутні. Метою даної роботи є вивчення перебігу реакції (1) – амінування 1-метокси-пропанолу-2 (III) піперидином (II) в умовах парофазного гетерогенного каталізу:



В експерименті використано промислові зразки нікельальномокальцієвих каталізаторів іншого призначення з вмістом NiO близько 31,0 % (К-1) та 35,0 % (К-2). Синтез (I) досліджували при молярному співвідношенні реагентів III:II:H₂ = 1,0:1,0:7,8, навантаженні еквімолярної суміші III:II, рівному 0,4 год⁻¹, та температурах 180–240 °C.

Як видно з рис., каталізатор К-2 переважає зразок К-1 як за питомою каталітичною активністю (ПКА) (криві 3 та 1), так і за виходом цільового продукту (криві 4 та 2): наприклад, при 493 К ПКА становить 0,0040 та 0,0021 моль III/(гNiO·год), а вихід I 46,6 та 20,9 %, відповідно.

Виходи основних побічних продуктів – N-ізопропілпіперидину, пропанолу-2 та піридину досягають приблизно 5,0, 8,0 та 20,0 %, відповідно. Також з виходом до 2,0 % (513 К) утворюється N-метилпіперидин.

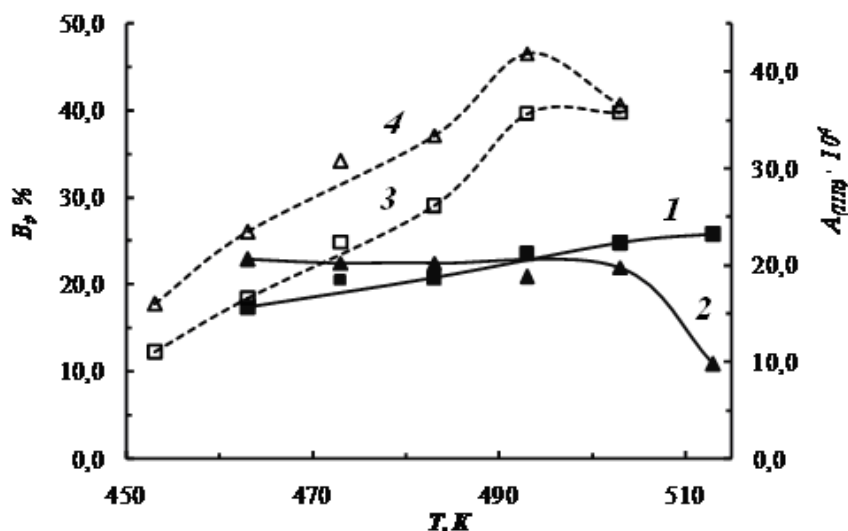


Рис. Залежність питомої каталітичної активності $A_{\text{кат}} \cdot 10^4$ [моль III/(гNiO·год)] та виходу цільового аміну B_{I} (%) від температури синтезу T (К), криві 1, 2 (К-1), криві 3, 4 (К-2)

Будова моноетеру 1,2-діолу значно впливає на реакційну здатність останнього при взаємодії з піперидином. Так, 1-метокси-пропанол-2 (гідроксильна група у вторинного С-атому) конвертується (503К) приблизно в 1,5 рази гірше у порівнянні з 2-етоксиетанолом.

ОДЕРЖАННЯ ОКСИАЛЬДЕГІДІВ З РОСЛИННОЇ СИРОВИНИ

Павлюк О. В., Ткаченко Т. В., Кашковський В. І.

Відділ органічного та нафтохімічного синтезу

Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України

pavluiksasha@gmail.com, ttv13ttv@gmail.com

Згідно з літературними даними при окисненні лігнінів трав'янистих рослин спостерігається утворення найбільш складної для розділення суміші трьох альдегідів – ваніліну, бузкового та *пара*-гідроксибензальдегідів з незначними сумарними виходами (3–24 %). Для дослідження впливу процесу окиснення на лігнін у якості вихідної лігновмісної сировини використали кукурудзяні качани, лозовидне просо (*Panicum virgatum* L.), рисову лузгу та гідролізний лігнін. Одержані експериментальні результати наведено у таблиці.

Таблиця. Вихід оксиальдегідів у процесі окиснення молекулярним киснем лігнінів різної природи

Сировина	Умови		Виходи, % (мас. на лігнін)	
	температура, °С	парціальний тиск О ₂ , МПа	ванілін	4-гідроксибензальдегід
Гідролізний лігнін	170	0,9	2,84	0,05
Просо дровидне		0,3	0,48	0,45
		0,9	3,25	0,03
Качани кукурудзи		0,3	1,05	1,46
		0,9	4,84	0,36
Рисова лузга		0,3	3,59	0,99
		0,9	10,68	0,003

Підтверджено вплив концентрації молекулярного кисню на вихід ваніліну, а також 4-гідроксибензальдегіду. Про вплив концентрації окиснювача на утворення останнього літературні дані відсутні. Як видно з наведених у таблиці даних при підвищенні парціального тиску кисню в три рази вихід ваніліну зростає у 3–6 раз залежно від лігновмісної сировини, що вказує на різний груповий склад лігнінів, що узгоджується з літературними даними. У той же час вихід 4-гідроксибензальдегіду знижується, що більш за все свідчить про підвищення селективності процесу утворення ваніліну при підвищенні парціального тиску молекулярного кисню. На жаль на даний час відсутні дані стосовно одержання ваніліну реагентними методами з наведеної у таблиці рослинної лігноцелюлозної біомаси. Вихід ваніліну при окисненні осики молекулярним киснем з парціальним тиском 0,2 МПа протягом 60 хв. становить 2,66 % (на лігнін), що близький до наших виходів при окисненні рисової лузги.

СИНТЕЗ ФУНКЦІОНАЛЬНО ЗАМІЩЕНИХ ІНДОЛІВ ЦИКЛІЗАЦІЄЮ АРИЛГІДРАЗОНІВ ПО МЕТОДУ ФІШЕРА

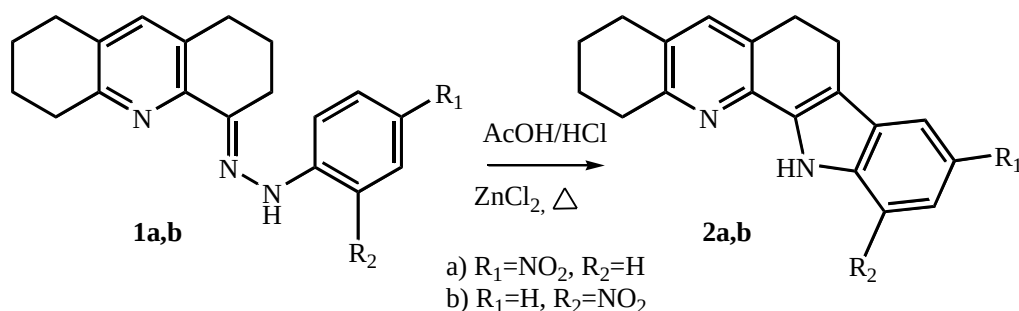
Сметанін М. В.¹, Залізна К. В.¹, Фарат О. К.², Марков В. І.¹

¹ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»

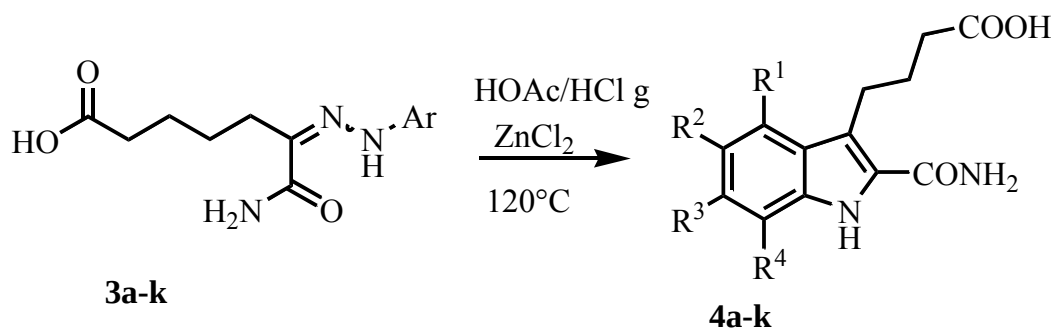
²Московский государственный университет им. Н. В. Ломоносова
smetanin-n@mail.ru

Значний інтерес до заміщених індолів пояснюється зручністю цілеспрямованого синтезу фармакологічно активних сполук на їх основі, а введення різноманітних замісників в ядро індолу може вибірково підсилювати конкретний вид активності. Перспективними вважаються похідні індолів, які наряду з протизапальною виявляють високу протимікробну активність.

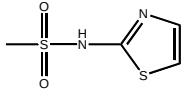
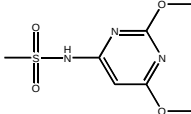
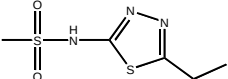
Циклізацію сполук **1a,b** по методу Фішера проводили при нагріванні в оцтовій кислоті насиченій газоподібним HCl з додаванням безводного хлористого цинку. В результаті реакції було отримано пентациклічні індолілівмісні сполуки. Виходи індолів **2a,b** не перевищують 20 % через наявність сильно дезактивуєчої нітрогрупи в арильному фрагменті гідразонів **1a,b**.



За тих самих умов було проведено індолізацію арилгідразонів **3a-l**. В результаті було отримано ряд заміщених похідних індолілмасляних кислот **4a-l**.



4a R²=Cl, R¹=R³=R⁴=H; **b** R²=R¹=R³=R⁴=H; **c** R⁴=NO₂, R¹=R²=R³=H; **d** R³=NO₂, R¹=R²=R⁴=H; **e** R¹=NO₂, R⁴=Me, R²=R³=H; **f** R²=Br, R¹=R³=R⁴=H; **g** R²=NO₂, R⁴=Br,

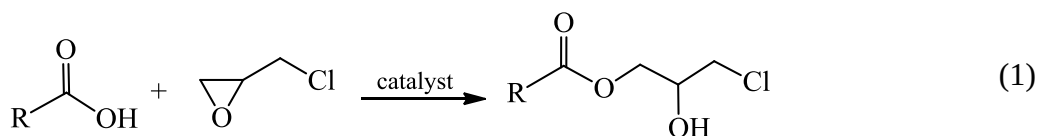
R¹=R³=H; **h** R²=SO₂NH₂C₆H₄, R¹=R³=R⁴=H; **i** R²=, R¹=R³=R⁴=H; **j** R²=, R¹=R³=R⁴=H; **k** R²=, R¹=R³=R⁴=H.

КІНЕТИКА РЕАКЦІЇ АЦЕТОЛІЗУ ЕПІХЛОРИДРИНУ В ПРИСУТНОСТІ ТРЕТИННИХ АМІНІВ У БІНАРНОМУ РОЗЧИННИКУ

Ткач А. Р., Ютілова К. С., Швед О. М.

Донецький національний університет імені Василя Стуса
tkach.an@donnu.edu.ua

Реакція карбонових кислот з епіхлоргідрином (хлорметилоксиран, ЕХГ) лежить в основі синтезу гліцидилкарбонових ефірів, які є перспективними мономерами для полімерних композицій з різноманітними властивостями та широким спектром використання. Для прогнозування властивостей матеріалів актуальним є вивчення механізму реакції оксиранів з нуклеофільними реагентами на прикладі модельної реакції (1). Ефективними каталізаторами нуклеофільного розкриття оксиранового циклу ЕХГ карбоновими кислотами є органічні нітрогенвмісні основи – амонієві солі, аміни.



Метою роботи є вивчення кінетичних закономірностей реакції епіхлоргідрину з оцтовою кислотою в присутності каталізаторів – третинних амінів та дослідження впливу полярності бінарного розчинника на ефективність каталізу реакції (1).

Об'єктами дослідження обрано серію третинних амінів із варійованим стеричним фактором: триетиламін, трибутиламін, триоктиламін. Реакцію проводили в бінарному розчиннику: епіхлоргідрин : тетрагідрофуран (ЕХГ : ТГФ) з об'ємним співвідношенням компонентів 1 : 1 за температури $(60,0 \pm 0,1)^\circ\text{C}$. Введення в систему тетрагідрофурана зменшує полярність розчинника та дає змогу оцінити вплив ступеню іонності реагуючих частинок на шляху реакції. Концентрацію каталізатора варіювали в межах $0,00125 \div 0,00500$ моль/л. Контроль за ходом процесу здійснювався методом потенціометричного кислотно-основного титрування.

Отримані експериментальні дані дали змогу встановити кінетичний закон, якому підпорядковується реакція (1). Встановлено нульовий порядок реакції за оцтовою кислотою. Розраховано спостережувані константи швидкості для чотирьох концентрацій каталізаторів, а також каталітичні константи швидкості реакції (1). Показано, що швидкість реакції нуклеофільного розкриття оксиранового циклу зворотно залежить від об'єму молекули каталізатора: реакція перебігає тим швидше, чим вища нуклеофільність амінів, тобто чим менше стеричних перешкод біля атома Нітрогену.

Проаналізовано вплив зміни полярності розчинника на каталітичну активність третинних амінів. Порівняння літературних та експериментальних даних дало змогу встановити, що каталіз ацетолізу ЕХГ третинними амінами в умовах реакції (1) в середовищі ЕХГ є більш ефективним, ніж у бінарному розчиннику (ЕХГ : ТГФ). Показано, що зниження полярності розчинника пригнічує каталіз третинними амінами реакції нуклеофільного розкриття оксиранового циклу.

Таким чином, встановлено, що підвищення нуклеофільності третинних амінів та збільшення полярності розчинника сприяють перебігу реакції (1). Отримані дані дозволяють деталізувати механізм реакції нуклеофільного розкриття оксиранового циклу карбоновими кислотами в присутності третинних амінів та зробити висновок щодо поведінки амінів на початковій стадії реакції.

СИНТЕЗ ЗАМЕЩЕННЫХ 5-АРИЛ-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ОНОВ

Толкунов А. С., Толкунов В. С., Смирнова О. В., Толкунов С. В.

Институт физико-органической химии и углехимии им. Л. М. Литвиненко

НАН Украины, г. Киев

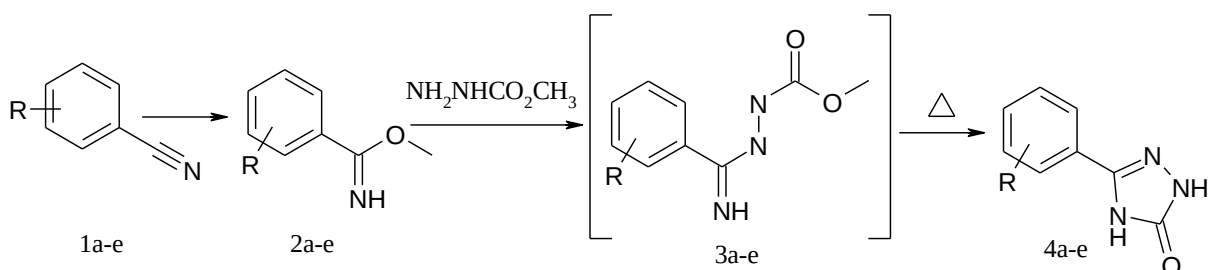
O.V.Smirnova@nas.gov.ua

1,2,4-Триазол-3-оны представляют интерес, главным образом, как фармакологически значимые соединения, активность которых зависит от характера заместителей у атомов N-2, N-4 и C-5. Среди них обнаружены вещества с противоопухолевыми свойствами, агонисты PPAR рецепторов и антагонисты нейрокинина 1 (NK_1). 2,5-Диарил-1,2,4-триазол-3-оны и 4,5-диарил-1,2,4-триазол-3-оны известны как активаторы калиевых ($Maxi-K2$) каналов. Триазолонны могут найти применение и в аналитических целях – в качестве хемосенсоров катионов Hg^{2+} и Cu^{2+} .

Цель настоящего исследования – разработка методов синтеза 5-арил-1,2,4-триазол-3-онов, содержащих в арильном кольце amino- и карбоксигруппы, легко поддающиеся дальнейшей химической модификации.

В настоящее время для получения 5-арил-1,2,4-триазол-3-онов предложено несколько общих синтетических подходов. Это окислительная циклизация семикарбазидов ариальдегидов, а также щелочная циклизация ацилсемикарбазидов.

В данной работе разработан метод получения разноразмещенных 5-арил-1,2,4-триазол-3-онов, термической циклизацией амидразонов, получаемых *in situ* из метил бензимидазов и метилкарбазата. Первоначально, при взаимодействии метил арилкарбоксиимидатов (**2a-e**) с метилкарбазатом образуются амидразоны (**3a-e**). Это быстрый процесс, проходящий при комнатной температуре, тогда как циклизация образующихся амидразонов (**3**) требует длительного выдерживания при высоких температурах. Выходы арилтриазолонов (**4a-e**) 64–78 %.



1-4 a R=3-NO₂, **b** 4-CH₃, 3-NO₂, **c** 3-Br, **d** 4-Br, **e** 4-CH₃.

Предложена оптимальная методика восстановления нитрофенилтриазолонов сульфидом натрия в диоксане. Соответствующие аминарилтриазолоны получены с выходами 74–76 %.

Карбоксипроизводные фенилтриазолонов синтезировали карбонилированием бромфенилтриазолонов окисью углерода в присутствии [1,1'-бис(дифенилфосфино)ферроцен]дихлорпалладия (II) ($Pd(dppf)Cl_2$) и триэтиламина в метаноле. Показано что, окисление толилтриазолона перманганатом калия в щелочной среде сопровождается деструкцией триазолонового цикла и приводит к терефталевой кислоте. Полученные аминофенил- и карбоксифенил-1,2,4-триазол-3-оны представляют интерес в плане изучения биологической активности, а также для дальнейшей химической модификации.

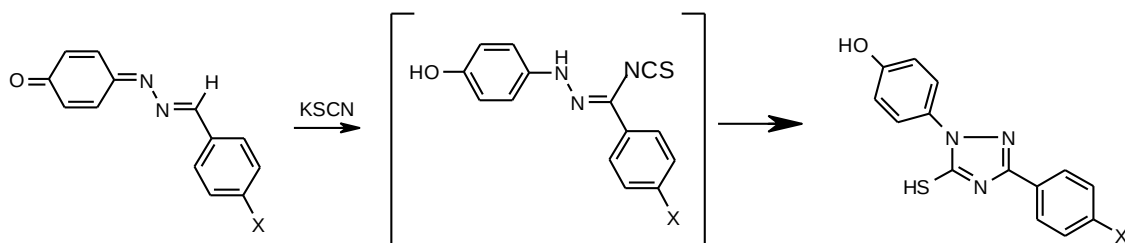
СИНТЕЗ 1,2,4-ТРИАЗОЛОВ ИЗ АРЕНАЛЬАЗИНОВ ХИНОНОВ*Труш Я. В.*, Мурашевич Б. В., Торопин Н. В., Бурмистров К. С.ГВУЗ «Украинский государственный химико-технологический университет», г. Днепр
yanatrysh1993@gmail.com

Известно, что производные 5-меркапто-1,2,4-триазолов обладают широким спектром биологической активности, в том числе фунгицидной и цитостатической. Кроме того, 3-амино-5-меркапто-1,2,4-триазол и его производные применяются в промышленности в качестве ингибиторов коррозии металлов. Методы синтеза соединений этого ряда весьма разнообразны, но в большинстве случаев многостадийны и предполагают использование труднодоступных реагентов. Поэтому разработка простой и эффективной методики синтеза замещенных 5-меркапто-1,2,4-триазолов представляет практический интерес.

Ранее нами было описано образование триазолового цикла при взаимодействии аренальазинов хинонов с моноалкиламины. Такое необычное для хиноидных систем протекание реакции с нуклеофилами обусловлено склонностью аренальазинов хинонов к реакциям 1,8-присоединения вместо классических схем 1,4- и 6,3-присоединения. Перечисленные факты позволяли предполагать образование циклических продуктов при взаимодействии аренальазинов хинонов с роданидами.

Известно, что взаимодействие N-замещенных хинониминов с роданид-ионом всегда протекает по схеме 1,4-присоединения. В некоторых случаях продукты этой реакции циклизуются с образованием различных гетероциклических соединений – тиоцианатов или изотиоцианатов, строение которых зависит от природы хинонимина и условий проведения реакции.

Нами при проведении реакции 4-[бензилиден-гидразоно]-циклогекса-2,5-диенона с роданидом калия в уксусной кислоте практически с количественным выходом получен 4-[3-фенил-5-меркапто-1,2,4-триазол-1-ил]-фенол. Строение полученных веществ доказано ЯМР ^1H и ИК-спектроскопией.

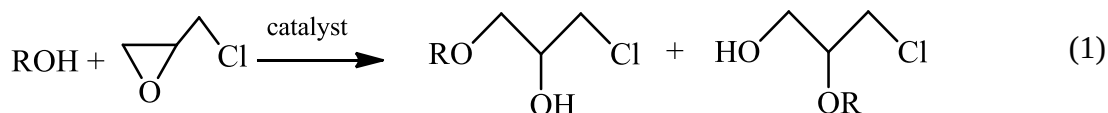


где X = Cl, Br, OCH₃, H.

Таким образом, показано, что взаимодействие аренальазинов хинонов с роданидид-йоном протекает по схеме 1,8-присоединения, с последующей самопроизвольной циклизацией, что является удобным методом синтеза практически ценных гетероциклических тиолов.

ВПЛИВ ПОЛЯРНОСТІ РОЗЧИННИКА НА ШВИДКІСТЬ КАТАЛІТИЧНОГО АЦИДОЛІЗУ ЕПІХЛОРГІДРИНУ ОЦТОВОЮ КИСЛОТОЮ*Шувакін С. І., Ютілова К. С., Швед О. М.*Донецький національний університет імені Василя Стуса
shuvakin.s@donnu.edu.ua

Епіхлоргідрин (1-хлор-2,3-епоксипропан, ЕХГ) – перспективний синтон у синтезі епоксидних смол для виробництва хемостійких композицій, лакофарбових матеріалів, клеїв, цілого ряду лікарських речовин. Розкриття оксиранового циклу ЕХГ під дією нуклеофільних реагентів є об'єктом багатьох досліджень. Особливості перебігу процесу (1) широко обговорюються у літературі.



Одним із типів каталізаторів, що застосовується в реакції (1), є галогеніди тетраалкіламонію $\text{R}_4\text{N}^+\text{Hal}^-$. Встановлено, що у розчинниках зі слабкою та середньою полярністю четвертинні амонійні солі переважно перебувають у вигляді іонних пар, ступінь дисоціації яких залежить від полярності розчинника, концентрації солі та радіуса іонів. Проте експериментальні дані, що стосуються впливу розчинника на швидкість та механізм реакції (1), є досить обмеженими та суперечливими.

Метою даної роботи є дослідження впливу полярності розчинника на швидкість реакції нуклеофільного розкриття оксиранового циклу ЕХГ оцтовою кислотою у присутності йодидів тетраетиламонію та тетрабутиламонію кінетичними методами.

Об'єктами дослідження є оцтова кислота, ЕХГ, $(\text{C}_2\text{H}_5)_4\text{NI}$, $(n\text{-C}_4\text{H}_9)_4\text{NI}$. Дослідження проводилось при температурі 60 °С у середовищі бінарного розчинника, що складається з ЕХГ та тетрагідрофурану (ТГФ). Вміст ТГФ складав 10, 25 та 50 об. %. Кінетична концентрація четвертинних амонієвих солей варіювалася в діапазоні 0,00125 ÷ 0,00500 моль/л при постійній концентрації оцтової кислоти 0,22 моль/л. Контроль за перебігом реакції здійснювався методом кислотно-основного рН-потенціометричного титрування.

В результаті проведеного дослідження визначено, що реакція (1) в присутності четвертинних амонієвих солей має нульовий порядок за кислотним реагентом. Встановлено, що збільшення об'ємної частки ТГФ у розчині призводить до збільшення спостережуваної і каталітичної константи швидкості реакції, тобто введення малополярного компонента у реакційну систему сприяє збільшенню каталітичної активності четвертинних амонієвих солей. Отримано кореляційні рівняння для прогнозування каталітичної активності йодидів тетраетиламонію та тетрабутиламонію у бінарному розчиннику.

МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУРИ 4-ЗАМІЩЕНОГО 9,10-АНТРАХІНОНУ В ЗАЛЕЖНОСТІ ВІД РОЗРАХУНКУ БІОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ

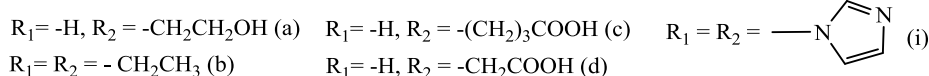
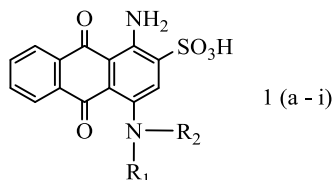
Шупенюк В. І., Тарас Т. М., Олексюк Г. І.

Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника

76000, Івано-Франківськ, вул. Шевченка, 57

taras.tanya.if@gmail.com

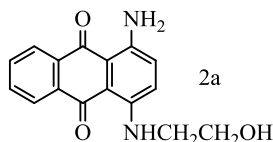
З допомогою програми PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances – прогноз спектра біологічної активності органічних сполук) спрогнозована біологічна активність синтезованих сполук 1(a-i), які були одержані нуклеофільним заміщенням бромом бромамінової кислоти.



Всі синтезовані сполуки проявляють протівірусний ефект (Antiviral). Для сполук (1a, 1c, 1d) доцільно виконати експериментальні дослідження антипротозойного (Antiprotozoal (Trypanosoma)) ефекту, а для сполук (1d, 1i) доцільність лікувального ефекту гострих неврологічних розладів (Acute neurologic disorders treatment). Сполуки (1a, 1b, 1d, 1i) можуть використовуватись, як потенційні Р2Т пуринові рецептори (Purinergetic P2T antagonist). Проте тільки похідне імідазолу 1i немає притаманних більшості барвників токсичного, тератогенного, мутагенного і канцерогенного ефектів.

Біологічна активність	Ймовірність наявності біологічної активності Pa>60 %				
	1a	1b	1c	1d	1i
Antiprotozoal (Trypanosoma)	66,2	-	70,8	78,3	-
Antiviral	84,0	84,2	82,5	83,7	71,6
Acute neurologic disorders treatment	-	-	-	64,0	64,7
Platelet aggregation stimulant	70,6	75,7	76,2	73,3	-
Purinergetic P2T antagonist	68,6	73,5	-	69,1	64,8

Відщеплення сульфогрупи було проведено $Na_2S_2O_4$ шляхом дисульфування сполуки 1a з виходом сполуки 2a – 88 %.



Згідно з результатами *in silico* прогнозування біологічної активності за програмою PASS можна зробити висновок, що сполука 2a проявляє потенційну антинеопластичну активність Pa 72,7 %, яка імовірно реалізується інгібуючою дією на ряд ферментів (Gluconate 2-dehydrogenase (acceptor), NAD(P)+-arginine ADP-ribosyltransferase, Membrane permeability) та зв'язуванням з субстратами (CYP2J, CYP2C12, UGT1A9).

DFT-ДОСЛІДЖЕННЯ НУКЛЕОФІЛЬНОСТІ ТРЕТИННИХ АМІНІВ У РЕАКЦІЇ КВАТЕРНІЗАЦІЇ

Якута П. О., Ютілова К. С., Швед О. М.

Донецький національний університет імені Василя Стуса
iakuta.p@donnu.edu.ua

Третинні аміни в органічній хімії виступають як реагенти або каталізатори цілого ряду реакцій. Біологічна і фармакологічна активність багатьох третинних амінів знаходить широке застосування у медицині. Аміни використовують як барвники і індикатори у промислових і дослідних цілях. Реакційна здатність амінів, в першу чергу, залежить від їх нуклеофільності, що зумовлена, головним чином, основністю, стеричною доступністю, поляризованістю атома Нітрогену. Зручною моделлю для кількісного визначення нуклеофільності третинних амінів R_3N є реакція їх кватернізації (1), в якій утворення четвертинних амонієвих солей відбувається під дією алкилгалогенідів $R'Hal$.



Метою роботи є встановлення впливу нуклеофільності третинних амінів як функції структури замісників на швидкість перебігу реакції кватернізації квантовохімічними методами. Об'єктами дослідження обрано метилбромід, амоніак і серія третинних амінів: триметиламін, диметилетиламін, метилдиетиламін, триетиламін. Розрахунки проведено методом DFT в наближенні B3LYP/6-31+G** (газова фаза). Знайдено перехідні стани (ПС) реакції (1) (рис.). Належність локалізованих ПС відповідній реакції доведена спусками за процедурою IRC у долини реактантів і продуктів. Геометрія розрахованих ПС відповідає механізму S_N2 .

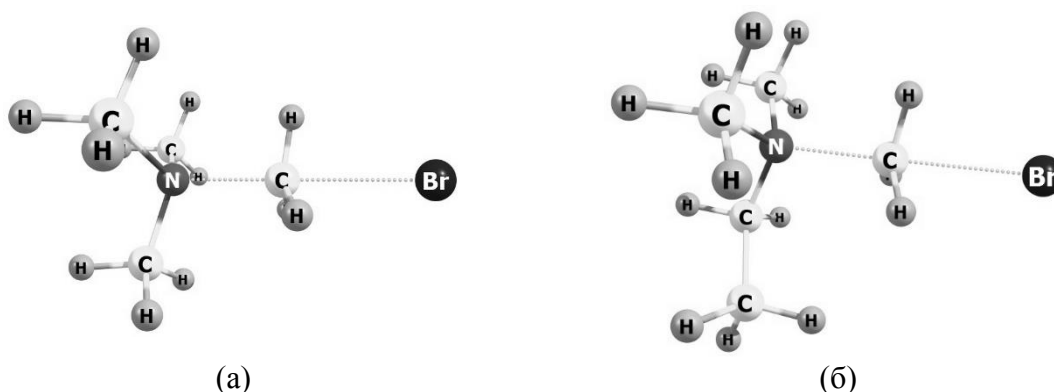


Рис. ПС реакції триметиламіну (а) та етилдиметиламіну (б) з метилбромідом

Результати проведених DFT-розрахунків показують, що збільшення об'єму замісників біля атома Нітрогену спричиняє зростання енергії активації і, відповідно, зниженню швидкості реакції кватернізації третинних амінів метилбромідом. Виходячи з термодинамічних параметрів реакції (1), встановлено залежність константи швидкості кватернізації третинних амінів від стеричних параметрів замісників. Отримані дані є основою прогнозування реакційної здатності третинних амінів у реакціях нуклеофільного заміщення.

**PHYSICAL CHEMISTRY /
ФІЗИЧНА ХІМІЯ**

**ВПЛИВ ТЕРМІЧНОЇ ОБРОБКИ НА КАТАЛІТИЧНУ АКТИВНІСТЬ
ВІДНОВЛЕНОГО N-ДОПОВАНОГО БАГАТОШАРОВОГО ОКСИДУ ГРАФЕНУ
В МОДЕЛЬНІЙ РЕАКЦІЇ ГІДРУВАННЯ ЕТИЛЕНУ**

Абакумов О. О., Бичко І. Б., Стрижак П. Є.

Інститут фізичної хімії ім. Л. В. Писаржевського НАН України
abakumov0aa@gmail.com

Розвинута площа поверхні, величина якої може складати $2000 \text{ м}^2/\text{г}$, та мезопориста структура відновленого оксиду графену (ВОГ) викликають інтерес щодо його використання як носія каталізаторів. Показано, що ВОГ характеризується також власною каталітичною активністю в реакціях гідрування нітросполук, алкінів і, зокрема, олефінів. Структура ВОГ залежить від температури термічної обробки. Метою даного дослідження було встановлення впливу попередньої термічної обробки на каталітичну активність ВОГ в модельній реакції гідрування етилену.

Зразки ВОГ було отримано з оксиду графіту (ОГ), синтезованим за модифікованим методом Хамерса, наступним чином: гідразин-гідрат об'ємом 10 мл додавали в 1 л водної суспензії ОГ з концентрацією 1 г/л і кип'ятили протягом 1 години. Отриманий матеріал промивали 2 літрами дистильованої води та просушували за 110°C протягом 12 годин. Синтезований продукт позначено як Gr. Матеріал Gr було оброблено в атмосфері водню протягом 1 години за 400°C . Термічно оброблений зразок було позначено як Gr-H2. Матеріали Gr та Gr-H2 було охарактеризовано ТЕМ та СЕМ мікроскопіями, елементним аналізом, порошковою дифрактометрією, Раман-, ІЧ та РФЕС-спектроскопіями, питому площу поверхні встановлено за ізотермами адсорбції азоту. Аналіз отриманих даних показує, що термообробка призводить до збільшення розмірів кристалітів та співвідношень C/N і C/O, а також зменшення вмісту дефектів та питомої площі поверхні.

Каталітичну активність зразків було встановлено в проточному трубчатому реакторі в температурному діапазоні $25\text{--}400^\circ\text{C}$. Співвідношення швидкостей потоку етилену до водню становило 1:9, відповідно, при загальній швидкості потоку 50 мл/хв. Наважки Gr та Gr-H2 становили 110 та 80 мг, відповідно. Аналіз даних, представлених на Рис., показує, що матеріал Gr не проявляє каталітичної активності на всьому діапазоні температур, в той час як у випадку Gr-H2 початкова швидкість реакції становила $0.1 \cdot 10^{-8} \text{ моль} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{м}^{-2}$ за 50°C і зі збільшенням температури досягала значення $10.0 \cdot 10^{-8} \text{ моль} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{м}^{-2}$ за 300°C . Подальше збільшення температури призводить до зменшення швидкості реакції. Таким чином, продемонстровано, що попередня термічна обробка призводить до активації ВОГ в реакції гідрування етилену.

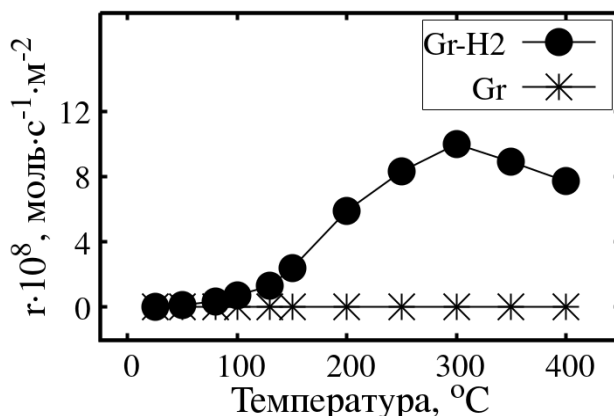


Рис. Температурна залежність швидкості реакції гідрування етилену на Gr та Gr-H2

ІТК РЕАКЦІЇ СУЛЬФОНІЛЮВАННЯ БІСФЕНОЛІВ В ДВОФАЗНОМУ СЕРЕДОВИЩІ ВОДА-ДИХЛОРЕТАН

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

Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України
anishchvic@gmail.com

Інверсійний трансфазний каталіз (ІТК) на відміну від класичного міжфазного каталізу дозволяє проводити органічні реакції в водній фазі. Раніше нами було досліджено ІТК бензоїлювання та фосфорилування фенолів в двофазних системах вода-дихлорметан в присутності піридин-1-оксидів й встановлено оптимальні умови проведення синтезу відповідних естерів.

У даній роботі було вивчено реакцію сульфонілювання бісфенолів в двофазних системах вода-дихлорметан. Як каталізатори були використані пара-заміщенні піридин-1-оксиди. Каталітичний процес перебігав згідно схеми наведеної на рис. Швидкість визначальною стадією була реакція (k_1) утворення катіону N-сульфонілоксипіридинію в органічній фазі. Вихід продукту реакції для всіх каталізаторів складав $>95\%$. Встановлено, що найефективнішим каталізатором сульфонілювання в умовах ІТК є 4-диметиламінопіридин-1-оксид.

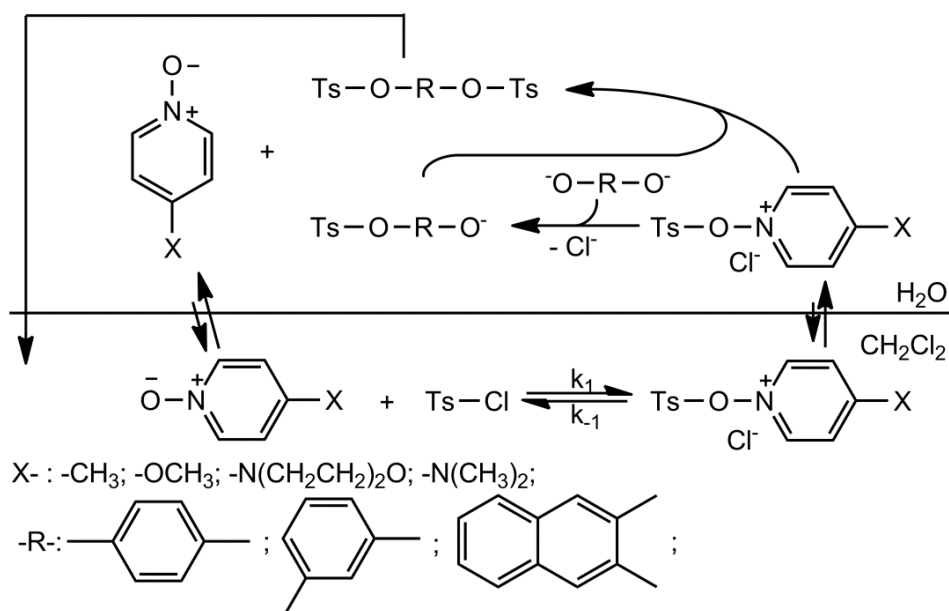


Рис. Схема ІТК процесу тозилування бісфенолів в двофазній системі вода-дихлорметан в присутності піридин-1-оксидів

З використанням 4-диметиламінопіридин-1-оксиду було проведено сульфонілювання гідрокінону та 2,3-дігідроксинафталіну з виходом продукту $>90\%$. Будову отриманих продуктів було підтверджено за допомогою методів ІЧ- та ПМР спектроскопії. В усіх випадках отримано бісульфонат, тобто обидві гідроксильні групи сульфонільовано.

Таким чином, продемонстровано, що метод ІТК може бути успішно застосовано для здійснення сульфонілювання бісфенолів при кімнатній температурі у водному середовищі та з високим виходом відповідного бісульфонату.

**ПОЛУЧЕНИЕ МИКРО-МЕЗОПОРИСТЫХ АЛЮМОСИЛИКАТОВ
SBA-15/ZSM-5 ЧАСТИЧНОЙ ЦЕОЛИТИЗАЦИЕЙ SBA-15**

Баракوف Р. Ю., Щербань Н. Д., Яремов П. С., Филоненко С. Н., Цырина В. В.

Институт физической химии им. Л. В. Писаржевского НАН Украины

barakov.r.yu@gmail.com

В последние годы одной из наиболее актуальных задач в области химии цеолитоподобных катализаторов является поиск и разработка способов получения микро-мезопористых алюмосиликатов (ММАС). Эти материалы в определенной степени сочетают свойства цеолитов и мезопористых молекулярных сит (ММС), в частности, содержат сильные кислотные центры, а также мезопоры, наличие которых способствует повышению скорости диффузии и увеличению доступности каталитически активных центров для молекул реагентов. Перспективным подходом для получения ММАС является цеолитизация (кристаллизация в направлении образования цеолитной фазы) аморфного вещества каркаса ММС типа SBA-15 в присутствии молекулярного темплата (например, тетрапропиламмоний гидроксида, ТРАОН). Целью настоящей работы является выяснение влияния условий цеолитизации темплатсодержащего ММС SBA-15 на структурно-сорбционные и кислотные свойства полученных ММАС SBA-15/ZSM-5.

Цеолитизацию Si-SBA-15 (в ZSM-5) проводили пропиткой ММС водным раствором ТРАОН, который содержит гидроксоалюминат-ионы. Затем гель высушивали и подвергали термopаровой обработке (ТПО) (образцы находились в контакте с парами воды) при 100–120 °С. Подбор условий синтеза, в частности использование темплатсодержащего ММС, разбавленных растворов ТРАОН (мольное отношение ТРАОН/Si = 0,07–0,1), снижение температуры термopаровой обработки до 100–120 °С позволил провести частичную цеолитизацию SBA-15 и сохранить гексагональную мезоструктуру исходного материала. Это дало возможность увеличить концентрацию и силу доступных для объемных молекул кислотных центров Бренстеда (концентрация – до 32 мкмоль/г, 2,6-ди-*трет*-бутилпиридин полностью десорбируется при 400 °С) и Льюиса (концентрация 28–40 мкмоль/г, полная десорбция зонда – 400 °С) в полученных ММАС, по сравнению с исходным AlSi-SBA-15 (центры Бренстеда – 26 мкмоль/г, Льюиса – 13 мкмоль/г, полная десорбция зонда – 350 °С). Уменьшение отношения ТРАОН/Si в сухом геле от 0,1 до 0,07 приводит к увеличению степени пространственной упорядоченности мезоструктуры ММАС и, соответственно, к повышению степени однородности размеров мезопор.

Для выявления отличий в кислотности полученных ММАС от механических смесей фаз цеолита (ZSM-5) и ММС (AlSi-SBA-15), экспериментальные значения концентрации кислотных центров средней силы и сильных (по термопрограммированной десорбции аммиака) образцов были сопоставлены с соответствующими расчетными величинами, полученными исходя из предположения о присутствии отдельных фаз цеолита и ММС в ММАС. При относительно низких значениях степени цеолитизации (до 0,25) превышение поверхностной концентрации кислотных центров над расчетными величинами, вероятно, связано с наличием в образцах ММАС, кроме кристаллитов ZSM-5, также рентгеноаморфных прекурсоров цеолита, обладающих более высокой концентрацией кислотных центров, в сравнении с аморфным каркасом AlSi-SBA-15. При более высоких степенях цеолитизации (0,25–0,45) заниженные значения поверхностной концентрации кислотных центров в образцах ММАС в сравнении с расчетными величинами могут быть связаны с более высокой дисперсностью кристаллов цеолита в образцах ММАС, в сравнении с цеолитом ZSM-5 (средний размер ~1,5 мкм).

РЕГРЕССИОННЫЕ МОДЕЛИ QSAR

Бердник М. И., Дяченко А. В., Иванов В. В.

Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина

berdnikm@i.ua

На сегодняшний день задача получения регрессионных уравнений типа «структура-свойство» становится актуальной во многих отраслях химии. Регрессионные модели незаменимы и при разработке новых лекарственных соединений и при поиске материалов с заданными свойствами. При этом основная масса расчетов проводится с использованием стандартного метода наименьших квадратов (*Ordinary Least Squares*, **OLS**). Однако, на сегодняшний день, в научной литературе обсуждается также и ряд альтернативных подходов к построению регрессионных уравнений. Среди них метод наименьших модулей (*Least Absolute Deviation*, **LAD**), регрессия на главных компонентах (*Principle Component Regression*, **PCR**), неполный метод наименьших квадратов (*Partial Least Squares*, **PLS**), метод **LASSO** (*Least Absolute Selection and Shrinkage Operator*), метод наименьших углов (*Least Angle Regression Stagewise*, **LARS**), метод ортогональных расстояний (*Orthogonal Distance Regression*, **ODR**) и т. д. Вместе с тем, не смотря на многообразие методов, в литературе практически не представлены работы, в которых бы обсуждалась *сравнительная* эффективность и применимость этих подходов. Целью настоящей работы было изучение данных вопросов в применении к конкретным проблемам поиска количественных соотношений структура-свойство в химии. Для этого нами разработан комплекс компьютерных программ реализующий вышеперечисленные методы. Рассматривались проблемы построения регрессионных уравнений для описания pK_a , температур кипения, давления насыщенного пара и т. д. органических соединений различных классов.

Для иллюстрации приведем некоторые результаты, касающиеся описания pK_a для простой тестовой выборки пятнадцати органических кислот. На основании методов **LASSO** и **LARS** из более чем двух тысяч дескрипторов было отобрано три: заряд на кислороде карбонильной группы (x_1), оксигруппы (x_2) и на водороде оксигруппы (x_3). По результатам **OLS** и **LAD** расчетов были получены следующие уравнения. Однопараметрические:

$$\text{OLS: } pK_a = -24.44 - 91.35x_2, \quad R^2 = 0.852, \quad Q^2 = 0.805, \quad (1)$$

$$\text{LAD: } pK_a = -20.53 - 79.06x_2, \quad R^2 = 0.839, \quad Q^2 = 0.798. \quad (2)$$

Трехпараметрические:

$$\text{OLS: } pK_a = -1.08 - 19.93x_1 - 46.80x_2 - 67.61x_3, \quad R^2 = 0.971, \quad Q^2 = 0.746, \quad (3)$$

$$\text{LAD: } pK_a = -4.28 - 17.22x_1 - 55.12x_2 - 61.17x_3, \quad R^2 = 0.969, \quad Q^2 = 0.201. \quad (4)$$

Здесь R^2 и Q^2 коэффициенты детерминации. Причем Q^2 соответствует процедуре перекрестного оценивания (*leave-one-out cross validation*, LOO-CV). Как видим, оба однопараметрических уравнения полученных в **OLS** и **LAD** практически одинаковы в прогностической способности. Трехпараметрическое уравнение **OLS** достаточно точно описывает искомое свойство, в то время как уравнение **LAD** оказывается неадекватным, $R^2 - Q^2 \approx 0.8$. Применение метода **PCR** показало, что использование двух сингулярных чисел является оптимальным для данной задачи $R^2 \approx Q^2 \approx 0.95$.

**ВЛАСТИВОСТІ НІКЕЛЕВИХ ІНТЕРКАЛАТІВ
ШАРУВАТИХ КРИСТАЛІВ In_4Se_3** *Болезюк В. Б., Ковалюк М. З.*Інститут проблем матеріалознавства НАН України, Чернівецьке відділення
chimsp@ukrpost.ua

Моноселенід індію різного формульного складу належить до шаруватих кристалів, які характеризуються різко анізотропними властивостями. Кристалічна структура таких сполук дозволяє за допомогою інтеркалювання цілеспрямовано змінювати їх фізичні властивості. Шаруваті напівпровідники, інтеркальовані атомами 3d-металів дають можливість формувати структури з почерговими шарами магнітної домішки та немагнітного напівпровідника, причому шари основного матеріалу виконують роль ізоляції металевих прошарків.

Інтеркалювання нікелем шаруватих кристалів In_4Se_3 проведено електрохімічним методом «тягнучого» електричного поля в гальваностатичному режимі. В процесі інтеркалювання зразки In_4Se_3 знаходились в постійному магнітному полі величиною 4 кЕ. Концентрація інтеркальованого нікелю визначалась за кількістю електрики, що пройшла через зразок в процесі впровадження

Встановлено, що залежності питомого магнітного моменту для зразків $\text{Ni}_{0.2}\text{In}_4\text{Se}_3$ інтеркальованих в магнітному полі, які мають форму гістерезисних петель (рис.). Слід відмітити, що для зразків $\text{Ni}_{0.2}\text{In}_4\text{Se}_3$ інтеркальованих без магнітного поля дані залежності не спостерігаються.

Характер залежності $m = f(H)$, отриманої вздовж шарів інтеркалянта $\text{Ni}_{0.2}\text{In}_4\text{Se}_3$, типовий для феромагнітної взаємодії між атомами кобальту, а питомий магнітний момент насичення $m_s = 0,00562 \text{ emu/g}$. У випадку вимірювань перпендикулярно площині шарів, поведінка $m = f(H)$ відповідає феромагнітній взаємодії між шарами, а намагніченість становить $m_s = 0,00698 \text{ emu/g}$. Величина коерцитивної сили становить $H_c = 101,03$ ерстед та $H_c = 48,84$ ерстед відповідно вздовж та впоперек площині шарів зразків $\text{Ni}_{0.2}\text{In}_4\text{Se}_3$, що характерно в обидвох випадках для магнітотвердих феромагнетиків.

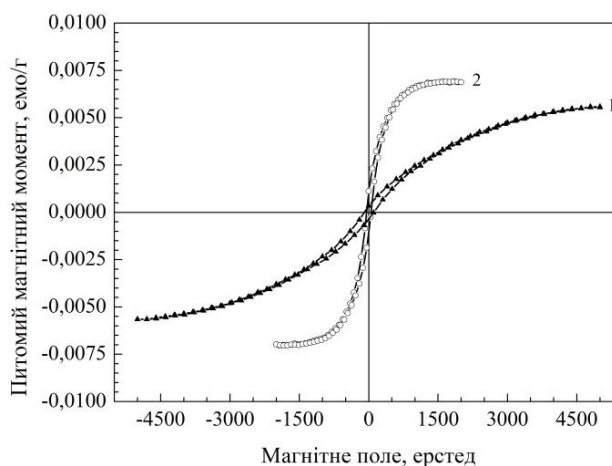


Рис. Графік залежності питомого магнітного моменту від напруженості магнітного поля для інтеркалатів $\text{Ni}_{0.2}\text{In}_4\text{Se}_3$, виміряна вздовж (1) та впоперек (2) площини шарів

**ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ТА ФОТОКАТАЛІТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ
НАНОКОМПОЗИТІВ C/TiO₂, S/TiO₂ ТА C/S/TiO₂**

Бондаренко М. В.¹, Халявка Т. О.¹, Петрик І. С.², Щербань Н. Д.³

¹Інститут сорбції та проблем ендоекології НАН України,
вул. генерала Наумова, 13, 03164 Київ, Україна, bondarenko_maryna@ukr.net

²Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка НАН України,
вул. Генерала Наумова, 17, 03164 Київ, Україна

³Інститут фізичної хімії імені Л.В. Писаржевського НАН України,
пр. Науки, 31, 03028 Київ, Україна

Відомо, що діоксид титану широко використовують як фотокаталізатор, завдяки його термічній стабільності, нетоксичності і дешевизні. Однак він має кілька серйозних недоліків, а саме недостатньо високий квантовий вихід реакції, значну ширину забороненої зони, високу швидкість електронно-діркової рекомбінації та поглинання лише УФ світла, що призводить до його фотокаталітичної активності лише в УФ-області спектра, тому більшість досліджень спрямовані на вирішення проблеми розширення діапазону поглинання діоксиду титану. Останнім часом увага науковців зосереджена на використанні методу допування TiO₂ двома та більше елементами, такими як N, S, C, F та ін. Цей спосіб призводить до появи поглинання у видимій області спектра, що пов'язано з утворенням нових електронних рівнів вище валентної зони TiO₂. Тому метою нашої роботи було одержання зразків діоксиду титану, модифікованих сіркою і вуглецем та дослідження їх фізико-хімічних і фотокаталітичних властивостей.

Накомпозитні матеріали одержано методом термічного гідролізу титан етилату чи титан бутилату з добавками тіосечовини та карбону. Зразки було позначено як C/TiO₂ (кількість вуглецю варіювала), S/TiO₂ (кількість сірки варіювала) та C/S/TiO₂ (кількість сірки варіювала). Порошки було досліджено з використанням методів РФА, СЕМ, ТЕМ, ВЕТ, UV-VIS та ІЧ-спектроскопії.

В усіх випадках було одержано висококристалізовані матеріали. Виявлено, що при допуванні діоксиду титану вуглецем формувалася лише фаза анатазу, при додаванні сірки – анатазу та рутилу, для трьохкомпонентних зразків – анатазу та рутилу, причому фазу рутилу фіксували для зразків з підвищеним вмістом сірки. Піків, характерних для брукіту, не спостерігалось в жодному випадку. Розміри часток наноккомпозитів зменшуються порівняно з чистим діоксидом титану. Так, добавки вуглецю у двокомпонентних системах сприяють одержанню наноккомпозитів з розмірами часток 14–16 нм, сірки – 9–10 нм, у разі трьохкомпонентних порошоків формуються частки розмірами 6–9 нм.

В ізотермах сорбції-десорбції азоту для усіх зразків наявна петля гістерезису, що свідчить про їх мезопорувату структуру. Модифікування діоксиду титану вуглецем або сіркою у випадку двокомпонентних і трикомпонентних композитів сприяє підвищенню питомої поверхні, при цьому у випадку двокомпонентних зразків середній об'єм пор збільшується, а радіус- зменшується, а для трьохкомпонентних – навпаки.

Для всіх зразків виявлено батохромний зсув у порівнянні зі смугою поглинання чистого TiO₂, ширина забороненої зони зменшується. Фотокаталітичну активність матеріалів вивчали на прикладі модельної реакції деструкції катіонного барвника сафраніну Т у водних розчинах при УФ та видимому опроміненні. Модифіковані зразки виявилися більш активними при УФ опроміненні у порівнянні з чистим TiO₂. Крім того, вони проявили активність при видимому опроміненні. Підвищення фотокаталітичної активності модифікованих зразків може бути пов'язано зі зменшенням ширини забороненої зони, міжфазовим розподілом зарядів, з участю добавок в інгібуванні процесу рекомбінації електронів та дірок та подовженні тривалості їх існування. Механізм підвищення фотокаталітичної активності композитів на видимому світлі можна пояснити формуванням додаткових енергетичних рівнів в забороненій зоні TiO₂.

ПОХІДНІ КУМАРИНУ ЯК СУБСТРАТИ ЛАККАЗИ *TRAMETES VERSICOLOR*Бураков І. М.¹, Лесишина Ю. О.¹, Цяпало О. С.¹, Фрасинюк М. С.², Шендрик О. М.¹¹Донецький національний університет імені Василя Стуса²Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України

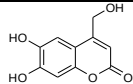
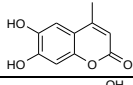
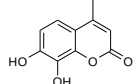
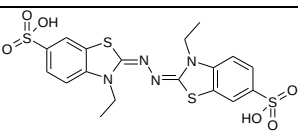
burakov.i@donnu.edu.ua

Лаккази каталізують окиснення великого переліку субстратів, які можна поділити на дві групи: донори електронів і протонів (феноли та аміни) та донори електронів (фероціаніди, 2,2'-азинобіс(3-етилбензтіазолін-6-сульфонової кислоти) діамонієва сіль (АБТС)). Типовими субстратами лакказ різного походження є гідрохінон (ГХ), сиригальдазин, АБТС тощо, які найбільш ефективно окиснюються молекулярним киснем в присутності ферменту, а кінетичні параметри реакції характеризуються низьким значенням константи Міхаеліса (K_m) і високим числом обертів ферменту (k_{cat}).

У даній роботі визначено субстратну специфічність ферментного препарату «*Laccase from Trametes versicolor*» (фірми «Sigma», Німеччина) по відношенню до вперше синтезованих похідних кумарину: 7,8-дигідрокси-4-гідроксиметилкумарину; 6,7-дигідрокси-4-гідроксиметилкумарину та 6,7-дигідрокси-4-метилкумарину як потенційних сполук з антиоксидантними та/або медіаторними властивостями.

Кінетику реакцій ферментативного окиснення похідних кумарину, ГХ та АБТС молекулярним киснем досліджували методом UV-VIS-спектрофотометрії. Реакцію проводили в цитратному буферному розчині з рН – 4,5; розчини субстрату і ферменту змішували безпосередньо в кюветі спектрофотометру; концентрації субстрату в реакційній суміші в початковий момент часу змінювали в інтервалі 10^{-5} – 10^{-4} М; концентрація лаккази була постійною і становила 60 мг/л; тиск атмосферний; температура – 35 °С. Початкову швидкість реакції окиснення субстратів визначали як тангенс кута нахилу початкової прямолінійної ділянки кінетичної кривої; максимальну швидкість (V_{max}) та константу Міхаеліса (K_m) розраховували, виходячи з рівняння Міхаеліса-Ментен, лінеаризованого у подвійних обернених координатах Лайнуївера-Берка. Результати дослідження представлені в таблиці.

Таблиця

Субстрат	Структурна формула	V_{max} , мкМ·с ⁻¹	K_m , мМ
6,7-дигідрокси-4-гідроксиметилкумарин		0,08	428
6,7-дигідрокси-4-метилкумарин		0,19	558
7,8-дигідрокси-4-гідроксиметилкумарин		0,28	223
гідрохінон		0,83	394
АБТС		1,37	86

З даних таблиці видно, що всі досліджувані кумарини ефективно окиснюються у присутності лаккази; швидкість реакції залежить від структури кумарину і є меншою у порівнянні з типовим субстратом лаккази – гідрохіноном; найбільшу спорідненість та каталітичну активність ферментний препарат проявляє до 7,8-дигідрокси-4-гідроксиметилкумарину.

ИЗБИРАТЕЛЬНОЕ ХИМИЧЕСКОЕ РАСТВОРЕНИЕ СПЛАВА БрБ2

Варфоломеева Ю. А.¹, Егорова Л. М.¹, Ларин В. И.²¹Харьковский национальный автомобильно-дорожный университет²НИИ химии при ХНУ им. В. Н. Каразина

lilya15041935@gmail.com

Сложности, возникающие при размерной обработке поверхности медных сплавов, где применяются технологии химического травления требуют детального изучения химического растворения бериллиевых бронз в растворах электролитов. С целью оптимизации процесса травления бериллиевой бронзы были проведены исследования химического растворения сплава БрБ2 в растворах различного состава. Растворение сплава БрБ2 в растворах FeCl_3 значительно выше, чем в других исследуемых растворах травления, что обусловлено высокой окислительной способностью Fe^{3+} . Обоснована необходимость хлоридной добавки для поддержания растворения медной компоненты сплава БрБ2 и кислотности раствора для ионизации бериллия.

Определена селективность растворения компонентов сплава БрБ2 и модификация поверхности сплава при химическом травлении в хлоридных растворах, что представлено в табл.

Таблица. Результаты определения содержания ионов меди (II) и бериллия в травильных растворах (время травления бериллиевой бронзы 20 мин.; 25 °С)

Содерж. ионов, г/л	Составы растворов, моль/л		
	0,5 FeCl_3 + 1,5 KNO_3 + 0,5 HCl	0,5 FeCl_3 + 1,5 KNO_3	0,5 FeCl_3
Be^{2+}	0,0413	0,047	0,0964
Cu^{2+}	3,53	4,7	5,04
коэффициенты селективности компонентов сплава			
Z_{Be}	0,6	0,5	0,95
Z_{Cu}	1,7	2,04	1,06

Рассчитанные значения коэффициентов селективности бериллия и меди имеют наиболее близкие значения в растворе состава: 0,5 М FeCl_3 .

Методом электронно-зондового анализа были исследованы поверхность электродов из сплава БрБ2 после травления. Не наблюдается образования плотных пассивирующих слоев на поверхности бериллиевой бронзы после травления во всех исследуемых растворах, что можно видеть на микрофотографиях поверхности из БрБ2 (рис. а-в).

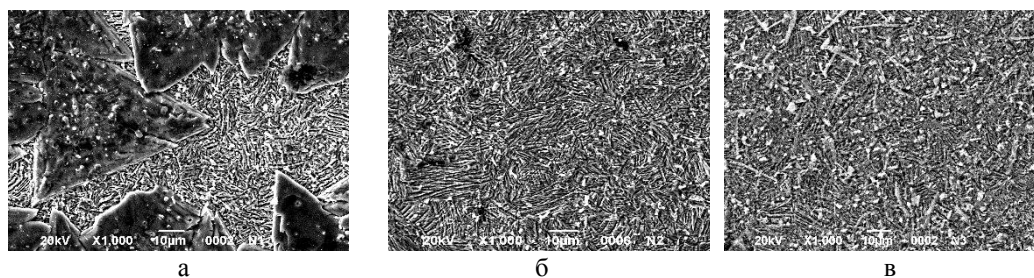


Рис. Микрофотографии поверхности бронзы БрБ2 после травления при $\omega=74 \text{ об} \cdot \text{с}^{-1}$ в растворах состава, моль/л: а – 0,5 FeCl_3 + 1,5 KNO_3 ; б – 0,5 FeCl_3 + 1,5 KNO_3 + 0,5 HCl ; в – 0,5 FeCl_3 + 1,5 KNO_3 + 0,5 NH_4Cl

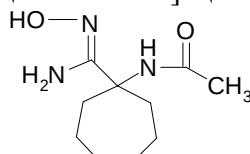
Показана возможность равномерного и высокоскоростного химического растворения бериллиевой бронзы в кислой среде в присутствии ионов хлора, нитрат-ионов и ионов-окислителя Fe^{3+} .

ТЕОРЕТИЧНЕ ТА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОННИХ СПЕКТРІВ ПОГЛИНАННЯ КУПРУМУ (II)

Васильєва А. В., Христенко І. В., Іванов В. В.

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна
anastasia.vasileva1997@gmail.com

Купрум (II) представлено у багатьох біологічних системах і, як це добре відомо, цей метал грає значну роль у біохімічних процесах. Практичне застосування знайдено для багатьох різноманітних комплексів купруму. Серед них і речовини, що проявляють біологічну активність. В цьому сенсі цікавими є ліганди, до складу яких входять амідоксимна $-C(NO)(NH_2)$ функціональна група. Див. структуру N-[1-[аміно(гідроксиіміно)-метил]циклогептил]ацетаміду.



Для амідоксимів характерні прояви амфотерних властивостей та утворення з іонами металів (зокрема з купрумом) досить стійких комплексів, в яких іон металу зв'язаний як з оксимоною групою, так і з аміногрупою.

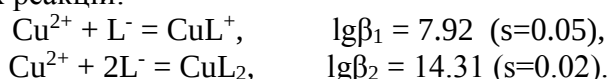
Глибоке розуміння структури, стійкості та спектральних властивостей комплексних сполук Cu(II) неможливе без використання теоретичних (неемпіричних) розрахункових методів. Тут слід зазначити, що на теперішній час структура навіть найпростіших (і найпоширеніших) комплексів Cu(II) в водневих розчинах є предметом теоретичних досліджень та дебатов. Ускладнюючою обставиною для таких розрахунків є необхідність урахування значних кореляційних ефектів. Наявність «важкого» ядра атому купруму дозволяє очікувати прояву певних релятивістських ефектів. Крім того, розрахунки спектральних властивостей, потребують використання досить розвинених базисних функцій, що включають необхідний набір дифузійних та поляризаційних складових.

Виходячи з цього нами, за допомогою програми GAMESS, було проведено ряд тестових DFT-B3LYP розрахунків різноманітних комплексів Cu(II). Серед них $[Cu(H_2O)_4]^{2+}$, $[Cu(H_2O)_6]^{2+}$, $CuCl_2$, $CuCl_4^{2-}$, $[Cu(NH_3)_n(H_2O)_{6-n}]^{2+}$, $n = 1, 2$, та комплекс із вище вказаним лігандом на основі амідоксима. Для ілюстрації приведемо невеличку таблицю що описує нижче збудження в комплексі $[Cu(H_2O)_4]^{2+}$:

Базис	SBKJC	SBKJC	MCP-TZP	MCP-TZP	сс-pVTZ	сс-pVTZ
λ (нм)	717 ^a	701 ^b	751 ^a	722 ^b	809 ^a	783 ^b

Тут індекси ^a та ^b позначають методи розрахунку електронних збуджень – Тамма-Данкова та часовозалежної теорії DFT відповідно. Як можна бачити псевдопотенціальні розрахунки демонструють значне заниження розрахованої довжини хвилі поглинання.

Виходячи з даних потенціометричного титрування, за допомогою програми CLINP 2.1 були розраховані логарифми констант стійкості комплексів Cu(II) з дослідженою сполукою. Адекватний опис отриманих результатів було досягнуто при врахуванні наступних реакцій:



**МОРФОЛОГІЯ ПЛІВОК ПОЛІАНІЛІНУ, ПОТЕНЦІОДИНАМІЧНО
ОСАДЖЕНИХ НА АЛЮМІНІЄВОМУ ЕЛЕКТРОДІ
З РОЗЧИНІВ СУЛЬФАТНОЇ КИСЛОТИ**

Влад Х. І., Костів В. Т., Яцишин М. М.

Львівський національний університет імені Івана Франка
вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна
virakostiv93@gmail.com

Для електрохімічного синтезу електропровідних полімерів і поліаніліну (ПАН), зокрема, використовують електроди з активних металів (Fe, Al, Cu, Ni та ін.) та сплавів. Такі електроди, а особливо алюмінієві, є дешевими і з успіхом замінюють електроди з благородних металів. Окрім завдань зумовлених дослідженням антикорозійного захисту активних металів та сплавів на їхній основі подібні електроди слугують платформами для електрохімічного синтезу наноструктурованого ПАН, тощо. Серед методів електрохімічних синтезів ПАН найбільш популярним є потенціодинамічний метод окиснення аніліну (Ан) який дозволяє контролювати процес осадження плівок чи наноструктур ПАН і отримувати його в різних формах-станах [1].

Потенціодинамічне осадження ПАН проводили на алюмінієвому електроді (Al-електрод) з розчинів Ан у водному розчині H_2SO_4 в межах потенціалів -200–1200 мВ впродовж 75 циклів за різних швидкостей розгортання потенціалів, мВ/с 25, 50 і 75. Морфологію утворень ПАН на поверхню РЕ, досліджували за допомогою ІЧ-ФП НПВ (NICOLET IS 10) аналізу, імпедансного електрохімічного аналізу (Боде діаграми) та растрового електронного мікроскопа-мікроаналізатора (РЕММА-102-02).

На рис. зображені поверхні Al електродів із плівкою ПАН, осадженою з 0,25 М розчину Ан в 0,5 М H_2SO_4 за швидкості розгортання потенціалу 25, 50, та 75 мВ/с. Як видно з рис. поверхнева морфологія змінюється при зміні швидкості розгортання потенціалу. За швидкості розгортання потенціалу 25 мВ/с поверхня плівки ПАН є досить пористою, на якій чітко видно утворені стрижні, які мають діаметр ~ 164 нм і довжину ~ 220 нм, при швидкості розгортання потенціалу 50 мВ/с поверхня стає губчастою більш компактною, а при швидкості 75 мВ/с – ніби оплавленою (див. рис. а, б і в, відповідно).

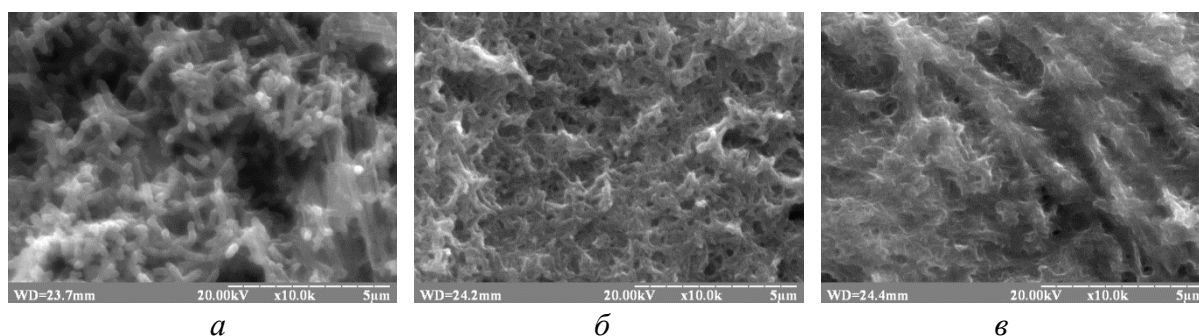


Рис. СЕМ зображення Al-електрода з плівкою ПАН. Концентрація Ан – 0,25 М, а H_2SO_4 – 0,5 М. Швидкість розгортання потенціалу, мВ/с: а – 25, б – 50, в – 75. $\times 10000$

Властивості ПАН та його плівок досліджені за допомогою ІЧ-ФП НПВ аналізу і Боде діаграм, які підтверджують утворення ПАН у формі емеральдинової солі та пористий характер плівок, який змінюється залежно від збільшення швидкості розгортання потенціалу.

[1] Chapter 2. Morphology of Polyaniline's Films Electrochemically Deposited on the Surface of Al-Based Amorphous Metal Alloys / M.M. Yatsyshyn, L.M. Boichyshyn, I.I. Demchyna, Yu.A. Hnizdiukh / Computational and Experimental Analysis of Functional Materials / O. V. Reshetnyak, G. E. Zaikov (Eds.) [Series: AAP Research Notes on Polymer Engineering Science and Technology]. – Toronto, New Jersey: Apple Academic Press, CRC Press (Taylor & Francis Group), 2017. – P. 61–91.

СИСТЕМИ $ZrO_2(HfO_2)$ –NiO ЯК ОСНОВА СТВОРЕННЯ НОВІТНІХ МАТЕРІАЛІВ

Глабай М. С.

Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України, відділ фізико-хімії і технології тугоплавких оксидів, вул., Кржижанівського, 3, Київ-142, 03680, Україна
tyshmarina@ukr.net

Системи $ZrO_2(HfO_2)$ –NiO відкривають шлях до розробки нових оксидних керамічних матеріалів для машинобудування, енергетичної, хімічної, авіакосмічної, електронної та інших галузей. Особлива увага приділяється розробці керамічних паливних комірок, як енергозберігаючим джерелам. Незважаючи на те, що анод Ni– ZrO_2 розробляється вже протягом 40 років, а також на наявність окремих розробок, що забезпечують термін роботи комірки понад 20 тис. год, все ще актуальною залишається проблема забезпечення аноду механічних і електричних властивостей та стабільності їх у часі.

Подвійна система ZrO_2 –NiO необхідна для визначення фазових перетворень які відбуваються в умовах відновлення NiO до Me–Ni в процесі експлуатації паливної комірки. Системи $ZrO_2(HfO_2)$ –NiO перспективні для створення матеріалів на основі спрямовано закристиалізованих евтектик та нанокристалічних порошків.

Аналіз публікацій по вказаним системам показує, що дані по системі HfO_2 –NiO відсутні, а в дослідженнях, присвячених матеріалам системи ZrO_2 –NiO не ставилося мети побудувати діаграму стану системи, а лише проводились пошуки евтектичних складів.

Мета роботи: побудувати моделі діаграм стану систем $ZrO_2(HfO_2)$ –NiO.

Для вибору оптимальних складів зразків для дослідження створено робочі моделі діаграм стану систем $ZrO_2(HfO_2)$ –NiO на основі відомих друкованих джерел. Показано, що системи евтектичного типу з низькою (<1 мол.%) розчинністю NiO в $ZrO_2(HfO_2)$ (рис.). Розчинність на основі NiO відсутня. На ліквідусі наведено дві точки: евтектичну ($L \leftrightarrow ZrO_2(HfO_2) + NiO$) та метатектичну ($L + F - ZrO_2(HfO_2) \leftrightarrow T - ZrO_2(HfO_2)$). Обидві температури наведено орієнтовно.

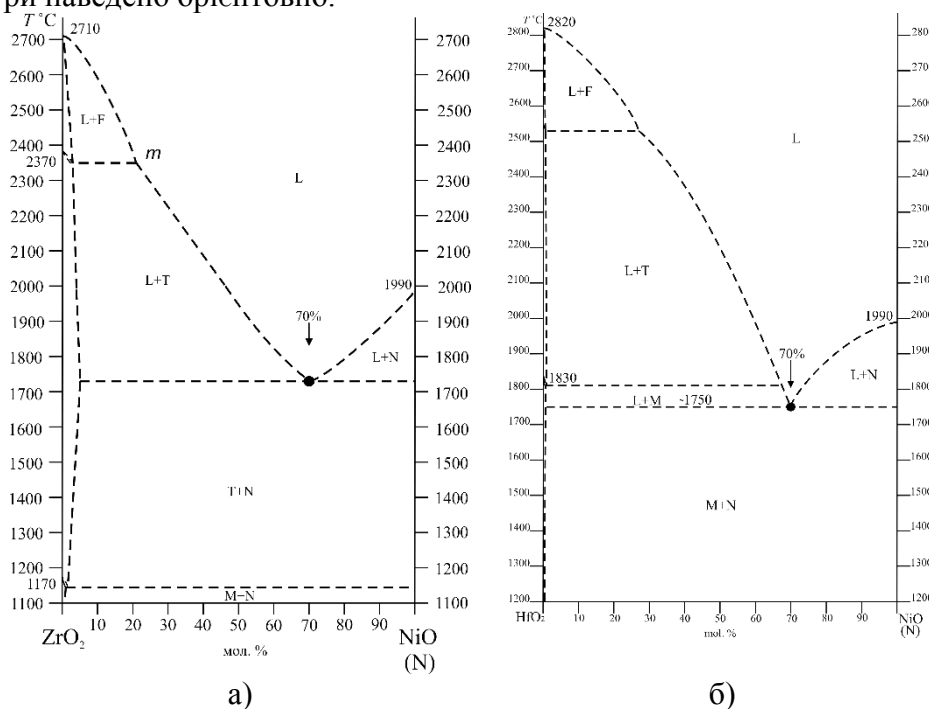


Рис. Моделі діаграм стану систем а) ZrO_2 –NiO, б) HfO_2 –NiO

РОЛЬ СТРУКТУРИ *N*-ГІДРОКСИФТАЛІМІДІВ У РЕАКЦІЇ З ПЕРМАНГАНАТОМ КАЛІЮ

Гринда Ю. М.¹, Компанець М. О.², Новікова К. В.², Ніколаєвський А. М.²,
Опейда Л. І.¹, Куш О. В.¹

¹Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії і вуглехімії
ім. Л. М. Литвиненка НАН України

²Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України
opeida_l@yahoo.com

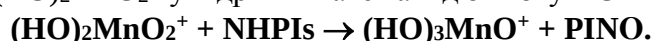
Каталітичне аеробне окиснення органічних речовин широко використовується з метою одержання цінних кисневмісних похідних. Тому пошук ефективних каталітичних систем окиснення органічних сполук на сьогодні лишається актуальним. Вважаються перспективними органокаталізатори, яскравими представниками яких є *N*-гідроксиіміди, широкого застосування набувають системи гідроксиімід – окисник.

У роботі досліджено вплив структури похідних *N*-гідроксифталіміду (NHPIs), які містять у бензольному кільці електронодонорний та електроноакцепторний замісники в реакції з перманганатом калію (KMnO₄) в ацетонітрилі (25 °C). За кінетикою витрачання MnO₄⁻ стежили фотоколориметрично. Виявлено суттєве збільшення швидкості окиснення NHPIs при зростанні кислотності середовища, незаміщений NHPI краще взаємодіє з окисником, ніж його похідні — швидкість окиснення NHPI перманганат-іонами зменшується при введенні як електронодонорних, так і електроноакцепторних замісників у бензольне кільце (табл. 1).

Табл. 1. Залежність спостережуваної константи швидкості (*k*) реакції NHPIs з KMnO₄ в кислому середовищі. [KMnO₄] = 2,5 · 10⁻⁴ моль/л, [NHPIs] = 8,0 · 10⁻⁴ моль/л

Гідроксиімід	[CH ₃ COOH], моль/л	<i>k</i> · 10 ³ , с ⁻¹
NHPI	1,02	1,4
4,5-Cl-NHPI	1,16	0,82
4-Me-NHPI	1,16	0,24
NAPI	1,16	0,23

Встановлено лінійну залежність спостережуваної константи швидкості витрати MnO₄⁻ (*k*) від √[CH₃COOH], що є доказом впливу протонів на швидкість визначальну стадію окиснення гідроксиімідів KMnO₄ та домінуючої ролі протонованої форми Mn-вмісної частинки – (HO)₂MnO₂⁺ у відриві H-атома від зв'язку NO–H:

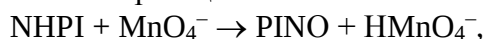


Окиснення кумолу (RH) киснем у присутності KMnO₄ та NHPI є доказом утворення радикалів (кінетику окиснення досліджували за поглинанням O₂ газоволюмометрично) (табл. 2).

Табл. 2. Швидкості окиснення (W(O₂)) кумолу в ацетонітрилі молекулярним киснем у присутності NHPI та KMnO₄. [RH] = 3,52 моль/л, [CH₃CN] = 9,5 моль/л

№ з/п	[NHPI] · 10 ³ , моль/л	[KMnO ₄] · 10 ⁴ , моль/л	W · 10 ⁵ , моль/л·с
1	5,0	0	1,5
2	0	2,5	3,1
3	5,0	2,5	13,9

За даними табл. 2 швидкість реакції в досліді 3, де в реакційній суміші були присутні NHPI та KMnO₄, є в 3 рази більша ніж сума швидкостей в досліді 1 та 2, де кожна з ініціюючих добавок була взята окремо, свідчать про синергізм у сумісній дії NHPI та MnO₄⁻. Це можна пояснити наявністю реакції:



яка відбувається разом з окисненням перманганатом кумолу чи його гідропероксиду.

**ВИВЧЕННЯ КІНЕТИКИ ОКИСНЕННЯ ГІДРОХІНОНУ
В ПРИСУТНОСТІ ЛАККАЗИ *TRAMETES VERSICOLOR*
МЕТОДОМ АМПЕРОМЕТРИЧНОЇ КИСНЕМЕТРІЇ**

Гусенікова Є. С., Сергеева Ю. Ю., Цяпало О. С., Лесишина Ю. О., Шендрик О. М.

Донецький національний університет імені Василя Стуса

a.tsyapalo@donnu.edu.ua

У зв'язку з жорсткістю вимог до екологічної безпеки хімічних процесів все більших масштабів набуває використання в промисловості біокаталітичних технологій. Останнім часом науковці приділяють значну увагу дослідженню властивостей ферменту лаккази, який каталізує реакції окиснення широкого кола органічних речовин молекулярним киснем. Завдяки цьому лакказу використовують у різноманітних промислових процесах.

Актуальним є пошук ефективних медіаторів лаккази, здатних підвищувати її каталітичну активність. В більшості наукових публікацій дослідження кінетики окиснення органічних субстратів у присутності лаккази проводилися за допомогою спектрофотометричного методу аналізу. Проте при переході до трикомпонентної системи лаккази-медіатор-субстрат смуги поглинання світла вихідних речовин та продуктів реакції можуть перекриватися, що викликає складнощі при визначенні концентрації певного компонента системи.

Мета роботи: дослідження кінетики окиснення гідрохінону (ГХ) молекулярним киснем за участю лаккази *Trametes versicolor* методом амперометричної киснеметрії. Експерименти проводили в термостатованому реакторі, повністю заповненому реакційною сумішшю без доступу атмосферного повітря в цитратній буферній системі за рН 4.5, $T = 308\text{ K}$ та атмосферного тиску. Концентрація ферменту у всіх експериментах була постійною і складала 57 мг/л реакційної суміші. Запис кінетичних кривих було виконано з допомогою термооксиметру «Експерт-001», обладнаного електродом Кларка.

Показано, що витрачання кисню в системі починається одразу після введення лаккази. Причому, в інтервалі концентрацій ГХ від $4.7 \cdot 10^{-4}$ до $1.15 \cdot 10^{-3}$ моль/л зі збільшенням концентрації субстрату, збільшується і швидкість витрачання кисню в системі (криві 1–3 на Рис.). Подальше збільшення концентрації ГХ не впливає на швидкість реакції (крива 4), очевидно, через досягнення насичення ферменту субстратом. З початкових прямолінійних ділянок кінетичних кривих ферментативного окислення ГХ були одержані значення початкової швидкості реакції за різних концентрацій субстрату.

За рівнянням Міхаеліса-Ментен в подвійних обернених координатах Лайнуівера-Берка було визначено максимальну швидкість та константу Міхаеліса лакказного окиснення ГХ, які склали відповідно $3,1 \cdot 10^{-7}\text{ М} \cdot \text{с}^{-1}$ та 740 мкМ.

Одержані результати співвідносяться з кінетичними параметрами реакції, одержаними за допомогою інших методів. Це свідчить про перспективність використання методу амперометричної киснеметрії для дослідження лакказо-медіаторних систем.

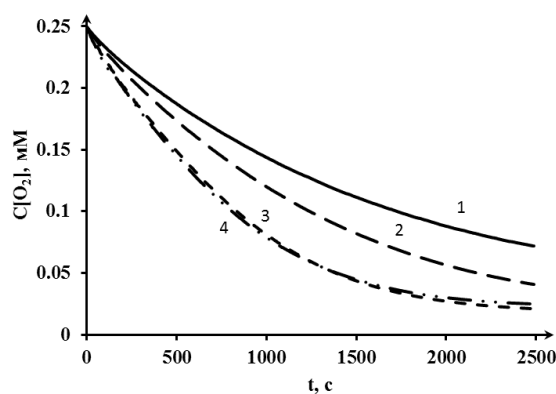


Рис. Кінетичні криві витрачання кисню в реакції лакказного окиснення ГХ різних концентрацій: $C[\text{ГХ}] = 4.7 \cdot 10^{-4}\text{ М}$ (1); $7.0 \cdot 10^{-4}\text{ М}$ (2); $1.15 \cdot 10^{-3}\text{ М}$ (3); $1.4 \cdot 10^{-3}\text{ М}$ (4)

МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ АМОРФНИХ МЕТАЛЕВИХ СПЛАВІВ СИСТЕМ

 $\text{Fe}_{82}\text{Nb}_2\text{B}_{14}\text{RE}_2$ (RE = Y, Gd, Tb, Dy)*Даниляк М.-О. М., Бойчишин Л. М.*

Львівський національний університет імені Івана Франка

danuliak-olena@ukr.net

Аморфні металеві сплави (АМС) володіють цінним комплексом механічних властивостей, які залежать від їхнього елементного складу. Перш за все їх особливістю є поєднання високої твердості та міцності.

Об'єктом дослідження були аморфні металеві сплави на основі заліза леговані рідкісноземельними металами (RE): $\text{Fe}_{84}\text{Nb}_2\text{B}_{14}$, $\text{Fe}_{82}\text{Nb}_2\text{B}_{14}\text{Y}_2$, $\text{Fe}_{82}\text{Nb}_2\text{B}_{14}\text{Gd}_2$, $\text{Fe}_{82}\text{Nb}_2\text{B}_{14}\text{Tb}_2$ та $\text{Fe}_{82}\text{Nb}_2\text{B}_{14}\text{Dy}_2$ у вигляді стрічок з товщиною і шириною $(20-25) \cdot 10^{-6}$ м і $3 \cdot 10^{-3}$ м, відповідно, отримані методом спінінгування розплаву. Досліджені аморфні сплави виготовлені в Інституті металофізики НАН України.

Для встановлення механічних характеристик АМС систем $\text{Fe}_{82}\text{Nb}_2\text{B}_{14}\text{RE}_2$ (RE = Y, Gd, Tb, Dy) використовували визначення мікротвердості за Вікерсом. Для випробування на мікротвердість застосовували прилад ПМТ-3. Мікротвердість визначали для контактної та зовнішньої боків досліджених АМС. З одержаних результатів, які представлено у таблиці, бачимо що механічні параметри для контактної та зовнішньої боків АМС систем $\text{Fe}_{82}\text{Nb}_2\text{B}_{14}\text{RE}_2$ (RE = Y, Gd, Tb, Dy) відрізняються. Ця різниця зумовлена технологічним процесом виробництва аморфних стрічок. Контактний бік аморфної стрічки володіє більшою аморфністю через більшу швидкість охолодження. Внаслідок формування стрічок із швидкістю 10^5-10^6 К/с у аморфній структурі АМС систем $\text{Fe}_{82}\text{Nb}_2\text{B}_{14}\text{RE}_2$ формуються колонії кластерів, які містять до 4 атомів. Міжплощинні віддалі в колоніях у АМС легованих Dy є менші тому межі дислокацій при високих навантаженнях не руйнуються, а мікротвердість зростає.

Легування базового АМС $\text{Fe}_{84}\text{Nb}_2\text{B}_{14}$ лише 2 ат. % RE збільшує значення мікротвердості усіх сплавів, що зумовлено присутністю оксидних шарів утворених RE на поверхні АМС внаслідок контакту із повітрям. Найбільшим значенням мікротвердості серед легованих сплавів володіє сплав $\text{Fe}_{82}\text{Nb}_2\text{B}_{14}\text{Dy}_2$.

Таблиця. Мікротвердість АМС систем $\text{Fe}_{82}\text{Nb}_2\text{B}_{14}\text{RE}_2$, де RE = Y, Gd, Tb, Dy

АМС	H_v , ГПа		Період гратки RE, Å	Електронна конфігурація RE	Густина RE, г/см ³
	Контактний бік	Зовнішній бік			
$\text{Fe}_{84}\text{Nb}_2\text{B}_{14}$	8.73	9.44	-	-	-
$\text{Fe}_{82}\text{Nb}_2\text{B}_{14}\text{Y}_2$	9.91	12.48	3.65	4d ¹ 5s ²	4.47
$\text{Fe}_{82}\text{Nb}_2\text{B}_{14}\text{Gd}_2$	9.58	12.81	3.64	5d ¹ 6s ²	7.90
$\text{Fe}_{82}\text{Nb}_2\text{B}_{14}\text{Tb}_2$	9.84	12.93	3.60	4f ⁹ 6s ²	8.23
$\text{Fe}_{82}\text{Nb}_2\text{B}_{14}\text{Dy}_2$	10.63	13.33	3.59	4f ¹⁰ 6s ²	8.55

Отже, мікротвердість для зовнішнього боку даних АМС є значно більшою. Легування RE сплаву $\text{Fe}_{84}\text{Nb}_2\text{B}_{14}$ збільшує мікротвердість для обох боків стрічки. Приріст мікротвердості внаслідок легування RE коливається в діапазоні 0.85–1.90 ГПа для контактної боку та в діапазоні 3.04–3.89 ГПа для зовнішнього боку стрічки АМС.

**MESOPOROUS SILICA FUNCTIONALIZED WITH METHYL RED
AS COLORIMETRIC pH SENSOR**

Dziazko M. O., Roik N. V.

Chuiko Institute of Surface Chemistry of NAS of Ukraine, 17 General Naumov Str., Kyiv,
03164, Ukraine
dzyazko@ukr.net

Construction of pH sensors is widely studied for a variety of chemical, medical, and biochemical applications. One of the most reliable approaches to create pH sensing material with improved properties is immobilization of acid-base indicator on solid support. Among inorganic proton permeable carriers silica attracts considerable attention due to high chemical and thermal stability, good biocompatibility and optical transparency, negligible swelling in solvents, easy control on the structural parameters and chemical composition.

In the present work, we focused our attention on the synthesis of pH sensor based on mesoporous amorphous silica – silochrome C-120 with chemically immobilized methyl red (MR). On the first stage, aminopropyl silica was synthesized by the reaction between silanol groups of silica surface and ethoxy groups of (3-aminopropyl)triethoxysilane. Then, grafting of acid-base indicator MR on aminopropyl silica was realized under mild conditions by use of coupling agent (1,1'-carbonyldiimidazole).

The content of MR moieties chemically immobilized on silica support was estimated by chemical and thermogravimetric analysis of surface layer as well as using diffuse reflectance UV-Vis (DRUV) spectroscopy. In the case of chemical analysis, cleavage of grafted MR from the carrier was achieved by hydrolysis of amide bonds in aqueous medium and reaction solution was analyzed by transmittance UV-Vis spectroscopy. The results of thermogravimetric analysis obtained for silica carrier with grafted MR moieties were compared with that ones for aminopropyl silica and content of chemically immobilized dye was estimated from the difference in weight loss. To determine the amount of chemically bonded MR by DRUV spectroscopy, calibration curves plotted for a series of standards across a range of dye contents deposited on aminopropyl silica near its expected amounts in synthesized organosilicas were used. Obtained results are represented in Table. Comparison of the MR content estimated by chemical, thermogravimetric, and DRUV analysis proves good agreement of obtained results.

Table. Content of MR chemically immobilized on silica surface.

Silica	Content of MR		
	DRUV analysis, mmol/g	chemical analysis, mmol/g	thermogravimetric analysis, mmol/g
1-MR-NH ₂ -C-120	0.026	0.024	0.027
2-MR-NH ₂ -C-120	0.020	0.020	0.022
3-MR-NH ₂ -C-120	0.018	0.016	0.015

Chemical immobilization of MR on solid support may cause substantial changes in indicator's protolytic properties due to the involving of one of its functionalities into the covalent bonding with surface 3-aminopropyl groups. Therefore, acid-base equilibria of surface functional groups were studied by potentiometric titration method and the ionization constants values were estimated to confirm the ability of synthesized pH sensor material to acid-base response. It was found that the protonation of surface MR-containing functionalities proceeds at higher pH values in comparison with individual indicator dye.

ИЗУЧЕНИЕ АНТИРАДИКАЛЬНЫХ СВОЙСТВ ОСНОВАНИЙ ШИФФА ГОССИПОЛА В РЕАКЦИИ С ДФПГ В ПРИСУТСТВИИ HCl

Дикун А. М., Редько А. Н., Рыбаченко В. И.

Институт физико-органической химии и углехимии
им. Л. М. Литвиненко НАН Украины
amdykun@gmail.com

Основания Шиффа госсипола – соединения на основе полифенола природного происхождения, госсипола, обладают ярко выраженной биологической активностью и являются эффективными антирадикальными агентами. Однако, исследование антирадикальных свойств оснований Шиффа госсипола в модельных реакциях со свободным радикалом ДФПГ или катион-радикалом АБТС ограничено, из-за высокой скорости процесса на начальных стадиях.

Известно, что введение кислоты в реакционную среду существенно уменьшает скорость реакции взаимодействия фенолов со стабильным радикалом ДФПГ. В данной работе изучено взаимодействие ряда оснований Шиффа госсипола с ДФПГ в этаноле в присутствии микроколичеств HCl.

На рис. представлено строение и возможные таутомерные формы изученных оснований Шиффа госсипола.

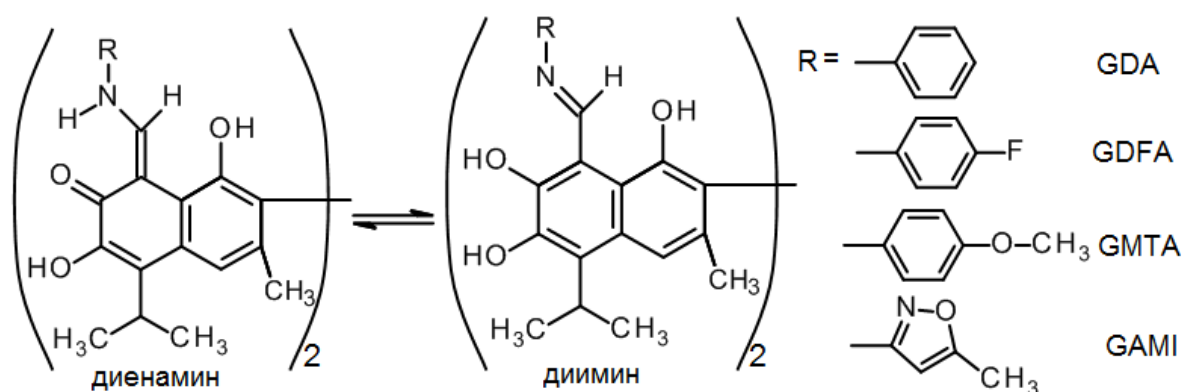


Рис. Строение таутомеров оснований Шиффа госсипола

Таблица. Эффективные константы скорости ($\text{л} \times \text{моль}^{-1} \times \text{с}^{-1}$) реакции ДФПГ $((1,0 \pm 0,04) \times 10^{-4} \text{M})$ с иминопериодинными госсипола $((1,25 \pm 0,05) \times 10^{-5} \text{M})$ в этаноле в присутствии HCl при 283 K

	GDA	GDFA	GMTA	GAMI
$k, \text{л} \times \text{моль}^{-1} \times \text{с}^{-1}$	231 ± 23	307 ± 25	385 ± 26	193 ± 20

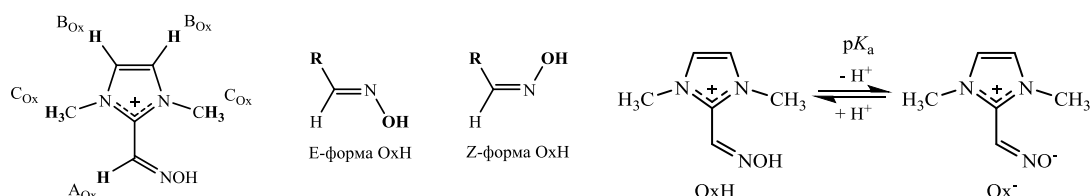
Из данных табл. следует, что по возрастанию реакционной способности в реакции с ДФПГ в присутствии HCl изученные основания Шиффа образуют последовательность: GMTA > GDFA > GDA > GAMI.

Таким образом, добавление микроколичеств HCl в реакционную смесь позволило оценить реакционную способность иминопериодинных госсипола в реакции с ДФПГ с учетом начальной стадии реакции.

КИСЛОТНО-ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА Е- И Z-ФОРМ 1,3-ДИМЕТИЛ-2-(ГИДРОКСИМИНОМЕТИЛ)ИМИДАЗОЛИЙ ИОДИДА

Капитанов И. В., Сердюк А. А., Бураков Н. И., Шумейко А. Е., Карпичев Е. А.
Институт физико-органической химии и углехимии им. Л. М. Литвиненко НАНУ
Институт органической химии НАНУ
ivkapitanov@gmail.com

1,3-Диметил-2-(гидроксиминометил)имидазолий йодид (ОхН) в зависимости от конфигурации оксимной группы может существовать в виде двух изомеров – Е- и Z-форм.



Поскольку величины pK_a таких изомеров могут существенно отличаться, что, несомненно, будет оказывать существенное влияние на их свойства, нами с помощью ЯМР-титрования определены их кислотно-основные свойства.

Полученные зависимости химического сдвига каждой из групп протонов от pH среды анализировались с помощью уравнения $\delta = \delta_0 - \Delta\delta \cdot [K_a / (K_a + a_{H^+})]$, где δ – наблюдаемая величина химического сдвига сигнала группы протонов при данном значении pH, м.д.; δ_0 – положение максимального смещения сигнала, соответствующая анионной форме, м.д.; $\Delta\delta$ – величина смещения сигнала, м.д.; K_a – константа кислотной ионизации; a_{H^+} – активность ионов водорода. Результаты анализа и параметры уравнения представлены в таблице.

Таблица. Кислотно-основные свойства (pK_a) 1,3-диметил-2-(гидроксиминометил)имидазолий йодида (ОхН) по данным ^1H ЯМР-спектроскопии; 25 °С

Сигнал	Е-форма			Z-форма		
	A _{Ох}	B _{Ох}	C _{Ох}	A _{Ох}	B _{Ох}	C _{Ох}
δ_0 , м.д.	8.43	7.49	3.93	7.81	7.55	3.80
$\Delta\delta$, м.д.	0.29	0.15	0.10	0.20	0.13	0.10
pK_a	8.60±0.06	8.58±0.08	8.56±0.08	8.54±0.06	8.50±0.08	8.51±0.08
pK_a (ср.)	8.58±0.08			8.52±0.08		

Примечания. В качестве растворителя использован раствор 1 М КСl в смеси D₂O / H₂O (20:80). Погрешность расчета величин δ_0 и $\Delta\delta$ составляла ± 0,01 м.д.

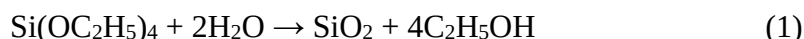
Данные таблицы свидетельствуют о том, что pK_a Е- и Z-форм 1,3-диметил-2-(гидроксиминометил)имидазолий йодида (ОхН) в пределах погрешности эксперимента не отличаются между собой.

ТЕРМОДИНАМІКА ОТРИМАННЯ МОНОДИСПЕРСНИХ ЧАСТИНОК SiO₂ ГІДРОЛІЗОМ ТЕТРАЕТОКСИСИЛАНУ В СИСТЕМІ Si-O-H-C-N

Каюн І. Г., Мисов О. П.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет» Україна, Дніпро
igorkayun@ukr.net

Актуальність отримання монодисперсних частинок SiO₂ обумовлена їх широким використанням в промисловості: отримання опалів, фотонних кристалів, в хімічній промисловості як складових каталізаторів і т. д. Синтез монодисперсних частинок SiO₂ гідролізом тетраетоксисилану (ТЕОС) за методом Штобера, здійснюється за реакцією (1) в водно-спиртово-аміачному середовищі.



На характеристики синтезованих частинок SiO₂ в значній мірі впливають наступні технологічні параметри: температура та кислотність розчину, концентрація реагентів. Вивчення впливу вказаних параметрів експериментальним шляхом утруднене через високу реакційну здатність ТЕОС. Тому доцільно провести термодинамічні дослідження системи Si-O-H-C-N.

Термодинамічні розрахунки в системі Si-O-H-C-N проводили за допомогою програмного комплексу «Селектор». Принцип, закладений в програмі, ґрунтується на мінімізації ізобарно-ізотермічного потенціалу Гіббса. В термодинамічній моделі використані стандартні бази даних програми «Селектор»: Yokokawa, sprons98, sprons07, dump. При термодинамічних розрахунках прийняті наступні допущення: система Si-O-H-C-N знаходиться при незмінній температурі і атмосферному тиску.

Варіації температури реакції та концентрацій реагентів для яких проведені дослідження приведені в таблиці.

Таблиця. Діапазони варіацій значень досліджуваних параметрів

Параметр	Концентрація Si(OC ₂ H ₅) ₄	Концентрація H ₂ O	Концентрація NH ₄ OH	Концентрація C ₂ H ₅ OH	Температура
Діапазон значень	0...1,2 М	0...19 М	0...1,9 М	0...10 М	1...70 °C

В результаті отриманих даних встановлено:

1) Для отримання максимальної кількості твердої фази SiO₂ при різних початкових концентраціях (C₂H₅O)₄Si встановлена необхідна концентрація C₂H₅OH, яку можна визначити за рівнянням (2):

$$y = 1,2 - 4 * [\text{Si}(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})_4]. \quad (2)$$

2) Зміна температури реакції від 1 до 70 °C не впливає на концентрації іонних сполук силіцію в розчині та твердої фази SiO₂.

3) Збільшення початкової концентрації NH₄OH від 0 до 1,9 М призводить до зменшення кількості твердої фази SiO₂ в системі Si-O-H-C-N на 1e⁻⁵ М незалежно від початкової концентрації ТЕОС.

Проведені лабораторні експерименти показують, що практичний вихід SiO₂ менший від теоретичного на 10–15 %, в залежності від вихідних концентрацій реагентів. Поясненням відмінності результатів, на нашу думку, є висока концентрація NH₄OH (являється слабкою основою) в розчині при завершенні реакції і як наслідок значення рН = 10,8 і більше, що призводить до більш високої концентрації розчинених у воді іонів кремнію в порівнянні із теоретично розрахованим значенням. В термодинамічних розрахунках значення рН варіюється від 6 до 7, що пояснюється частковим перетворенням NH₄OH у N₂ і NH₃ та їх виведенням із розчину у вигляді газу.

ВИЗНАЧЕННЯ САЛІЦИЛОВОЇ КИСЛОТИ В РІЗНИХ СПОЛУКАХ*Козлова Ю. В., Швець І. І.*

Донецький національний технічний університет

Yuliya12@i.ua

Хімія дуже сильно проникла в наше життя. Її роль в різних сферах промисловості весь час зростає. Не існує зараз виробництва де б не було хімічного процесу, будь то техніка, продукти харчування або лікарські препарати. Не всі випущені товари відповідають заявленій якості, а деякі можуть навіть нашкодити людині. Тому на перше місце виходить показник оцінки якості продукції. В наш час методи оцінки якості продукції повинні бути швидкими, надійними, достовірними і доступними.

Метою роботи є розробка методики визначення домішки саліцилової кислоти в різних сполуках, в першу чергу в медичних препаратах. Особливо важливо є визначення компонента, який знаходиться в невеликій кількості.

Застосовують саліцилову кислоту в промисловості барвників, лікарських та духмянних речовин, в харчовій промисловості (при консервації). Саліцилова кислота широко застосовується в медицині, вона має жарознижувальну та анти грибкову дію.

Якісне визначення саліцилової кислоти базується на реакції з хлоридом заліза (III), з утворенням забарвленої комплексної сполуки або з сульфат міді (II) з утворенням розчинної у воді мідної солі зеленого кольору. В нашому дослідженні застосовували реакцію з хлоридом заліза (III). В якості еталону застосовували саліцилову кислоту марки «чда».

Склад і забарвлення комплексів, які утворились при взаємодії саліцилової кислоти з іонами заліза, залежать від рН середовища:

- при рН 1,8–2,5 утворюється моносаліцилатний комплекс, який має синьо-фіолетове забарвлення;
- при рН 4–8 утворюється дисаліцилатний комплекс, який має червоно-буре забарвлення;
- при рН 8–11 – трисаліцилатний комплекс заліза, який має жовте забарвлення.

В препаратах, які були обрані для дослідження, при взаємодії з FeCl_3 , також мали забарвлення, що свідчить про наявність в них саліцилової кислоти.

Для визначення кількості активного компоненту, застосовуємо фотометричний аналіз. Це один з методів колориметричного аналізу, який входить в групу фізико-хімічних методів. Про кількість досліджуваної речовини судимо по зміні фізичних властивостей в результаті хімічних реакцій. Принцип аналізу – існування пропорційної залежності між світлопоглинанням і концентрацією поглинальної речовини. Використовуємо пристрій – фотоелектроколориметр, який забезпечує добру точність ($\pm 1-2$ від. %).

Оптична щільність розчину прямо пропорційна концентрації пофарбованого речовини і товщині шару розчину. Дана методика пропрацьована на різних концентраціях домішків кислоти, у різних середовищах, тобто при різних рН. Це має велике значення, бо сам препарат вже має певну середовище, а переводити в інше це фактично з'єднання деяких речовин.

Таким чином оптична щільність розчину буде тим більше, чим більше в ньому міститься пофарбованого речовини, за умови, однакової товщини шару розчину даної речовини.

Запропонована методика має ряд переваг та недоліків. Вона трудомістка, менш специфічна, більш експресна, порівняно з іншими методиками. Перевагою є отримання інформації про точний кількісний склад домішки саліцилової кислоти у речовинах.

ФАЗОВІ РІВНОВАГИ В СИСТЕМІ ZrO_2 - La_2O_3 - Gd_2O_3 ПРИ 1600 °C*Корнієнко О. А.¹, Андрієвська О. Р.^{1,2}, Биков О. І.¹, Спасьонова Л. М.^{1,2}*¹Інститут проблем матеріалознавства імені І. М. Францевича НАН України²Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
Kornienkooksana@ukr.net

Одним із основних пріоритетних галузевих орієнтирів розвитку сучасного матеріалознавства є розробка нових керамічних матеріалів зі спеціальними властивостями, що працюватимуть за умов високих температур. Оксиди цирконію та лантанодів володіють корисними функціональними показниками — для них характерна висока температура плавлення та ряд унікальних фізико-механічних, теплофізичних та інших властивостей. Керамічні матеріали на основі системи ZrO_2 - La_2O_3 - Gd_2O_3 є надзвичайно цікавими та перспективними для виробництва вогнетривів та вузлових компонентів техніки високих температур, зокрема – термобар'єрних покриттів. Задля ефективного та оптимального застосування даних матеріалів, а також для удосконалення процесу їх виробництва, існує потреба в дослідженні діаграм стану багатокомпонентних систем.

В даній роботі вперше за допомогою методів РФА та петрографії досліджено фазові рівноваги та фізико-хімічні властивості фаз, утворених в потрійній системі ZrO_2 - La_2O_3 - Gd_2O_3 при температурі 1600 °C (10 год.) на повітрі у всьому інтервалі концентрацій. В якості вихідних речовин використовували азотнокислу сіль цирконію $ZrO(NO_3)_2 \cdot 2H_2O$, La_2O_3 , Gd_2O_3 з вмістом основного компоненту 99.99 % та азотну кислоту марки «ЧДА». Зразки готували з концентраційним кроком 1–5 мол. % з розчинів азотнокислих солей з послідовним випарюванням, сушкою та прожарюванням при 1200 °C протягом 2 год.

У потрійній системі ZrO_2 - La_2O_3 - Gd_2O_3 при 1600 °C нові фази не виявлені. При 1600 °C у системі ZrO_2 - La_2O_3 - Gd_2O_3 утворюються поля твердих розчинів на основі кубічної (F) із структурою типу флюориту і тетрагональної (Т) модифікацій ZrO_2 моноклінної (В) і кубічної (С) модифікацій Gd_2O_3 , гексагональної (А) модифікації La_2O_3 , а також упорядкованої фази типу пірохлору $Ln_2Zr_2O_7$ (Py).

Твердий розчин на основі кубічної модифікації із структурою типу флюориту займає досить значну площу ізотермічного перерізу. Область гомогенності на основі F- ZrO_2 направлена в сторону існування упорядкованої фази типу пірохлору $La_2Zr_2O_7$ (Py) це пов'язано з тим, що в граничній подвійній системі ZrO_2 - Gd_2O_3 фаза типу пірохлору зазнає перехід порядок/безлад при відносно високій температурі ~ 1550 °C. Цирконат гадолінію ($Gd_2Zr_2O_7$) існує як розупорядкована фаза типу флюориту при високих температурах, в той час як при низьких температурах він набуває структуру типу пірохлору в якій кисневі вакансії та катіони упорядковані. Параметри елементарних комірок F- ZrO_2 змінюються від $a = 0.5191$ нм для двофазного зразка (F+Py), що містить 70 мол. % ZrO_2 – 21 мол. % La_2O_3 – 9 мол. % Gd_2O_3 до $a = 0.5182$ нм для трифазного зразка (F+Py+M), що містить 80 мол. % ZrO_2 – 14 мол. % La_2O_3 – 6 мол. % Gd_2O_3 вздовж променя ZrO_2 – (70 мол. % La_2O_3 – 30 мол. % Gd_2O_3).

Встановлено, що в системі ZrO_2 - La_2O_3 - Gd_2O_3 при 1600 °C в рівновазі знаходяться переважно фази кубічної симетрії: F – Fm3m, Py – Fd3m, С – Ia3. Подібна структура кристалічних ґраток і значна протяжність вказаних фаз обумовлює переважний характер твердих розчинів на основі фаз типу флюориту (F), пірохлору (Py) і кубічної модифікації (С) оксидів рідкісноземельних елементів та їх двофазних сумішей в потрійній системі. Найбільшу площу ізотермічного перерізу займає область гомогенності фази типу флюориту.

О МЕХАНИЗМЕ КОРРОЗИОННОГО РАЗРУШЕНИЯ МЕТАЛЛОВ ПОД ТОНКИМИ СЛОЯМИ ВЛАГИ

Королянчук Д. Г., Нефедов В. Г., Овчаренко В. И.

ГБУЗ «Украинский государственный химико-технологический университет»
korolyanchukdg@gmail.com

Коррозия металлов и сплавов наносит значительный экономический ущерб. Ежегодно около 25 % от общего количества изготавливаемого металла составляют убытки от коррозионного разрушения. Поэтому довольно остро стоит вопрос об изучении причин коррозии и методов защиты от нее.

Одним из наиболее распространенных видов коррозии металлов является атмосферная коррозия с кислородной деполяризацией, поскольку огромное количество сооружений, конструкций и механизмов эксплуатируется в атмосферных условиях. При этом за счет периодического выпадения осадков, конденсации влаги и температурных перепадов на поверхности металла образуется тонкая пленка воды. Общеизвестным является тот факт, что под тонкой пленкой влаги скорость разрушения металла увеличивается в 3...10 раз по сравнению со скоростью коррозии в объеме воды.

Необходимо отметить, что повышение скорости коррозии в тонких слоях электролита значительно больше, чем следовало бы ожидать исходя из скорости диффузионных процессов переноса кислорода по закону Фика. В литературе для объяснения данного явления высказывается предположение о наличии интенсивного конвективного перемешивания в пленках электролита толщиной менее 100 мкм. Однако согласно теории конвективной диффузии Левича можно считать это объяснение неудовлетворительным. Для устранения данного противоречия можно предложить другой механизм переноса вещества и заряда в тонких пленках.

Нами был выявлен новый механизм переноса зарядов в тонких пленках электролитов на границе с воздухом. Основными условиями его проявления являются: а) наличие поверхности раздела фаз газ-жидкость, и б) наличие нескомпенсированных H^+ или OH^- -ионов, которые в наших экспериментах генерировались при электролитическом разложении воды.

Причиной аномально высокой электропроводности поверхности воды и водных растворов электролитов является структура поверхности. Считается установленным, что вода, кроме тетраэдрической структуры из молекул, объединенных водородными связями, образует упорядоченные кластеры, особо устойчивые на поверхности воды.

Перенос зарядов по этим кластерам осуществляется H^+ -ионами в кислых средах, OH^- -ионами в щелочных и H^+ и OH^- -ионами в нейтральных. При этом перенос заряда по кластеру напоминает туннелирование электронов на электронных орбиталях. Такой механизм переноса называется крокетным.

По результатам расчетов установлено, что с уменьшением толщины слоя влаги увеличивается коэффициент увеличения электропроводности и коэффициент увеличения плотности коррозионного тока. Однако следует отметить, что коэффициент увеличения плотности коррозионного тока имеет меньшие значения, по сравнению с величиной возрастания электропроводности для дистиллированной воды. Вероятно, это связано с увеличением поляризационного сопротивления электродным процессам при увеличении плотности тока.

Показано, что причиной аномально высокой скорости коррозии металлов под тонкими пленками воды может быть увеличение электропроводности поверхности раздела фаз газ-жидкость вследствие туннелирования зарядов по упорядоченным поверхностным структурам.

ВПЛИВ ГІДРОТЕРМАЛЬНОЇ ОБРОБКИ НА СТРУКТУРНІ ВЛАСТИВОСТІ СИЛКАТУ ЦИРКОНІЮ, СИНТЕЗОВАНОГО ЗОЛЬ-ГЕЛЬ МЕТОДОМ

Кравченко М. В., Стрелко В. В.

Інститут сорбції та проблем ендоекології НАН України
nikolaikravchenko32@gmail.com

Композитні матеріали на основі зміщаних оксидів кремнію і цирконію можуть бути застосовані в різних галузях промисловості. В інституті розроблений спосіб одержання сферично гранульованого силкату цирконію золь-гель методом. Процес синтезу гранульованого гідрогелю силкату цирконію проводиться в безперервному режимі із застосуванням проточного реактора на лабораторній установці.

Перспективним напрямком застосування силкату цирконію є можливість використання його для високотемпературного очищення води. З цією метою гідрогель силкату цирконію піддали гідротермальній обробці (ГТО) при температурі 270 °С протягом 5–72 годин. З рис. 1 і рис. 2 видно, що відбувається збільшення питомої поверхні, але при збільшенні часу ГТО спостерігається не значне зменшення питомої поверхні за рахунок збільшення радіусу пор. Сферично гранульований силкат цирконію залишається стійким під впливом гідротермальних умов.

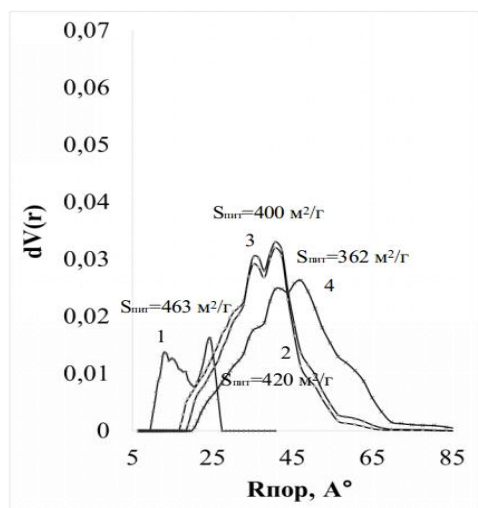


Рис. 1. Криві розподілу пор за розмірами ефективних радіусів силкату цирконію Na-форма (1), піддані ГТО при 270 °С: 5 год (2), 15 год (3), 72 год (4)

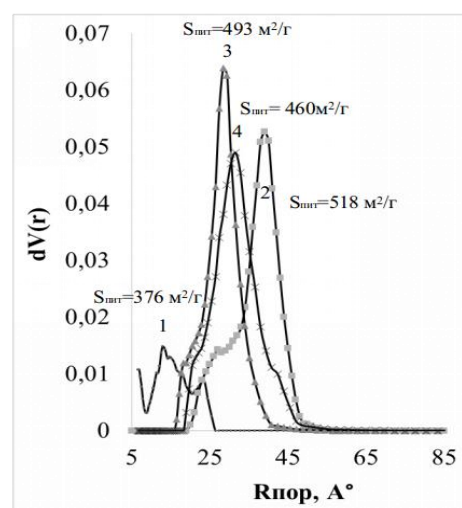


Рис. 2. Криві розподілу пор за розмірами ефективних радіусів силкату цирконію H-форма (1), піддані ГТО при 270 °С: 5 год (2), 15 год (3), 72 год (4)

ELECTROCHEMICAL BEHAVIOR OF Fe-Fe₃O₄-NaOH-O₂ ENERGY STORAGE ELECTRODE SYSTEMS

Potapenko O. V., *Kravchenko O. V.*, Pershina K. D.
Inter-Agency of Electrochemical Energy Systems NAS of Ukraine
KravchenkoAlex@i.ua

Iron oxide mixtures are well known as promising electrode materials for secondary batteries. Interest to such systems has been driven by incentives to develop low-cost, environmentally friendly and ability to recharge systems. The charge capacity of Fe- air battery is formed due to possibility of the iron to realize redox reactions with oxygen in wide range of potentials in aqueous solutions.

Experiment consisted of two stages: 1 – for avoid passivation of iron (rusting) and reduce hydrogen evolution at the electrode surface during charging the working electrode was prepared from powdered materials containing metallic iron or iron oxides (80 % of a mixture of Fe and Fe₃O₄; 10 % – acetylene soot and 10 % – Polytetrafluoroethylene); 2 – electrochemical behavior of Fe-Fe₃O₄ was studied using cyclic voltammetry (CVA) in alkaline media. Measurements were taken in open air 3-electrode cell: counter electrode (oxidized graphite), working electrode (Fe-Fe₃O₄) and reference electrode (Ag/AgCl).

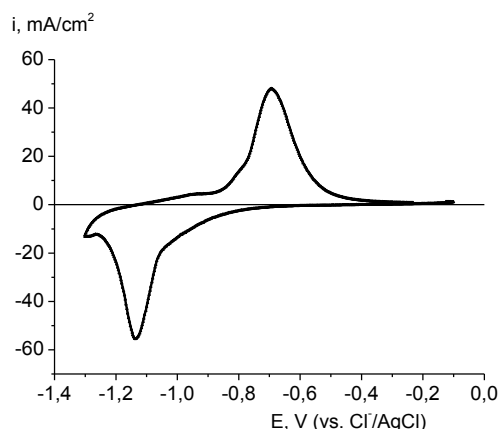


Fig. 1. CVA of the Fe-Fe₃O₄ electrode
($\nu = 1 \text{ mV/s}$, $t = 25 \text{ }^\circ\text{C}$, 5M NaOH)

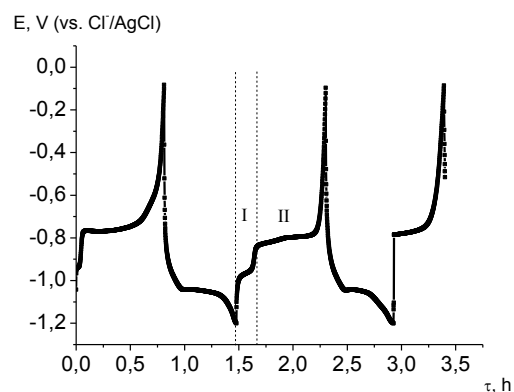


Fig. 2. Charge-discharge curves of the Fe-Fe₃O₄ electrode ($i = 5 \text{ mA/cm}^2$, 5M NaOH)

The CVA study determined range of the potential window of the iron-air system, it be $E = -1.28 \text{ V}$ (Fig. 1). It is slightly lower than that of the iron–nickel oxide cell of 1.41 V, but air-breathing electrode can increase the energy density due the realization of five redox reactions with participation of ironcontent compounds. Analysis of the standard potentials of electrode reactions in aqueous solutions show that the charge / discharge process depends on the redox transformations of the pair $\text{Fe}^0/\text{Fe}^{2+}$ ($E = -0.44 \text{ V}$ via SHE) and $\text{Fe}(\text{OH})_2/\text{Fe}^0$ ($E = -0.88 \text{ V}$ via SHE) and on the concentration of dissolved oxygen and carbon dioxide (Fig. 1.2). Dissolved carbon dioxide promotes the formation of FeCO_3 , which is reduced to Fe^0 at $E = -0.756 \text{ V}$ (SHE). The obtained specific capacitance of Fe-Fe₃O₄ electrode was 80–100 mAh/g. The observed increasing of resistance and a decreasing of specific capacity during cycling is connected with two main factors: 1 – with decreasing of the oxygen concentration; 2 – with increasing of the amount of carbonates, which blocking the surface of the electrode.

STRUCTURED HIERARCHICAL ZEOLITES OVERGROWN ON EXPANDED OBSIDIAN OR PERLITE

Kurmach M. M., Konyshcheva K. M., Yaremchuk P. S., Shvets O. V.

L.V. Pisarzhevsky Institute of Physical Chemistry of the NAS of Ukraine, 31 Prosp. Nauky,
03028 Kyiv, Ukraine
mazinator3710@ukr.net

Hierarchical zeolites are materials in which orderly combined two or more types of pore systems, for example zeolitic micropores and transport mesopores. The latter facilitate the transport of molecules to active centers and reduce diffusion limitations, what allow to expect high activity of such materials in different acid-base and redox process including “bulk” (with diameter more than 1 nm) molecules. At the same time, these materials are quite expensive for use in industry. Synthesis of hierarchical zeolites overgrown on obsidian or perlite could significantly reduce the value of such materials.

Structured hierarchical zeolites overgrown on expanded obsidian or perlite were obtained using Gemini-type surfactants as structure directing agents (SDA) and this aluminosilicates as unique Al source. Si/Al ratio change was achieved by preliminary acid treatment of starting perlite and obsidian. Structured hierarchical zeolites with MTW, MFI, MOR or BEA topology (as pure phases) were obtained varying of hydrothermal treatment time, SDA structure, and Si/Al ratio. Obtained materials consist of amorphous aluminosilicate (perlite or obsidian) phase on the surface of which zeolite nanosheets of 2–10 nm thickness are overgrown. Values of external surface were quite high and achieved $200 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$, while mesopore volume varied in range $0.25\text{--}0.6 \text{ cm}^3 \cdot \text{g}^{-1}$. It was established that degree of perlite or obsidian transformation into zeolite was increased with prolongation of time hydrothermal treatment and decrease of Al content in dealuminated obsidian and perlite.

All synthesized zeolites contain in structure Brønsted (BAS) and Lewis acid sites (LAS), which concentration varied in range $40\text{--}200 \mu\text{mol} \cdot \text{g}^{-1}$. Concentration of BAS and LAS significantly depended on amount of amorphous phase in obtained structured hierarchical zeolites. Such materials will be tested as catalyst for different acid-base process.

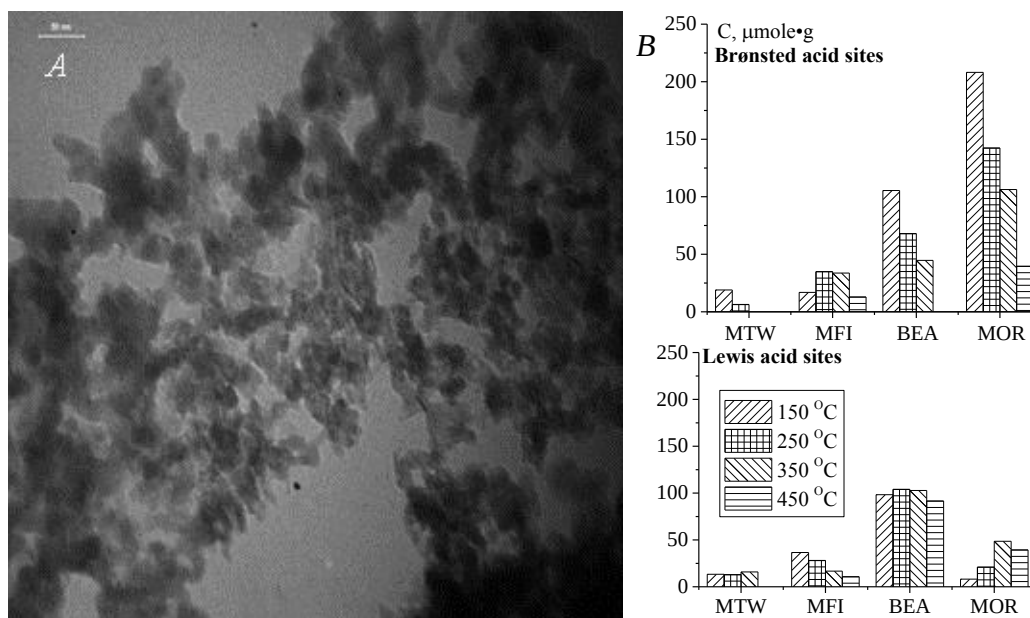


Fig. TEM-image (A) of sample BEA-obsidian, concentration (B) of adsorbed pyridine on Lewis and Brønsted acid sites of obtained composites

ОКИСЛЕННЯ БАРВНИКІВ ХРОМОВОГО ТЕМНО-СИНЬОГО ТА МЕТИЛОВОГО ФІОЛЕТОВОГО ПЕРОКСИДОМ ВОДНЮ В ПРИСУТНОСТІ СОЛЕЙ ПЕРЕХІДНИХ МЕТАЛІВ

Куценко Н. В.¹, Жильцова С. В.¹, Опейда Й. О.^{1,2}

¹Донецький національний університет імені Василя Стуса

²Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії
і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України
kutsenko.nat@donnu.edu.ua, sv.zhiltsova@donnu.edu.ua

Останнім часом інтенсивно розвиваються комбіновані методи окислення забрудників стічних вод, які характеризуються отриманням ОН-радикалів у м'яких умовах. Серед великої кількості подібних методів найбільш перспективною є окислювальна система Фентона. Велика увага їй приділяється через простоту реалізації, відносно невисоку вартість та екологічність. Поряд із класичною системою Фентона ($\text{Fe}^{2+} + \text{H}_2\text{O}_2$) ефективними є процеси окислення органічних сполук пероксидом водню в присутності іонів Cu^{2+} , Mn^{2+} , Co^{2+} , Cr^{2+} , Ag^+ тощо. Метою даної роботи було дослідити ефективність використання іонів змінної валентності в Фентон-подібних системах для деколоризації водних розчинів синтетичних барвників.

Кінетику знебарвлення хромового темно-синього (ХТС, $\lambda_{\text{max}} = 553 \text{ нм}$) та метилового фіолетового (МФ, $\lambda_{\text{max}} = 585 \text{ нм}$) досліджували спектрофотометричним методом (SPECOL 1500, Analytik Jena). Вимірювання проводили у скляній кюветі з товщиною шару 1 см в діапазоні довжини хвиль 190–1100 нм при температурі $21 \pm 2^\circ \text{C}$. Фентон-подібні системи готували на основі пероксиду водню та іонів мангану(II), кобальту(II), заліза(II) та (III), без регулювання рН системи.

Результати зміни інтенсивності забарвлення розчинів МФ та ХТС протягом 30 хв наведено в Табл. Показано, що найбільш ефективною в умовах проведення експерименту є класична система ($\text{Fe}^{2+} + \text{H}_2\text{O}_2$), для якої вже через 5 хв від початку експерименту спостерігається знебарвлення МФ і ХТС на 96 і 90 % відповідно. Для суміші $\text{Fe}^{3+} + \text{H}_2\text{O}_2$ спостерігається подібна тенденція.

Таблиця. Вплив іонів змінної валентності на конверсію (S) МФ та ХТС у часі.
[МФ]₀ = $2,0 \cdot 10^{-5} \text{ М}$; [ХТС]₀ = $3,7 \cdot 10^{-5} \text{ М}$; [Me^{n+}]₀ = $1 \cdot 10^{-3} \text{ М}$; [H_2O_2]₀ = $2 \cdot 10^{-3} \text{ М}$

Me^{n+}	рН	МФ			ХТС		
		$S_5, \%$	$S_{20}, \%$	$S_{30}, \%$	$S_5, \%$	$S_{20}, \%$	$S_{30}, \%$
Fe^{2+}	5	96	97	97	90	90	90
Fe^{3+}	3	93	94	94	92	93	93
Co^{2+}	6	0	1,6	2,2	12	18	22
Mn^{2+}	6	1,9	2,0	2,1	9	60	77

Іони Co^{2+} та Mn^{2+} виявилися менш ефективними у знебарвленні МФ і ХТС. Максимальний ступінь знебарвлення становить 77 % для системи ХТС + $\text{Mn}^{2+} + \text{H}_2\text{O}_2$. При цьому для МФ зміна не перевищує 2 %, незалежно від типу іона у Фентон-подібній системі. Очевидно, це пов'язано з різною здатністю функційних груп барвників реагувати з утворюваними О-центрованими радикалами, а також зі зміною типу частинок, що беруть участь у реакції утворення таких радикалів, у середовищі, близькому до нейтрального, і неможливістю їх повернення у редокс-цикл.

Таким чином, в умовах проведення експерименту іони металів змінної валентності в присутності пероксиду водню за ефективністю знебарвлення ХТС можуть бути розташовані в наступній послідовності: $\text{Fe}^{2+} > \text{Fe}^{3+} > \text{Mn}^{2+} > \text{Co}^{2+}$. У випадку МФ $\text{Fe}^{2+} > \text{Fe}^{3+} > \text{Mn}^{2+} \approx \text{Co}^{2+}$.

STABILITY OF NANOPOROUS SILVER FOAMS IN ELECTROCATALYTIC DEHALOGENATION OF ORGANIC HALIDES

Mishura A. M.¹, *Lytvynenko A. S.*¹, Gavrilenko K. S.², Kolotilov S. V.¹

¹L. V. Pisarzhevskii Institute of Physical Chemistry of the National Academy of Sciences of Ukraine, Nauky av., Kyiv, 03028, Ukraine

²ChemBioCenter, National Taras Shevchenko University of Kyiv, Chervonotkatska str., 61, Kyiv, 02094, Ukraine
anton.s.lytvynenko@gmail.com

Nanoporous metal foams (NMFs) are relatively new class of nanoscale materials which consist of metals nanoparticles or filaments interconnected in such way that they form 3D structure. Such materials can be promising for creation of novel supercapacitors, heat sinks, catalysts, electrocatalysts *etc.* It was previously shown by us that Ag NMF fabricated by cathodic electrodeposition of Ag under high current density from acidic aqueous solutions manifested enhanced electrocatalytic activity in reactions of organic halides electroreduction compared to smooth Ag. However, for practical application of Ag NMF, their stability in the course of electrochemical processes should be evaluated.

The aim of this work was to estimate stability of Ag NMF sample in the course of electrochemical reduction of organic halides by the means of cyclic voltammetry (CV) and to compare the stability in the reactions of reduction of different organic halides.

The Ag NMF samples were deposited from $\text{AgBF}_4 + \text{HBF}_4$ aqueous solution onto glassy carbon disk electrode. The resulted coatings were tested by CV in electrochemical reduction of a set of organic halides, including 1-bromo-4-fluorobenzene (FPhBr), CF_3CHClBr and CF_2Br_2 (medium – 0.1 $(\text{C}_4\text{H}_9)_4\text{NBF}_4$ in DMF). The potentials of cathodic peaks which could be attributed to the organic halides reductive dehalogenation were less negative on Ag NMF compared to smooth Ag which could indicate higher electrocatalytic activity of the former that could be explained by existence of active sites on the surface of Ag NMF. Series of consequent CV scans were performed for each halide in two regimes: 1) the scanning was stopped after each scan and the solution was thoroughly stirred; 2) the scanning was performed mostly without interruption and was stopped and the solution was stirred only before selected scans. CVs of consequent scans of all studied halides were highly reproducible within regime 1 which could indicate their stability in such regime. The scanning in regime 2 led to reversible (recovered after stirring) current decay of FPhBr (Fig.) and CF_2Br_2 reduction peaks (which could be explained by exhausting of the halides within the NMF pores) and to irreversible cathodic shift (Fig.) in the case of CF_3CHClBr . Such irreversibility could be explained by the NMF active sites degradation due to formation of soluble Ag π -complexes with $\text{CF}_2=\text{CHCl}$ (CF_3CHClBr reduction product).

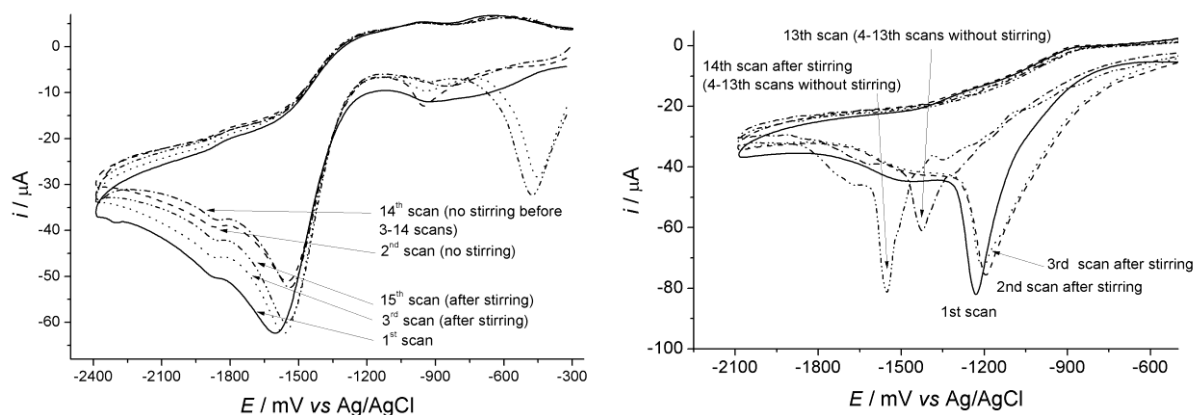


Fig. CVs of FPhBr (5.3 mM, left) and CF_3CHClBr (5.5 mM, right) on Ag NMF

ЕФЕКТИВНІСТЬ РЕАКЦІЇ ФЕНТОНА В ПРОЦЕСІ ЗНЕБАРВЛЕННЯ МЕТИЛОВОГО ФІОЛЕТОВОГО

Макарова Л. О.¹, Жильцова С. В.¹, Опейда Й. О.^{1,2}

¹Донецький національний університет імені Василя Стуса

²Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії
і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України

makarova.l@donnu.edu.ua

Синтетичні барвники, які широко використовуються в текстильній, косметичній, харчовій, фармацевтичній промисловості, є одними із забрудників навколишнього середовища. Розробка нових методів очищення води включає в себе дослідження процесів окислення, де генеруються гідроксильні радикали як первинні окисники. До них належить реактив Фентона (суміш H_2O_2 та Fe^{2+}). Мета даної роботи – дослідження ефективності реактиву Фентона в процесі знебарвлення метилового фіолетового (МФ) при різних концентраціях компонентів, рН системи, а також у присутності добавок речовин природного походження.

Кінетику окисаційної деструкції барвника вивчали спектрофотометричним методом за довжини хвилі 585 нм. рН системи для більшості дослідів становило 3,5.

Встановлено вплив початкової концентрації Fe^{2+} та H_2O_2 на початкову швидкість (W_0) реакції та перетворення (S) барвника у часі. Показано, що за умов експерименту з підвищенням $[\text{H}_2\text{O}_2]$ W_0 зростає, а зі збільшенням $[\text{Fe}^{2+}]$ – зменшується. Максимальний ступінь перетворення МФ досягається при 0,9 мМ $[\text{Fe}^{2+}]_0$ і 0,5–0,6 мМ $[\text{H}_2\text{O}_2]_0$. Співвідношення $[\text{H}_2\text{O}_2]:[\text{Fe}^{2+}]$, за яких забезпечується швидке знебарвлення субстрату, лежать у межах 2:1–4:1. Показано вплив рН на ступінь знебарвлення субстрату. При проведенні процесу без підкислення реакційної суміші (рН ~5) знебарвлення МФ відбувається повільніше: початкова швидкість в 1,5–5 разів менша (залежно від концентрації субстрату); конверсія за 30 хв в 1,5–2 нижча.

Встановлено, що ефективність системи Фентона при знебарвленні МФ можна змінити введенням аскорбінової кислоти (АК) та фруктози (Ф) (табл.). Аналіз даних, наведених у таблиці, показав, що в залежності від концентрації $[\text{Ф}]_0$ чи $[\text{АК}]_0$, може спостерігатися прискорення чи пригнічення реакції окислення МФ. При введенні $1,5 \cdot 10^{-3}$ М $[\text{Ф}]_0$ чи $[\text{АК}]_0$, S барвника не перевищує 28 % за 60 хв, в той час коли концентрація добавки становить $5 \cdot 10^{-5}$ М, ступінь перетворення субстрату дещо підвищується порівняно з системою без введення додаткових компонентів.

Таблиця. Значення конверсії (S) окислення МФ реактивом Фентона
в залежності від концентрації $[\text{АК}]_0$ та $[\text{Ф}]_0$.

$[\text{МФ}]_0 = 1,75 \cdot 10^{-5}$ М, $[\text{H}_2\text{O}_2]_0 = 4,0 \cdot 10^{-4}$ М, $[\text{Fe}^{2+}]_0 = 1,0 \cdot 10^{-4}$ М, рН = 3,5

$[\text{АК}]_0 \cdot 10^3$, М	S , %			$[\text{Ф}]_0 \cdot 10^3$, М	S , %		
	1 хв	10 хв	60 хв		1 хв	10 хв	60 хв
0	46	80	91	0	46	80	91
0,005	53	90	96	0,005	59	93	97
0,029	44	83	93	0,029	47	81	92
0,05	36	77	89	0,05	35	71	88
1,50	17	21	23	1,50	26	27	28

Таким чином, варіювання рН системи, співвідношення компонентів, а також введення аскорбінової кислоти чи фруктози дозволяють варіювати швидкість і ступінь знебарвлення субстрату.

**ВПЛИВ ВМІСТУ СТАБІЛІЗАТОРІВ НА ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ
НАНОКРИСТАЛІЧНИХ ПОРОШКІВ СИСТЕМИ $ZrO_2-Y_2O_3-CeO_2$** *Мапек І. О.*

Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України, відділ фізико-хімії і технології тугоплавких оксидів, вул., Кржижанівського, 3, Київ-142, 03680,
Україна

Mega_marekirina@ukr.net

Матеріали на основі діоксиду цирконію володіють унікальним комплексом фізико-механічних властивостей, завдяки дії ефекту трансформаційного зміцнення. Відсутність реакцій з живим організмом дозволяє застосовувати біоінертну кераміку на основі ZrO_2 в якості заміни пар тертя тазостегнових суглобів і суцільнокерамічних конструкцій в ортопедичній стоматології. Для цих цілей в основному застосовується діоксид цирконію, стабілізований Y_2O_3 (3Y-TZP). Однак для цих композитів характерний ефект низькотемпературної деградації властивостей у вологому середовищі (старіння), який полягає в неконтрольованому фазовому переході тетрагонального твердого розчину на основі ZrO_2 ($T \rightarrow ZrO_2$) в моноклінну модифікацію ($M \rightarrow ZrO_2$). Рішенням цієї проблеми є сумісне легування ZrO_2 оксидами ітрію та церію, тому закономірним є інтерес до розробки матеріалів системи $ZrO_2 - Y_2O_3 - CeO_2$, так як комплексне легування ZrO_2 оксидами ітрію і церію призведе до підвищення характеристик міцності і стійкості до старіння композитів на основі ZrO_2 .

Ціль роботи: вивчити фізико-хімічні зміни властивостей нанокристалічних порошків системи $ZrO_2-Y_2O_3-CeO_2$ після отримання, та термічної обробки.

Для дослідження обрано нанокристалічні порошки складу (мол. %): $95 ZrO_2 - 3 Y_2O_3 - 2 CeO_2$ (Zr_3Y_2Ce); $90 ZrO_2 - 2 Y_2O_3 - 8 CeO_2$ (Zr_2Y_8Ce), одержані гідротермальним синтезом у лужному середовищі.

Методи дослідження: рентгенофазовий аналіз; диференціально – термічний аналіз; електронна мікроскопія; метод БЕТ.

Визначено, що після гідротермального синтезу у порошках Zr_2Y_8Ce та Zr_3Y_2Ce утворились термодинамічно нерівноважні системи, до складу яких входять низькотемпературний метастабільний кубічний твердий розчин на основі діоксиду цирконію F- ZrO_2 , та T- ZrO_2 .

Встановлено, що характер дериваторам сумішей для синтезу порошків Zr_3Y_2Ce та Zr_2Y_8Ce після гідротермального синтезу подібний. Головна відмінність полягає у інтенсивності ендотермічних ефектів на кривих ДТА, присутності незначного ендотермічного ефекту при температурі 315 °С на кривій ДТА порошку Zr_3Y_2Ce , та незначного екзотермічного ефекту при вказаній температурі на кривій ДТА порошку Zr_2Y_8Ce .

Процес термічної обробки вказаних складів в інтервалі температур 400–1300 °С супроводжується фазовими перетвореннями F- $ZrO_2 \rightarrow$ T- ZrO_2 та спіканням одержаних порошків. Розмір первинних частинок змінюється від 10 до 25 нм, питома поверхня порошку складу Zr_3Y_2Ce змінюється від 1 до 82 м²/г, а питома поверхня складу Zr_2Y_8Ce змінюється від 2 до 94 м²/г.

Одержані порошки буде використано при мікроструктурному проектуванні композитів на основі ZrO_2 , стійких до процесу старіння у вологому середовищі.

КИСЛОТНЫЙ КАТАЛИЗ В РЕАКЦИЯХ УГЛЕВОДОРОДОВ В СЕРНОКИСЛОТНЫХ РАСТВОРАХ ВАНАДИЯ(V) И 1-АДАМАНТАНОЛА

Мерзликина М. А., Волкова Л. К.

Институт физико-органической химии и углехимии им. Л. М. Литвиненко

НАН Украины

volkovalk@gmail.com

Изучение сернокислотных растворов электрофилов (E^+) в активации связи C–H в углеводородах ароматических (ArH) и насыщенных (RH) остается актуальным в современной физико-органической химии. Кинетические данные по субстратной селективности и ее температурной зависимости в этих реакциях позволили: 1) ароматическое электрофильное замещение рассматривать как контролируемые основностью арена или его потенциалом ионизации; 2) электрофилы в реакциях $RH + E^+$ представить двумя основными группами – H-электрофилы (карбокатионы: адамантильный $1-Ad^+$, протонированные антрацен и формальдегид, олигомеры циклогексена; комплексы ртути(II) и Pt_2^{III}) отрывают гидрид-ион и C-электрофилы (комплексы палладия(II) и ванадия(V), катионы OH^+ и NO_2^+) замещают у атома углерода с синхронным отрывом протона. Для выбора активной частицы и механизма ее действия весьма полезными представляются данные по кислотному катализу.

В работе проанализировано влияние кислотности среды на константу скорости (k) в реакциях ArH и RH в сернокислотных растворах метаванадиевой кислоты HVO_3 и 1-адамантанола (обозначим $1-AdOH$).

Таблица. Зависимость величины $\log k^*$ от функции кислотности Гаммета $-H_0$ и от функции $-H_R^{**}$ в реакциях ArH и RH в растворах $HVO_3 - H_2SO_4$ и $1-AdOH - H_2SO_4$

Электрофил	комплексы ванадия(V)		1-адамантильный катион	
Субстрат	ArH	2,3-(CH ₃) ₂ C ₄ H ₈	C ₆ H ₅ CH ₃	c-C ₆ H ₁₂
[H ₂ SO ₄] в мас. %; T в °C	57 – 65; 30	84 – 90; 60	66 – 78; 30	85 – 94; 70
$-(\Delta \log k / \Delta H_0)$	$1,6 \pm 0,1^{***}$	$\leq 2,1$	$1,4 \pm 0,2$	$1,48 \pm 0,09$
$-(\Delta \log k / \Delta H_R)$	$0,8 \pm 0,1^{***}$	$\leq 1,2$	$0,87 \pm 0,08$	$0,83 \pm 0,05$

*Для реакций $ArH + VO_2^+$, $ArH + 1-Ad^+$, $RH + 1-Ad^+$ k в кг·моль⁻¹·с⁻¹, для $RH + V_3O_2^{11+}$ k в кг^{1,5}·моль^{-1,5}·с⁻¹. ** $-H_R$ характеризует способность кислотных растворов превращать спирты в карбокатионы. ***Среднее по данным для толуола, толуола-d₈ и этилбензола.

Как следует из таблицы, в растворах $HVO_3 - H_2SO_4$ и $1-AdOH - H_2SO_4$ активация связи C–H в насыщенных углеводородах, по сравнению с активацией бензола и алкилбензолов, наблюдается в более кислой среде, начиная с $[H_2SO_4] \geq 84 \%$.

В случае растворов $HVO_3 - H_2SO_4$ константа k растет с ростом $[H_2SO_4]$: для аренов от 57 до 65 % H_2SO_4 , далее до 68 % H_2SO_4 не изменяется; для 2,3-диметилбутана от 84 до 90 % H_2SO_4 , далее до 93 % H_2SO_4 не изменяется. В реакции с RH величина наклонов $-(\Delta \log k / \Delta H_0)$ и $-(\Delta \log k / \Delta H_R)$ почти в 1,5 раза выше, чем в реакции с аренами. Это согласуется с тем, что образование активной частицы мономера ванадия(V) VO_2^+ для реакции с ArH требует менее глубокого протонирования ($HVO_3 + H^+ \leftrightarrow VO_2^+ + H_2O$), чем образование для реакции с RH новой активной частицы тримера ванадия(V) $[-V-O-V-]$ из VO_2^+ и димера ванадия(V) $V_2O_3^{4+}$ ($VO_2^+ + V_2O_3^{4+} + 6H^+ \leftrightarrow V_3O_2^{11+} + 3H_2O$). Концентрации активных частиц достигают равновесного предела и не изменяются в области $[H_2SO_4] = 65-68 \%$ для VO_2^+ и $90-93 \%$ для $V_3O_2^{11+}$.

В растворах $1-AdOH$ величины наклонов одинаковы в реакции с толуолом при $[H_2SO_4] = 66-78 \%$ и с циклогексаном при $85-94 \%$ H_2SO_4 . В реакциях с ArH и с RH реагирует одна и та же активная частица $1-Ad^+$. При повышении $[H_2SO_4] > 85$ мас. % катионы $1-Ad^+$ менее сольватированы, более активны и способны реагировать с RH.

**ОПИСАННЯ МАСОПЕРЕНОСУ БІЛЯ ОБЕРТОВОГО ДИСКОВОГО
ЕЛЕКТРОДУ: АНАЛІЗ НАБЛИЖЕНЬ В ДИФУЗНОМУ ШАРІ***Мищенко В. В.¹, Ткачук М. М.¹, Боштан Ю. В.¹, Юзькова В. Д.²*¹ВДНЗ України «Буковинський державний медичний університет»²Інститут післядипломної педагогічної освіти Чернівецької області

mishchenchuk.vitalij@bsmu.edu.ua

Актуальність. Під час інтерпретації експериментальних даних різних електрокінетичних методів аналізу за низької іонної сили користуються спрощеною класичною моделлю масопереносу, коли приелектродний простір розбивається на дифузний, дифузійний шари та об'єм розчину. В кожному з яких використовуються ті чи інші наближення, зокрема в дифузному шарі приймається рівноважний больцманівський розподіл компонентів, в дифузійному - умова електронейтральності, в об'ємі розчину – постійність концентрацій компонентів. Однак строгого математичного обґрунтування всіх наближень пов'язаних із заміною строгої крайової задачі спрощеними моделями та їх залежності від керуючих параметрів системи до кінця не здійснено.

Мета роботи. В роботі ставиться мета дослідити похибки, які виникають при інтерпретації результатів електрокінетичних методів аналізу, за рахунок класичних наближень в розв'язку крайової задачі балансових рівнянь. **Завдання:**

1) Використовуючи загальноприйняту та апробовану теорію масопереносу в розчинах з низькою силою, знайти стаціонарні концентраційні розподіли компонентів розчину в дифузному шарі та порівняти їх з рівноважним больцманівським концентраційним розподілом.

2) Визначити, які похибки можуть виникнути в розрахунках кінетичних параметрів (константи швидкості, коефіцієнту переносу) при нехтуванні нерівноважністю дифузного шару для потенціаостатичного контролю з допомогою електрокінетичних методів (наприклад методом стаціонарної вольтамперометрії) та дослідити їх залежність від різних контролюючих та специфічних параметрів системи (коефіцієнту швидкості, товщини дифузного шару/ іонної сили розчину, потенціалу, заряду електроактивного компонента) в області фізично розумних діапазонів їх зміни.

3) Визначити, як залежать розміри дифузного шару від керуючих параметрів системи та прийнятої точності моделювання.

Результати роботи. Проаналізовано залежність похибок, які виникають при класичних наближеннях стаціонарної моделі масопереносу в приелектродному просторі на ОДЕ, від керуючих параметрів системи. Знайдено області, де наближення больцманівського розподілу електроактивних компонентів в дифузному шарі призводить до суттєвих похибок і навіть невірних результатів. Дані області найбільше залежать від заряду електроактивного компонента, іонної сили розчину, потенціалу та константи швидкості електродної реакції. Показано залежність розмірів дифузного шару від керуючих параметрів та прийнятої точності моделювання.

Висновки. Результати детального теоретичного аналізу ефекта Левича, який проведений в роботі, можуть бути використані для:

-цілеспрямованого експериментального пошуку, виявлення та аналізу ефекта Левича;

-створення умов для проведення експериментальних досліджень кінетики методом стаціонарної вольтамперометрії, які дозволять уникнути похибок пов'язаних з нерівноважністю дифузного шару;

-розрахувати поправки до виправлених тафелівських залежностей, які базувалися на рівноважних моделях дифузного шару, а отже виправити неточності у визначенні кінетичних параметрів електродного процесу.

**МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ АДСОРБЦІЇ АНТОЦΙΑНІВ
ОЖИНИ З ВОДНИХ ЕКСТРАКТІВ НА БЕНТОНІТІ***Новотна В. О.*Одеський національний університет імені І. І. Мечникова
novotna-viktoria@ukr.net

В останні роки доведено, що антоціани, як природні барвники, можуть замінити канцерогенні синтетичні барвники в харчовій та фармацевтичній промисловості. Підвищений інтерес до антоціанів обумовлений також тим, що вони мають потужні антиоксидантні властивості для профілактики та лікування різних захворювань. В багатьох країнах світу проводяться дослідження для отримання антоціанів в промислових масштабах, але бракує систематичних адсорбційних досліджень, які б дозволили описати адсорбційний процес за допомогою математичних моделей і застосувати ці моделі для оптимізації процесу.

Мета даної роботи: провести кінетичні та рівноважні дослідження процесу адсорбції антоціанів ожини з водних екстрактів на бентоніті при різних температурах в статичних умовах і проаналізувати отримані експериментальні результати за допомогою сучасних кінетичних моделей та рівнянь ізотерм адсорбції.

Об'єктом дослідження були ягоди ожини, які зібрані в Вінницькій області. Доцільність вибору ожини обумовлена тим, що це доступне і дешеве в Україні джерело антоціанів з дуже великим вмістом антоціанів. Екстракт антоціанів ожини готували методом мацерації гомогенізованих заморожених ягід в 0,1 М водному розчині HCl. Адсорбентом обрано бентоніт Дашуковського походження (Україна), який являє собою лужноземельний силікат.

Умови при кінетичних дослідженнях: витрата адсорбенту 3–6 г/л, концентрація антоціанів 60–130 мг/л, температура 293–333 К і pH = 2–4. Умови при рівноважних дослідженнях: температура 293–323 К, концентрація антоціанів 60–240 мг/л, витрата адсорбенту 2 г/л, час адсорбції 2 год, pH = 2.

Проведені кінетичні дослідження показали, що адсорбція антоціанів ожини на бентоніті швидко зростає протягом перших 30 хв, а потім збільшується повільно до рівноважного часу, який дорівнює 60 хв в інтервалі 293–303 К і 120 хв при 323 К. Аналіз експериментальних кінетичних кривих адсорбції антоціанів ожини на бентоніті за допомогою кінетичних моделей псевдопершого та псевдодругого порядків показав, що вони краще описуються кінетичним рівнянням псевдодругого порядку.

При проведенні адсорбційних рівноважних досліджень важливо визначити відповідні кореляції для ізотерм адсорбції. Встановлено, що експериментальні ізотерми адсорбції антоціанів ожини на бентоніті краще описуються рівнянням ізотерми адсорбції Ленгмюра, ніж рівнянням ізотерми адсорбції Фрейндліха. Адсорбційна ємність бентоніту щодо антоціанів ожини дорівнює 100 мг/г при 293 К, а при збільшенні температури зменшується до 77 мг/г при 323 К.

Термодинамічні розрахунки адсорбції антоціанів ожини на бентоніті показали, що в діапазоні температур 293–323 К процес адсорбції самодовільний ($-\Delta G^{\circ} = 23,6\text{--}24,0$ кДж/моль) і екзотермічний ($\Delta H^{\circ} = -30,2$ кДж/моль), зміна ентропії процесу адсорбції має від'ємне значення ($-\Delta S^{\circ} = 21,3\text{--}21,4$ Дж/(моль·К)).

Таким чином, отримані результати досліджень дозволили провести математичне моделювання процесу адсорбції антоціанів ожини з водних екстрактів на бентоніті, отримати відповідні рівняння, і вони можуть бути застосовані для прогнозування оптимальних умов адсорбції антоціанів ожини на бентоніті та свідомого керування адсорбційним процесом в промислових умовах.

Олімова Г. А., Христенко І. В.

olimova.anna@gmail.com

Надійну інформацію про властивості середовища на поверхні гібридних матеріалів надає зондування поверхні сольватохромними індикаторами.

Було виявлено існування в приповерхневому шарі досліджених матеріалів ділянок кислотної та основної природи та ділянок, що розрізняються за кислотними властивостями.

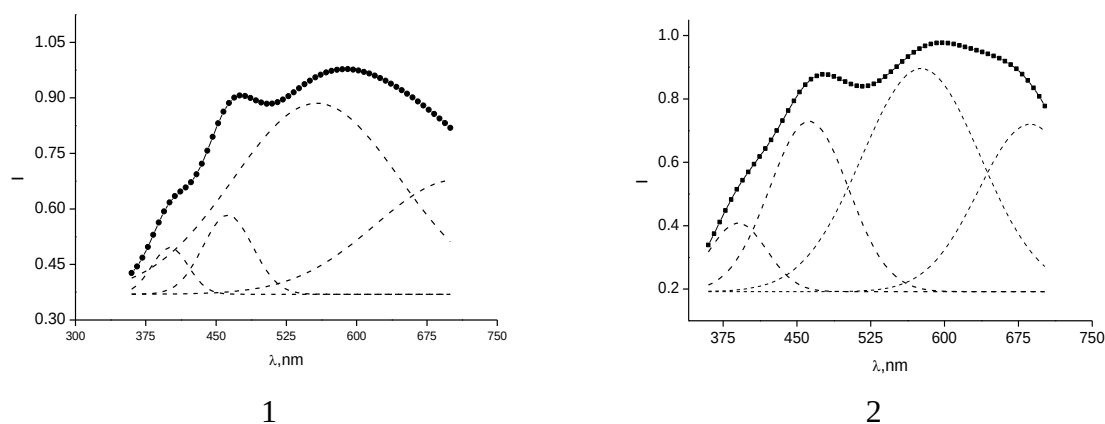


Рис. Спектр поглинання індикатору (1 – адсорбованого з етанолу на поверхні матеріала 1, $c^S = 0.021$ ммоль/г; 2 – адсорбованого з дихлоретану на поверхні матеріала 1, $c^S = 0.049$ ммоль/г)

205

**ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ
НА ОСНОВЕ ФЕРРИТА ВИСМУТА $\text{Bi}_{0,95}\text{Pr}_{0,05}\text{FeO}_3$, $\text{Bi}_{0,95}\text{La}_{0,05}\text{FeO}_3$, $\text{Bi}_{0,9}\text{La}_{0,1}\text{FeO}_3$**

Печенова Г. Г., Губко С. В., Дудчик Г. П., Великанова И. А.

Белорусский государственный технологический университет, г. Минск
vialikanava@belstu.by

Феррит висмута BiFeO_3 и твердые растворы на его основе являются перспективными сегнетомагнетиками. При этом сегнетомагнетики должны удовлетворять следующим основным требованиям: иметь низкую проводимость при комнатной температуре, иметь высокие значения магнитоэлектрического эффекта и высокие значения температур магнитного и электрического упорядочения.

На кафедре физической, коллоидной и аналитической химии Белорусского государственного технологического университета впервые был разработан двухстадийный твердофазный метод синтеза, позволяющий получать твердые растворы на основе феррита висмута, не содержащие примесные фазы муллита и селенита. Первая стадия заключается в синтезе прекурсоров $\text{Bi}_{2-x}\text{Ln}_x\text{Fe}_4\text{O}_9$ ($\text{Ln} - \text{La, Pr}; x = 0,2; 0,4$) из соответствующих оксидов висмута, лантана, празеодима и железа, вторая стадия – синтез целевых продуктов $\text{Bi}_{0,95}\text{La}_{0,05}\text{FeO}_3$, $\text{Bi}_{0,9}\text{La}_{0,1}\text{FeO}_3$ и $\text{Bi}_{0,95}\text{Pr}_{0,05}\text{FeO}_3$ путем взаимодействия полученных прекурсоров и оксида висмута.

На основании данных рентгенофазового анализа и ИК-спектроскопии установлены оптимальные температурно-временные условия синтеза твердых растворов сегнетомагнетиков. Рассчитаны параметры кристаллических решеток твердых растворов, которые хорошо согласуются с литературными данными для незамещенного феррита висмута BiFeO_3 .

Результаты измерений удельной электропроводности полученных твердых растворов показывают, что увеличение температуры приводит к возрастанию электропроводности, т. е. проводимость носит полупроводниковый характер. При изменении температуры в интервале 300–1100 К удельная электропроводность исследуемых твердых растворов возрастает от $1,1 \cdot 10^{-10}$ См/см до $18,4 \cdot 10^{-6}$ См/см.

На температурных зависимостях $\ln \sigma$ от $1/T$ для исследуемых твердых растворов наблюдается излом в области температур 540–556 К (вблизи температуры Нееля), что можно интерпретировать возможным антиферромагнитным фазовым переходом. По линейным участкам зависимости $\ln \sigma$ от $1/T$ определена энергия активации электрической проводимости полученных твердых растворов. Для твердых растворов $\text{Bi}_{0,95}\text{Pr}_{0,05}\text{FeO}_3$ энергия активации электрической проводимости составила 0,92–1,1 эВ для интервала температур 700–1000 К и 0,15–0,33 эВ для интервала температур 360–520 К, а для $\text{Bi}_{0,9}\text{La}_{0,1}\text{FeO}_3$ и $\text{Bi}_{0,95}\text{La}_{0,05}\text{FeO}_3$ 0,99–1,0 эВ (700–1000 К) и 0,09–0,13 эВ (360–520 К).

Полученные результаты могут быть использованы в качестве научной основы для разработки новых материалов, обладающих сегнетомагнитными свойствами и перспективных для применения в приборостроении, микроэлектронике и химической промышленности.

ЗНЕБАРВЛЕННЯ РОЗЧИНУ МЕТИЛОВОГО ФІОЛЕТОВОГО ПРИ ДІЇ СИСТЕМИ $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{Fe}^{3+}$

Плюшко О. В.¹, Жильцова С. В.¹, Опейда Й. О.^{1,2}

¹Донецький національний університет імені Василя Стуса

²Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії
і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України
plushko.o@donnu.edu.ua

Пошук ефективних систем для очищення стічних вод від органічних забрудників (поверхнево-активні речовини, антибіотики, продукти нафтопереробки, синтетичні барвники тощо) є актуальною задачею. Як один із способів дослідники виділяють реактив Фентона ($\text{H}_2\text{O}_2 + \text{Fe}^{2+}$). Крім цієї «класичної» системи існують так звані «Фентон-подібні» системи, де замість іонів двовалентного заліза застосовують інші іони металів змінної валентності, при взаємодії яких із пероксидом водню можуть бути згенеровані гідроксильні радикали. Метою даної роботи було вивчення впливу іонів заліза(III) на окислення органічних сполук пероксидом водню на прикладі барвника метилового фіолетового при різних умовах проведення процесу.

Кінетику знебарвлення розчину метилового фіолетового (МФ) досліджено спектрофотометричним методом при довжині хвилі 585 нм за температури 22 ± 2 °C. pH реакційної суміші $\sim 3,0$. За перебігом процесу сліdkували, порівнюючи початкову швидкість знебарвлення розчину субстрату, а також його конверсію у часі.

Показано, що початкова швидкість процесу (W_0) підвищується зі збільшенням концентрації компонентів (пероксиду водню, Fe^{3+}) (табл.). При цьому для використаних концентрацій іону заліза (III) значення початкової швидкості та конверсії проходять через максимум. Конверсія через 60 хв від початку процесу є найбільшою (86 %) для системи $[\text{H}_2\text{O}_2]_0 = 1 \cdot 10^{-3}$ М, $[\text{Fe}^{3+}]_0 = 1,84 \cdot 10^{-3}$ М.

Таблиця. Зміна знебарвлення розчину МФ (S) у часі та початкова швидкість процесу (W_0) при зміні концентрації H_2O_2 та Fe^{3+} . $[\text{МФ}]_0 = 2 \cdot 10^{-5}$ М, pH = 2,9

Компонент	$S, \%$					$W_0 \cdot 10^7, \text{ моль} \cdot \text{л}^{-1} \cdot \text{хв}^{-1}$
	5 хв	10 хв	20 хв	30 хв	60 хв	
$[\text{H}_2\text{O}_2]_0 \cdot 10^3, \text{ М}$	$[\text{Fe}^{3+}]_0 = 0,99 \cdot 10^{-3} \text{ М}$					
0,99	22	24	29	32	43	1,0
2,01	20	25	32	39	56	2,7
3,99	25	31	43	52	73	3,6
6,02	26	34	44	53	73	4,9
$[\text{Fe}^{3+}]_0 \cdot 10^3, \text{ М}$	$[\text{H}_2\text{O}_2]_0 = 1 \cdot 10^{-3} \text{ М}$					
0,92	22	24	29	32	43	1,0
1,84	25	33	48	62	86	4,9
1,99	21	27	38	46	53	3,4
4,04	24	28	35	41	57	2,9

Ступінь знебарвлення розчину МФ знижується в середньому на 20–25 % через 5 хв від початку вимірювань. При цьому проведення процесу протягом 60 хв не дозволяє досягти повного знебарвлення розчину за умов проведення експерименту. Це пов'язано з тим, що в реакції іонів Fe^{3+} з HOON утворюються $\text{HOON}^\bullet$ радикали, набагато менш активні ніж $\text{HO}^\bullet$. Підвищення ефективності процесу можна досягти додаванням компонентів, що сприятимуть переходу $\text{Fe}^{3+} \rightarrow \text{Fe}^{2+}$ і, відповідно, збільшуватимуть швидкість утворення активніших $\text{HO}^\bullet$ радикалів і швидкість знебарвлення субстрату.

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ КРИТИЧНОЇ КОНЦЕНТРАЦІЇ МІЦЕЛОУТВОРЕННЯ ЦЕТИЛПІРИДИНІЙ БРОМІДУ З ВИКОРИСТАННЯМ БАРВНИКА

Пономарьов В. К., Шаповалов С. А.

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна
vad.ponomarov@gmail.com

Критична концентрація міцелоутворення (ККМ) – важлива характеристика поверхнево-активних речовин, що відображує їх здатність до асоціації.

На даний момент відомо більш 100 різних способів визначення ККМ, серед яких найбільш поширеними є методи кондуктометрії, спектрофотометрії, а також способи, засновані на вимірюванні поверхневого натягу.

В даній роботі спектрофотометричне визначення ККМ поверхнево-активної речовини – цетилпіридиній броміду (ЦПБ) проводиться з використання органічного барвника сульфородаміну (родамін 200 С). Вимірюється оптична густина (А) розчинів родаміну 200 С з додаванням різних концентрацій ЦПБ. Вибір даного барвника обумовлений інтересом щодо використання його спектрально-протолітичних властивостей для вирішення задач визначення ККМ, а також порівнянням з властивостями інших барвників.

Були отримані наступні значення в максимумі поглинання при довжині хвилі $\lambda = 565$ нм та товщині світлопоглинаючого шару в 1 см. У досліді концентрація барвника підтримувалась постійною і рівною $8,49 \cdot 10^{-6}$ моль/л.

Таблиця. Значення оптичної густини при додаванні ЦПБ різних концентрацій

Концентрація ЦПБ, моль/л*10 ⁴	0 (чистий барвник)	0,0979	1,01	1,61	4,02	7,04	8,04	9,45
A _{max}	0,962	0,963	0,914	0,899	0,839	0,813	0,798	0,783

Графічно було визначено значення ККМ, що дорівнює $3,07 \cdot 10^{-4}$, яке добре узгоджується з літературними даними.

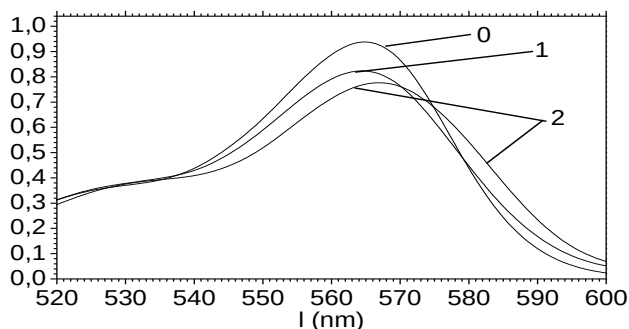


Рис. 1. Зміна світлопоглинання родаміну 200 С при додаванні ЦПБ. с(ЦПБ), моль/л*10⁴: 0 – 0, 1 – 4,02, 2 – 8,04

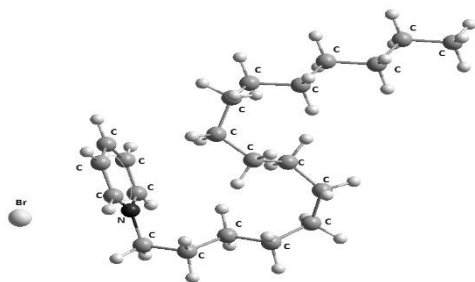


Рис. 2. Будова ЦПБ (напівемпіричний метод AM1)

Використання методів комп'ютерного моделювання дає змогу зробити висновки про розміри молекул ЦПБ та родаміну 200 С. Для ЦПБ (рис. 2.) відстань між атомом Азоту та крайнім атомом карбону складає 12,00 Å. Довжина зв'язку С-С становить 1,55 Å для кожної пари атомів. Для родаміну 200 С (рис. 3) відстань між атомами Азоту становить 9,34 Å, а відстань між атомами Сульфуру та Оксигену – 6,93 Å.

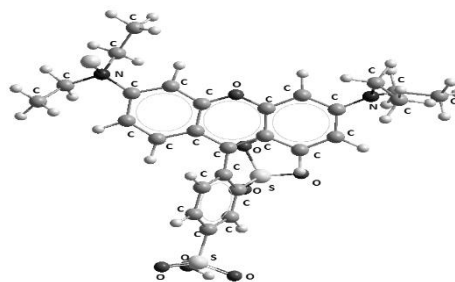


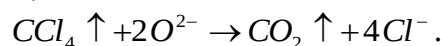
Рис. 3. Будова родаміну 200 С (напівемпіричний метод AM1)

ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ПЕРЕБІГУ ПРОЦЕСУ ОЧИСТКИ РОЗТОПУ KSr_2Cl_5 ПАРОЮ ТЕТРАХЛОРМЕТАНУ ПРИ 973 К*Ребров О. Л.^{1,2}, Чергинець В. Л.¹, Юрченко О. І.², Реброва Т. П.¹, Пономаренко Т. В.¹*¹Інститут сцинтиляційних матеріалів Національної академії наук України,
пр. Науки, 60, Харків, 61072²Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, пл. Свободи, 4, Харків, 61077
alrebrov@outlook.com

Процеси обробки галогенідних розтопів газоподібними галогенуючими агентами широко використовуються при одержанні оптичних монокристалів на основі галогенідів лужних, лужноземельних та рідкісноземельних металів для зниження концентрації оксигенвмісних домішок, що негативно впливають на функціональні параметри кінцевих матеріалів.

Сполука складу KSr_2Cl_5 з температурою плавлення 916 К [1] є перспективною для вирощування сцинтиляційних монокристалів, активованих Європієм ($\text{KSr}_2\text{Cl}_5\cdot\text{Eu}^{2+}$), завдяки досконалій ізоморфності іонів Sr^{2+} та Eu^{2+} .

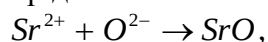
Метою даної роботи було визначення параметрів процесу очистки розтопу KSr_2Cl_5 від оксигенвмісних домішок парою тетрахлорметану при 973 К, що перебігає згідно з наступним рівнянням:



Контроль перебігу процесу проводили за поточною концентрацією оксид-іонів у розтопі, яку визначали за допомогою потенціометричного кола з використанням мембранного оксигенового електроду $\text{Pt}(\text{O}_2)|\text{ZrO}_2(\text{Y}_2\text{O}_3)$, що є оборотним до іонів O^{2-} .

Процес обробки розтопу парою CCl_4 є гетерогенним, отже, складним. Показано, що хімічна реакція у розтопі підпорядковується кінетиці II порядку по відношенню до O^{2-} . Значення константи швидкості процесу було оцінено, як $k = 1,8 \cdot 10^5 \text{ кг} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{хв}^{-1}$, при цьому розтоп може бути очищений до рівноважної концентрації іонів O^{2-} приблизно $1,65 \cdot 10^{-7} \text{ моль} \cdot \text{кг}^{-1}$. Значення константи є набагато нижчим, ніж у розтопі K_2SrCl_4 ($k = 4,4 \cdot 10^5 \text{ кг} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{хв}^{-1}$), що обумовлює нижчу ефективність процесу очистки (граничне значення концентрації оксид-іонів дорівнює $2,63 \cdot 10^{-8} \text{ моль} \cdot \text{кг}^{-1}$) [2].

Таке зниження ефективності очистки при переході від розтопу KSr_2Cl_5 до K_2SrCl_4 може бути пояснене зростанням спорідненості катіонної основи розтопу до оксид-іонів:



внаслідок зростання концентрації в ньому сильної катіонної кислоти Sr^{2+} . Втім, в обох випадках залишкова концентрація оксид-іонів є цілком задовільною з точки зору чистоти ростового хлоридного розтопу.

1. Посыпайко В.И. Диаграммы плавкости солевых систем. Ч. II. Двойные системы с общим анионом [от $\text{KBH}_4\text{-LiBH}_4$ до $\text{ZnCl}_2\text{-ZrCl}_4$]. Справочник / В.И. Посыпайко, Е.А. Алексеева, Н.А. Васина [и др.]. – М. : Металлургия, 1979. – 204 с.
2. Cherginets V.L. Investigation of course of K_2SrCl_4 melt deoxidization with CCl_4 vapor / V.L. Cherginets, T.P. Rebrova, T.V. Ponomarenko [et al.] // Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis. – 2017. – V.120, No.1 – P.31–38.

**ФОТОКАТАЛІТИЧНА АКТИВНІСТЬ НАНОКОМПОЗИТІВ Ni-TiO₂,
ОДЕРЖАНИХ НА НІКЕЛІВІЙ МАТРИЦІ***Савчук О. О., Скнар І. В., Скнар Ю. Є.*

Державний вищий навчальний заклад

«Український державний хіміко-технологічний університет»

просп. Гагаріна, 8, Дніпро, 49005, Україна

yuriy.skнар@gmail.com

Використання метилсульфонатного електроліту, що містить водорозчинну сіль титану(IV), для електроосадження покриттів Ni-TiO₂ дає змогу одержувати композити із істинного розчину і не потребує перемішування електроліту. Суттєво також, що такі композити містять нанорозмірну дисперсну фазу, яка утворюється у приелектродному шарі у вигляді колоїду безпосередньо під час електролізу. Нами було встановлено, що наноккомпозити Ni-TiO₂ демонструють більшу фотокаталітичну активність порівняно із композитами, одержаними із суспензійних електролітів. Проте, при електросинтезі Ni-TiO₂ із істинного розчину одержати покриття із значним вмістом дисперсної фази не вдається. Цілком доцільним в такому випадку може бути запропонований нами раніше спосіб нанесення композиту на металеву матрицю з розвиненою поверхнею. Таким чином можна збільшити питому кількість наночастинок TiO₂ на поверхні електроду.

В якості катодного матеріалу використовували мідну пластину, на робочу поверхню якої спочатку наносили нікелеве покриття із метилсульфонатного електроліту. Після цього осаджували нікелеву матрицю з розвиненою поверхнею із метилсульфонатного електроліту, що містив карбонільний нікелевий порошок. На фінальному етапі на сформовану матрицю електроосаджували наноккомпозит Ni-TiO₂ із метилсульфонатного електроліту, за присутності в розчині водорозчинного титану(IV). Морфологія поверхні композиту Ni-TiO₂, одержаного на гладенькій поверхні та на матриці представлена на рис. 1а та рис. 1б, відповідно.

Електросинтез наноккомпозиту за запропонованою схемою потребує урахування збільшення істинної поверхні при виборі струмового навантаження. Оскільки утворення дисперсної фази визначається інтенсивністю виділення водню на катодній поверхні, то вихід за струмом цього процесу є одним із ключових факторів формування Ni-TiO₂. Отже, густина струму при електроосадженні наноккомпозиту на матриці має бути збільшена з урахуванням розвиненості поверхні.

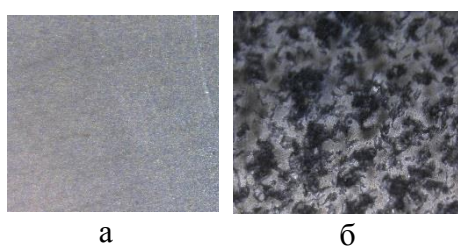


Рис. 1. Покриття Ni-TiO₂, осаджене на гладенькій поверхні (а) та на матриці (б) x 250

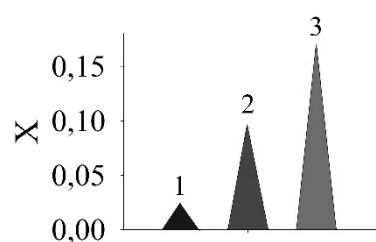


Рис. 2. Степінь перетворення барвника (X) під дією ультрафіолету в залежності від типу поверхні композиту: 1 – фон; 2 – гладенька поверхня; 3 – розвинена поверхня матриці

Дослідження фотокаталітичної активності одержаних покриттів проводили при використанні модельного розчину метилового оранжевого. Кінетичні данні розкладання барвника під дією ультрафіолетового опромінення розчину, в якому містились зразки наноккомпозиту Ni-TiO₂ показали, що покриття нанесені на нікелеву матрицю з розвиненою поверхнею проявляють фотокаталітичну активність значно вищу за аналогічні осад, одержані на гладенькій поверхні (рис. 2).

АНТИРАДИКАЛЬНА АКТИВНІСТЬ ХІНОЛІЛГІДРАЗОНІВ З ФЕНОЛЬНИМИ ФРАГМЕНТАМИ У СКЛАДІ МОЛЕКУЛ

Семененко Т. С., Хижан О. І., Хижан О. І., Ніколаєвський А. М.*

Національний університет біоресурсів і природокористування України

*Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії імені Л. М. Литвиненка НАН України
olenakhyzhan@gmail.com

Використання антиоксидантів сприяє більш тривалому зберіганню продуктів і матеріалів, вирішує деякі питання збереження здоров'я людини. Складна екологічна ситуація в Україні обумовлює необхідність застосування антиоксидантів та біоантиоксидантів для запобігання і лікування ряду хвороб, а також для підвищення адаптаційних можливостей організму людини. Більшість добавок, які використовуються на практиці належить до класів фенолів. Недостатня ефективність багатьох фенольних антиоксидантів, відсутність або дорожнеча вихідної сировини для їх отримання є причинами неможливості їх успішного використання. Все це обумовлює необхідність пошуку нових, вискоелективних антиоксидантів і біоантиоксидантів. Одними з перспективних антиоксидантів і біоантиоксидантів, які є хінолілгідрозони. В структурі цих сполук з одного боку міститься фрагмент хіноліну, з іншого боку – фрагмент гідрозону з лабільним NH-зв'язком. Хінолінове ядро входить до складу лікарських препаратів (плазмоцид, хінін) та консервантів (етоксихін). Систематичне дослідження антирадикальних властивостей хінолілгідрозонів корисно як із практичної точки зору, тому що веде до поширення асортименту речовин з антиоксидантними властивостями, так і з теоретичної, оскільки сприяє поглибленню знань щодо зв'язку хімічної будови антиоксиданта з його реакційною здатністю в реакціях радикального окиснення і з механізмом антиоксидантної дії. Моделлю для вивчення антирадикальної активності сполук є реакція з вільним стабільним радикалом дифенілпікрилгідразилом.

Метою роботи стало визначення реакційної здатності хінолілгідрозонів в реакції зі стабільним радикалом дифенілпікрилгідразилом і пероксильними радикалами етилбензолу.

Кінетика реакції хінолілгідрозонів з дифенілпікрилгідразилом вивчалася спектрофотометричним методом в різних розчинниках (гексан, бензол, метанол, ацетон). Для відносного порівняння їх антирадикальної активності використовувалася активність фенілгідрозону бензальдегіду та типового антиоксиданту – іонолу. Розчини гідрозонів з дифенілпікрилгідразилом змішували в еквімолярному відношенні компонентів в інтервалі концентрацій реагуючих речовин 10^{-3} – 10^{-5} моль·л⁻¹ і реєстрували зміну поглинання радикалу в часі в діапазоні температур 293–323K при $\lambda_{\text{max}} = 520$ нм.

Визначено антирадикальну активність гідрозонів по відношенню до стабільного радикалу дифенілпікрилгідразилу. Кінетичні криві витрачання радикалу спрямляються в координатах кінетичного рівняння другого порядку. Знайдені за методом Вант-Гоффа порядки реакції за гідрозонами близькі до одиниці, тобто, порядок за дифенілпікрилгідразилом також дорівнює 1. Розраховані константи швидкості реакції гідрозонів з радикалом є сумарними величинами, що враховують внесок декількох реакційних центрів молекули гідрозону в реакцію з радикалом. Вивчено вплив розчинника на реакційну здатність гідрозонів у реакції з дифенілпікрилгідразилом. Встановлено кореляцію між константами швидкості реакції хінолілгідрозонів з дифенілпікрилгідразилом зі значеннями констант швидкостей реакції цих сполук з пероксильними радикалами етилбензолу.

ВЛИЯНИЕ ТРИФТОРУКСУСНОЙ КИСЛОТЫ НА ПРОЦЕСС ОСНОВНО-КАТАЛИЗИРУЕМОГО ОКИСЛЕНИЯ АНТРОНА МОЛЕКУЛЯРНЫМ КИСЛОРОДОМ В ДМСО*Сердюк А. А.,* Касянчук М. Г.Институт физико-органической химии и углехимии им. Л. М. Литвиненко НАНУ
ganna.serdyuk@gmail.com

Считается, что каталитический эффект аминов в процессе окисления антрона молекулярным кислородом в ДМСО реализуется за счет того, что амин способствует отрыву протона от молекулы субстрата (антрона) с образованием карбаниона. Добавление сильных кислот при этом должно уменьшать концентрацию протон-акцептора (амин) и, соответственно, снижать его каталитическую активность.

Для проверки этой гипотезы было исследовано влияние трифторуксусной кислоты (TFA) на окисление антрона в ДМСО, катализируемое триэтиламино (рис.). Данная кислота является достаточно сильной органической кислотой и хорошо растворяется в исследуемой системе.

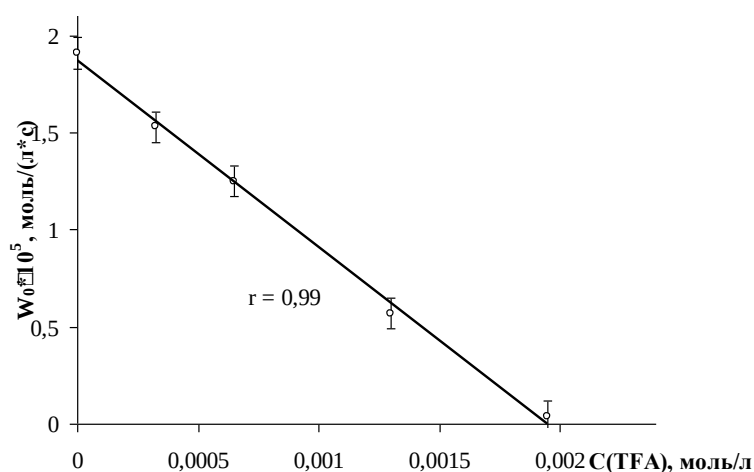
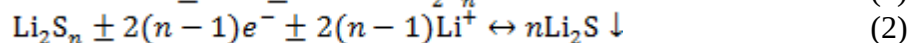


Рис. Зависимость начальной скорости поглощения кислорода в реакции окисления антрона (0,05 моль/л) от концентрации трифторуксусной кислоты (TFA) в присутствии триэтиламина (0,0072 моль/л) при 307 К и 760 мм рт. ст.

Установлено, что при увеличении концентрации кислоты, наблюдается пропорциональное снижение начальной скорости поглощения кислорода. При соотношении TFA : амин $\approx 1 : 3$ поглощение кислорода практически полностью прекращается. Поскольку литературе для диметилового эфира, ДМСО, ацетона и ацетонитрила описаны случаи формирования комплексов молекул растворителя с протоном в стехиометрии $1 : 3$, наблюдаемую закономерность можно объяснить тем, что образующаяся в результате взаимодействия TFA и амина соль образует комплекс с еще двумя молекулами амина, тем самым инактивируя их.

**УДЕЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЛИТИЙ-СЕРНЫХ ЯЧЕЕК
В СОЛЬ-СОЛЬВАТНЫХ ЭЛЕКТРОЛИТАХ***Сирош В. А., Глоба Н. И.*Межведомственное отделение электрохимической энергетики НАН Украины
siroshvitalik@ukr.net

Литий-серные батареи рассматриваются как одни из потенциальных перспективных источников тока нового поколения. Значительный интерес к этой редокс системе вызван ее высокими значениями теоретической удельной емкости (1675 А·ч/кг) и удельной энергии (2600 Вт·ч/кг). Кроме того, сера является достаточно распространенным, экологически безопасным и недорогим материалом. Однако, литий-серные батареи имеют ряд недостатков, препятствующих их коммерциализации. Одной из главных проблем Li-S редокс пары является растворение в электролите длинноцепочных полисульфидов лития общей формулы Li_2S_n ($n \geq 4$) и образование в конце разряда труднорастворимого сульфида лития (Li_2S) в соответствии с реакциями 1 и 2, приведенными ниже.



Эти причины в основном и приводят к достаточно быстрому снижению удельных характеристик литий-серных батарей при циклировании и высокому саморазряду при хранении, особенно при повышенных температурах. Одним из возможных путей решения этих проблем является замена традиционных карбонатных электролитов новыми, модифицированными или оптимизированными электролитами, которые бы предотвращали нежелательные процессы растворения полисульфидов.

Как потенциально перспективные электролиты для литий-серных батарей исследуются концентрированные бинарные растворы. Комбинация определенных солей лития и глимового растворителя при высоких концентрациях ведет к образованию устойчивых сольватных структур, которые находятся в жидком состоянии, даже в области низких температур.

В настоящей работе приведены результаты исследований удельных характеристик литий-серных ячеек при циклировании в интервале температур от 25 °С до 60 °С. Как электролиты в Li-S ячейках использованы бинарные смеси диметилового эфира тетраэтиленгликоля и соли бис(трифторметан)сульфонимида лития различной концентрации (от 0,33 мольных долей до 0,5 мольных долей). Предварительно для этих растворов были определены величины удельной электропроводности с использованием метода импедансной спектроскопии в интервале температур 25÷60 °С. Электрохимические испытания Li-S редокс пары проводили в макетных образцах дисковой конструкции с использованием многоканальной системы тестирования BST-5V10mA (Китай) при плотности тока 0,1 мА/см².

Нами было определено, что растворы состава диметилловый эфир тетраэтиленгликоля – имидная соль лития ($\text{LiN}(\text{CF}_3\text{SO}_2)_2$) имеют приемлемый уровень проводимости ($\sim 10^{-3}$ См/см), даже при концентрации соли 0,5 мольных долей, высокие термическую и электрохимическую стабильность. С помощью метода гальваностатического циклирования экспериментально установлена наиболее оптимальная концентрация соль-сольватного раствора, которая равна 0,4 мольных доли соли, и при которой достигаются высокие и стабильные характеристики Li-S ячеек как при комнатной, так и при повышенной температурах (значения удельной емкости находились в пределах 600÷650 мА·ч/г).

ЕЛЕКТРООСАДЖЕННЯ КОМПОЗИТІВ Ni-TiO₂ ІЗ МЕТИЛСУЛЬФОНАТНОГО ЕЛЕКТРОЛІТУ, ЩО МІСТИТЬ ВОДОРОЗЧИННУ СІЛЬ ТИТАНУ(IV)

Скнар Ю. Є., Скнар І. В., Савчук О. О., Безик А. О.

Державний вищий навчальний заклад
«Український державний хіміко-технологічний університет»
просп. Гагаріна, 8, Дніпро, 49005, Україна
yuriy.skнар@gmail.com

Осади Ni-TiO₂ вирізняються серед композиційних електрохімічних покриттів фотокаталітичними властивостями. Це обумовлено тим, що у водному розчині під дією ультрафіолетового опромінення на поверхні титан диоксиду генеруються хімічно активні гідроксид-радикали. Останні взаємодіють із присутніми в розчині органічними сполуками. Цей феномен виявився корисним при знешкодженні токсинів, що містяться в стічних водах текстильного, харчового, лакофарбового виробництв.

Зазвичай композит Ni-TiO₂, одержують електролізом суспензійних електролітів, що містять дисперсний титан диоксид. Такий спосіб електросинтезу композитів має ряд недоліків. Зокрема, для підтримки дисперсної фази в електроліті у зваженому стані необхідне безперервне перемішування електроліту. Крім того, дисперсні частинки TiO₂ мають низьку агрегативну стійкість в об'ємі електроліту. Отже, вельми привабливою видається ідея одержувати композиційні покриття із істинних розчинів, де дисперсна фаза утворюється у прикатодному шарі під час електролізу. Таке можливе завдяки перебігу паралельного катодного процесу виділення водню, що супроводжується підвищенням рН приелектродного шару. Проте, складність формування композиту Ni-TiO₂ із істинного розчину полягає у надто низьких значеннях рН гідратоутворення титан(IV). Використання традиційних електролітів нікелювання за такої кислотності неможливе з огляду практично нульового виходу за струмом нікелю. Подолати цю незручність можна при роботі із метилсульфонатним електролітом, граничні значення рН для якого суттєво нижчі, ніж для інших електролітів. У даній роботі одержані композити Ni-TiO₂ із метилсульфонатного електроліту, що містив у якості прекурсор титан(IV) хлорид. Значення рН підтримували не більше -0,5. Температура електроліту підтримувалась за допомогою термостатованої водяної бані на рівні 303 К.

Встановлено, що вміст титан диоксиду в нікелевому покритті збільшується при зменшенні концентрації іонів нікелю та при збільшенні концентрації іонів титану(IV) в електроліті. Композити Ni-TiO₂, одержані зазначеним способом, містять майже в десять разів меншу кількість TiO₂ порівняно із покриттями Ni-TiO₂, осадженими із суспензійного метилсульфонатного електроліту. Проте, фотокаталітична активність цих покриттів подібна (рис.).

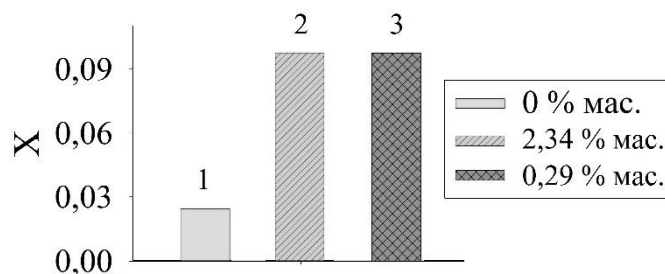


Рис. Ступінь перетворення метилового оранжевого (X) під дією ультрафіолету в залежності від типу електроліту осадження композиту Ni-TiO₂:

1 – фоновий метилсульфонатний електроліт; 2 – суспензійний метилсульфонатний електроліт, що містить порошок TiO₂; 3 – істинний розчин метилсульфонатний електроліт, що містить водорозчинну сіль титану(IV)

СПЕКТРАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМ АСКОРБИНОВОЙ КИСЛОТЫ В ПРОЦЕССАХ РАДИКАЛЬНО-ЦЕПНОГО ОКИСЛЕНИЯ

Ефимова И. В., *Смирнова О. В.*, Опейда И. А.

Институт физико-органической химии и углехимии им. Л. М. Литвиненко

НАН Украины, г. Киев

O.V.Smirnova@nas.gov.ua

Среди ингибиторов радикально-цепного окисления особый интерес вызывают биоантиоксиданты, ярким представителем которых является аскорбиновая кислота (АК). Все биохимические процессы, в которых принимает участие АК, основаны на ее способности обратимо окисляться до дегидроаскорбиновой кислоты (ДАК). Этим обстоятельством и осложнено изучение антиоксидантных свойств АК в свободнорадикальных процессах окисления, развитие которых протекает как в водной, так и в липидной фазе.

В данной работе УФ- и ЯМР-спектроскопическими методами доказано существование восстановленной, окисленной и ионных форм АК в апротонной среде и возможность использования именно апротонных систем в качестве модельных для определения того, как гидрофильная по своей природе АК ведет себя в органической фазе в процессах радикально-цепного окисления.

УФ-спектроскопическим методом изучены растворы АК в диметилсульфоксиде, воде и кумоле. Зафиксировано существование аскорбат-иона AH^- , анион-радикала $\text{A}^{\cdot-}$ и 2,3-дикетогулоновой кислоты (ДКГК), которая образуется в результате окисления дегидроаскорбиновой кислоты. Получены зависимости оптической плотности образованных в данном растворе частиц от времени.

ЯМР-спектроскопическим методом идентифицированы продукты инициированного окисления АК в среде диметилсульфоксида. В таблице приведены данные по ^{13}C ЯМР спектрам АК, ДАК и ДКГК, а также исследуемого раствора до окисления (исходная АК) и окисленного раствора (продукт). Полученный в ходе эксперимента продукт имеет схожие химические сдвиги с ДАК, предполагая аналогичную структуру. Таким образом, доказано, что в данных условиях АК окисляется только до ДАК.

Таблица. Данные по ^{13}C ЯМР спектрам L-аскорбиновой кислоты (L-АК), L-дегидроаскорбиновой кислоты (L-ДАК) и дикетогулоновой кислоты (ДКГК), а также исследуемой системы до окисления (исходная АК) и окисленной системы (продукт)

Вещество	Химические сдвиги, δ , м. д.					
	C1	C2	C3	C4	C5	C6
АК	170.6	117.9	152.9	74.8	68.3	61.9
исходная АК	170.68	117.23	152.95	74.59	68.31	61.95
ДАК	173.6	91.4	105.7	87.6	73.0	76.2
ДКГК	174.5	94.7	94.4	74.6	68.6	62.5
Продукт	171.28	92.21	102.97	84.59	69.78	75.15

Изучение инициированного АИБН окисление АК в апротонной среде при температуре 348 К показало, что единственным продуктом окисления является ДАК, дальнейшее окисление ДАК в данных условиях не происходит.

**ВПЛИВ ТЕМПЕРАТУРИ ОБРОБКИ ВИХІДНИХ ПОРОШКІВ
НА СПІКАЄМІСТЬ ZTA-КОМПОЗИТІВ***Смирнова-Замкова М. Ю.*Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича, м. Київ
smirnovazamkova@ukr.net

Фізико-хімічні дослідження нанокристалічних середовищ на основі Al_2O_3 необхідні для створення сучасних матеріалів різноманітного призначення, тому що їх мікроструктура і властивості значною мірою визначаються характеристиками вихідних порошків, які, в свою чергу, залежать від методу одержання. ZTA – керамічні матеріали на основі Al_2O_3 , в яких ZrO_2 виступає зміцнюючою фазою.

Комбінованим методом – гідротермальним синтезом у лужному середовищі з наступним механічним змішуванням, синтезовано ZTA порошки. Вміст твердого розчину на основі ZrO_2 ((% мол.) $90 \text{ZrO}_2 - 8\text{Y}_2\text{O}_3 - 2\text{CeO}_2$) складав 10, 20, 30, 42 мас. % (Z10, Z20, Z30, Z42). Одержані порошки відпалено в інтервалі температур 400–1450 °C. Методом холодного одновісного пресування з термічно оброблених порошків одержано заготовки діаметром 20 мм, які спечено при 1600 °C протягом 1,5 годин на повітрі у високотемпературній печі Nabertherm LHT 08/17.

Залежність об'ємної усадки спечених зразків від температури термічної обробки вихідного ZTA-порошку наведено на Рис.

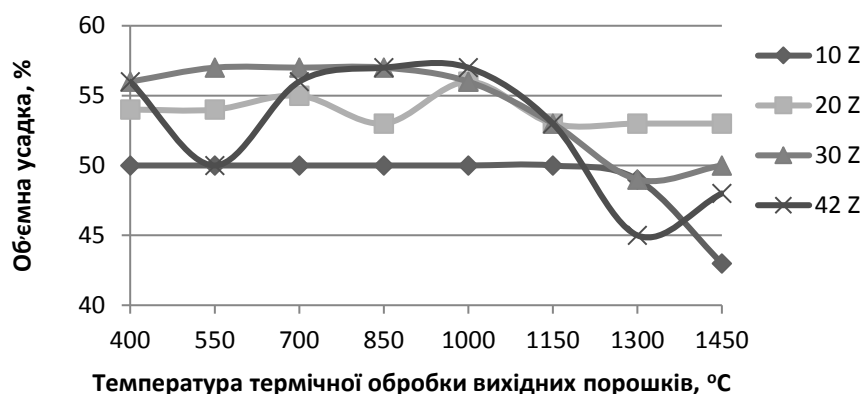


Рис. Залежність об'ємної усадки спечених при 1600 °C ZTA –композитів від температури термічної обробки вихідних порошків

Об'ємна усадка зразків після спікання залишається постійною для композита Z10 до температури термічної обробки вихідного порошку 1300 °C. Для композитів 20Z – 42Z об'ємна усадка зразків зменшується після термічної обробки вихідних порошків при 1000 °C, причому найменші значення зафіксовано для композиту Z42. Вказані залежності пов'язано з впливом матриці $\alpha - \text{Al}_2\text{O}_3$ на дисперсну фазу ZrO_2 .

Характер залежностей визначається фазовим складом та характеристиками міцності агломератів вихідних порошків. При термічній обробці вище 1000 °C у вихідних порошках для одержання ZTA-композитів розпочинається спікання, що призводить до утворення міцніших агломератів. Тому, при спіканні заготовок з вказаних порошків можуть проявлятися процеси «зонального обособлення», які призводять до зниження відносної щільності спечених зразків.

Аналізуючи залежності, можна дійти висновку, що для збереження активності, термічну обробку вихідних порошків для створення ZTA-композитів необхідно проводити до 850 °C.

Одержані порошки на основі Al_2O_3 використано для вироблення ущільнюючих кілець для насосів.

**СТРУКТУРА ГІБРИДНИХ ПОЛІМЕРНИХ КОМПОЗИТІВ НА ОСНОВІ
МІКРОВОЛОКОН ЦЕЛЮЛОЗИ ТА ПОЛІАНІЛІНУ**

Сухара А. В., Козловська О. Р., Верещагін О. М., Стеців Ю. А., Яцишин М. М.

Львівський національний університет імені Івана Франка,
alina.s.v.6.10@gmail.com

Пошук компонентів та розробка методик для створення полімер/полімерних композитних матеріалів на основі неелектропровідних (НЕПП) та електропровідних полімерів (ЕПП), як от поліанілін, поліпірол, політіофен та інші, є актуальним завданням для розв'язання проблеми поєднання в одному цілому різних за природою полімерних матеріалів. Серед великої кількості НЕПП, які повсюди використовуються у величезних масштабах, особливої уваги заслуговують штучні полімери на основі целюлози (Цл), які широко використовують в різних галузях та технологіях, наприклад пакувальні матеріали, в'язучі компоненти, добавки до харчових продуктів. Стосовно інших НЕПП целюлоза має ряд переваг, таких як низька собівартість, низька густина, нетоксичність, поновлюваний характер, здатність до біологічного розкладання, здатність утворювати стабільні водні суспензії і чудові механічні властивості, що дозволяє покращити механічні характеристики ЕПП. Целюлоза у виді мікро- чи нановолокон може слугувати як важливим компонентом, так і матрицею-носієм ЕПП, як наприклад ПАН, в композитних матеріалах. Поєднання властивостей обох цих полімерів дозволить отримувати матеріали для електроактивних, адсорбційних та каталітичних покриттів, які можуть бути використані в оптичній сенсориці, як електродні матеріали для високопродуктивних гнучких суперконденсаторів, тощо.

Нами синтезовано та досліджено структурні властивості композитів целюлоза/поліанілін, допований цитратною кислотою (ЦК). В роботі використовували целюлозу ТМ Лінтерс 1058 (Linters 1058), виробник АДМ, США, помел 1290 μm , в'язкість 37050 мПа·с, ступінь полімеризації 2050.

Композити целюлоза/поліанілін (Цл/ПАН) з різним співвідношенням Цл : ПАН отримували хімічним окисненням аніліну (Ан) амоній пероксодисульфатом (АПС) у водному 0,5 М розчині ЦК за наявності мікрОВОЛОКОН Цл. Співвідношення в реакційних сумішах (г : г) Ан : АПС становило 1,0 : 2,5, а Ан : Цл – 1,0 : 0,1 або 1,0 : 0,25, або 1,0 : 0,5, або 1,0 : 0,75, або 1,0 : 1,0, або 1,0 : 2,5. Структуру композитів Цл/ПАН та «чистого» ПАН досліджували за допомогою рентгенівської (дифрактометр ДРОН-3 з Cu-K α випромінюванням ($\lambda = 1,54060 \text{ \AA}$), інфрачервоної з Фур'є перетворенням спектроскопій (спектрофотометр NICOLET IS 10), а морфологію плівок ПАН на поверхні Цл за допомогою електронної скануючої мікроскопії (растровий електронний мікроскоп-мікроаналізатор РЕММА-102-02).

З'ясовано, що Цл та утворений ПАН в композитах мають аморфну структуру. Зміна співвідношення Ан : Цл в реакційній суміші практично не впливає на дифракційні картини композитів. Визначений за результатами ІЧ-ФП спектроскопії ступінь окиснення ПАН в складі композитів становить $0,90 \pm 0,03$. Між поверхневими групами Цл і ПАН існує сильна міжфазова взаємодія завдяки утворенню водневого зв'язку. Питома електропровідність отриманих матеріалів істотно перевищує електропровідність целюлози і становить $0,13 \times 10^{-3} - 1,61 \times 10^{-3} \text{ См см}^{-1}$. Отримані результати засвідчують про високу спорідненість компонентів в композитах.

СРАВНИТЕЛЬНАЯ СОРБЦИЯ ГЛИЦИНА И ПРОЛИЛЛЕЙЦИЛГЛИЦИНА НА АНИОНИТЕ АВ-17

Каранкевич Е. Г., *Сушиц А. Г.*

Институт физико-органической химии Национальной академии наук Беларуси
extract@ifoch.bas-net.by

В настоящее время сорбционные методы разделения биологически активных веществ широко применяются для получения высокоочищенных соединений, которые могут быть использованы в качестве лекарственных субстанций. Молекулы пептидов и аминокислот (АК) содержат подобные функциональные группы, которые обуславливают их взаимодействие с ионитами. Цель данного исследования - получить данные сорбции АК глицина (Gly) и пролиллейцилглицина (Pro-Leu-Gly) на сильноосновном ионите, позволяющие подобрать эффективные условия их разделения.

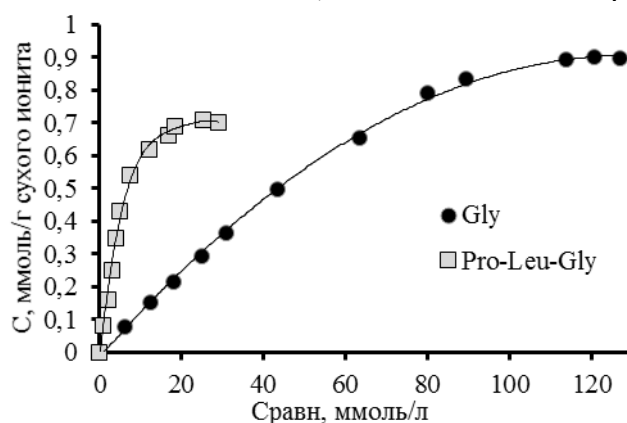


Рис. 1. Изотермы сорбции Pro-Leu-Gly и Gly на анионите АВ-17 (ОН⁻)

Изучена сорбция Pro-Leu-Gly и Gly в статических условиях на анионите АВ-17 в ОН-форме, полученные данные приведены на рис. 1. Установлено, что степень заполнения фазы сорбента трипептидом не превышает 0,7 ммоль/г ионита, и достигается при равновесной концентрации 20 ммоль/л, а для Gly максимальная концентрация в фазе сорбента составляет 0,9 ммоль/г ионита, которая достигается при равновесной концентрации его в растворе > 120 ммоль/л.

Рассчитаны коэффициенты распределения трипептида и АК, полученные данные представлены графически (рис. 2). Коэффициент распределения Pro-Leu-Gly в фазу сорбента выше, чем для Gly, что может быть обусловлено дополнительными взаимодействиями, возникающими при сорбции трипептида.

Изучена сорбция Pro-Leu-Gly и Gly ионитом АВ-17 в динамических условиях. Показано, что с увеличением концентрации пропускаемого раствора Gly с 2г/л до 20г/л степень заполнения емкости колонки уменьшается с 81,5 % до 22,4 % соответственно. В случае трипептида Pro-Leu-Gly, при увеличении концентрации с 5 г/л до 20 г/л, напротив, наблюдается увеличение степени заполнения емкости колонки с 20,1 % до 46,4 %. Это может быть обусловлено способностью пептида к дополнительному водородному связыванию, приводящему либо к образованию димеризованных молекул, либо к возникновению дополнительного сорбат-сорбатного взаимодействия сорбированных молекул пептида с молекулами, находящимися в растворе.

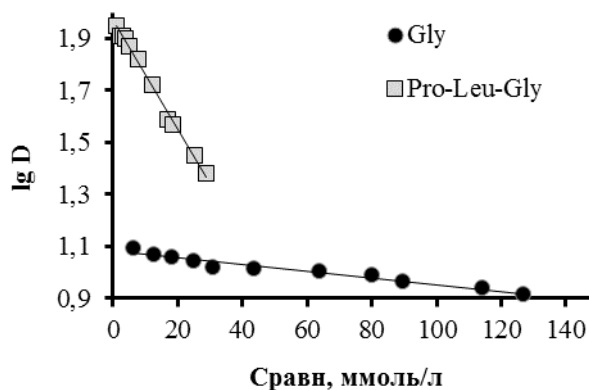


Рис. 2. Зависимость $\lg D = f(C_{\text{равн}})$ сорбции Pro-Leu-Gly и Gly на АВ-17(ОН⁻)

ГРАНИЧНІ УМОВИ МОДЕЛЕЙ СТАЦІОНАРНОЇ ТА НЕСТАЦІОНАРНОЇ КІНЕТИКИ В ЕЛЕКТРОХІМІЧНИХ СИСТЕМАХ З ДИСКОВИМ ОБЕРТОВИМ ЕЛЕКТРОДОМ

Ткачук М. М.¹, Міщенчук В. В.¹, Боштан Ю. В.¹, Юзькова В. Д.²

¹ВДНЗ України «Буковинський державний медичний університет»

²Інститут післядипломної педагогічної освіти Чернівецької області
tmm777@rambler.ru

Актуальність. Серед задач, які стоять перед сучасною наукою, важливе місце займає ліквідація розриву між теорією і експериментом. Одним із шляхів такого зближення є моделювання результатів експерименту в рамках різних теоретичних підходів з використанням в якості критерію справедливості узгодженості модельного розрахунку із експериментом.

Мета роботи. В роботі ставиться завдання проаналізувати граничні умови, межі їх використання та похибки пов'язані з прийнятими на практиці наближеннями в сформульованій математичній моделі нестационарної та стаціонарної електрохімічної кінетики на обертовому дисковому електроді (ОДЕ), яка строго враховує масоперенос зумовлений дифузією, міграцією та конвекцією.

Завдання: 1) Визначити межі контролюючих параметрів системи (часу електролізу, площі поверхні робочого електрода, об'єму електроліту, швидкості обертання електрода) для яких реальний стаціонарний розподіл концентрацій компонентів не буде відрізнятися (в межах прийнятої точності) від розподілу, який встановлювався б в ідеалізованому "безкінечному резервуарі"; 2) Визначити оптимальну границю інтегрування по координаті, тобто віддаль від поверхні електрода, на якій можна (в межах прийнятої точності) вважати концентрації компонентів постійними і рівними об'ємним, та її залежність від контролюючих параметрів системи.

Результати роботи. 1). Відносна похибка у визначенні концентрації біля поверхні електрода, яка пов'язана з ефектом «виснаження» концентрації, є наслідком закону Фарадея і пов'язана із керуючими та характеристичними параметрами системи (час дослідження τ , об'єм системи V , площа робочого електрода A , електричний струм I , початкова концентрація електроактивного компонента $c_{i,0}$) наступним чином: $|\Delta c_i / c_{i,0}| = |(v_i I \tau) / (n F V c_{i,0})|$; 2). Основна зміна концентраційного профілю відбувається на незначних відстанях від електроду в приграничному шарі $0 \leq x \leq a$, через що необхідно збільшити кількість точок інтегрування в цих межах. Чисельне інтегрування по всьому проміжку $0 \leq x \leq L$ є невиправданим, оскільки на проміжку $a \leq x \leq L$ концентраційний профіль практично не змінюється. «Ефективна товщина» « a » дифузійного шару суттєво впливає на концентраційний розподіл (зокрема на значення концентрації біля поверхні, залежну від неї швидкість реакції і т. д.) і може бути джерелом похибок. Для потреб чисельного інтегрування ефективну товщину в залежності від прийнятої точності слід брати в межах $a_i = (2 \div 5) \cdot \delta_i$ (δ_i - характеристична товщина дифузійного шару, яка залежить від швидкості обертання ОДЕ ω , кінематичної в'язкості ν): $\delta_i = 1.6117 D_i^{1/3} \nu^{1/6} \omega^{-1/2} \{1 + 0.2980 (D_i / \nu)^{1/3} + 0.14514 (D_i / \nu)^{2/3}\}$; 3). Для забезпечення збіжності стаціонарного концентраційного розподілу до розподілу «безкінечно великого резервуару» характеристична довжина резервуару з розчином L повинна бути не меншою ніж $(200 \div 500) \cdot \delta_i$; Результати, які одержані в роботі, можна застосувати при теоретичному аналізі стаціонарних та нестационарних методів електрохімічного аналізу, а також при моделюванні стаціонарної та нестационарної макрокінетики на обертовому дисковому електроді.

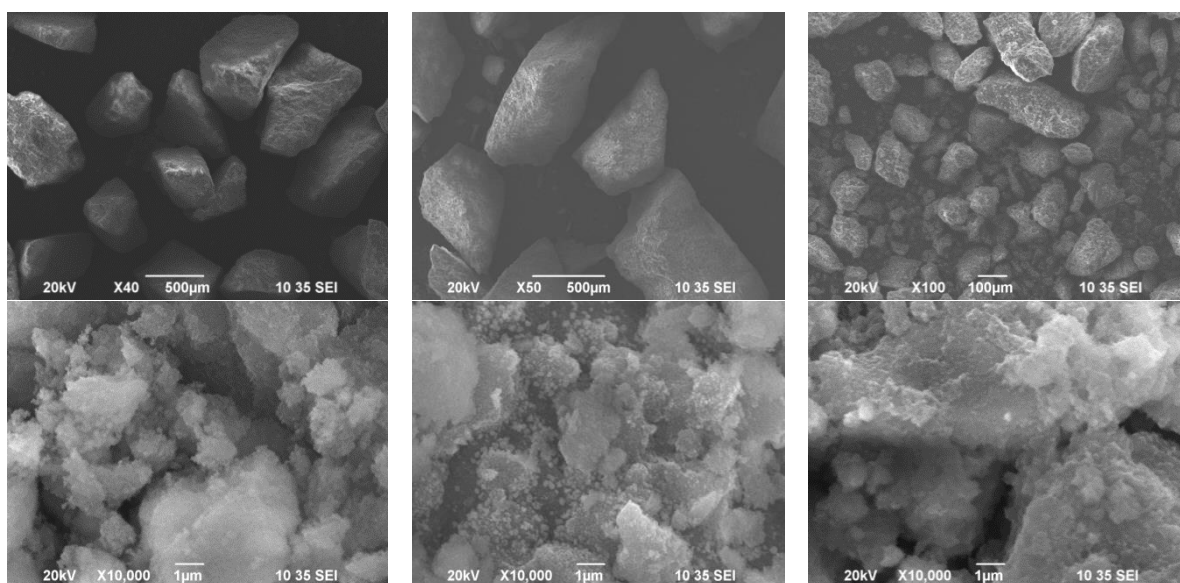
**ГІДРУВАННЯ ДІОКСИДУ ВУГЛЕЦЮ НА КОБАЛЬТОВОМУ
КОМПОЗИТНОМУ МЕМБРАННОМУ КАТАЛІЗАТОРІ***Трепядько Д. О.¹, Корж Р. В.²*¹НТУ України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»²Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України

trepyadko.d@gmail.com

Мета роботи полягала у синтезі нових мембранно-каталітичних композитів гідрогенізації CO₂ та дослідженні їх фізико-хімічних властивостей.

Зразки кобальту, нанесеного на γ -оксид алюмінію, готували методом осадження катіонів на γ -Al₂O₃ із водного розчину нітрату кобальту. Для цього розчин Co(NO₃)₃, виготовлений із гексагідрату запланованої маси, змішували з наважкою платинованого γ -Al₂O₃ фракції 0,4 - 0,63 мм. Отриману суспензію повільно підсушували при 85 °C впродовж 12 годин. Висушені зразки каталізатора відновлювали в потоці водню при нагріванні до температури 370 °C впродовж 3 годин. Відновлений каталізатор пасивували парами води при 180 °C протягом 8 годин з наступним охолодженням у парах води.

Дослідження поверхні зразків синтезованого кобальтового активного компоненту виконували методом скануючої електронної мікроскопії (СЕМ) на мікроскопі JSM – 6490LV (JEOL, Japan). За виконаний аналіз висловлюємо подяку с.н.с., к.т.н. В.В. Кременицькому (Технічний центр НАН України). Зображення зразків на різних етапах синтезу подано на рис.



вихідного платинованого
 γ -Al₂O₃

Рис. SEM зображення
активного компонента Co-
Pt/ γ -Al₂O₃, синтезованого
методом осадження

зразка Co-Pt/ γ -Al₂O₃,
відпрацьованого в
гідрогенізації CO₂

Наведені дані свідчать про достатньо рівномірний розподіл елементів у приповерхневому шарі вихідного платинованого каталізатора Pt/ γ -Al₂O₃. Нанесення кобальту і наступні процедури прожарювання та відновлення каталізатора викликають висадження дрібнодисперсних часток на поверхні крупних гранул носія із сильно нерівномірним розподілом кобальту. SEM зображення зразка кобальтового активного компоненту, відпрацьованого у процесі гідрогенізації, свідчить про сегрегацію поверхневих дрібних часточок.

**АДСОРБЦІЙНЕ ВИЛУЧЕННЯ АНТОЦΙΑНІВ ЯГІД ЧОРНОПЛІДНОЇ АРОНІЇ
НА ВОЛОКНИСТОМУ КАТІОНІТІ ФІБАН К-1**

Тютюнник Т. В., Новотна В. О.

Одеський національний університет ім. І. І. Мечникова
tanyatabakova11@gmail.com

В останні роки застосування антоціанів збільшується в харчовій і фармацевтичній промисловості. Актуальною задачею сьогодення є впровадження ефективних і доступних методів вилучення антоціанів з екстрактів рослинної сировини. Одним з перспективних методів вилучення антоціанів з екстрактів є адсорбція, але в наш час інформація про можливість використання дешевих ефективних адсорбентів обмежена. У зв'язку з цим, перспективними є дослідження, які спрямовані на пошук нових дешевих, доступних і ефективних адсорбентів для вилучення антоціанів та визначення оптимальних умов адсорбційного процесу.

Мета роботи: дослідити можливість застосування в якості адсорбенту волокнистого катіоніта ФІБАН К-1 для адсорбційного вилучення антоціанів чорноплідної аронії з кислих водних екстрактів та визначити оптимальні умови адсорбційного процесу.

Доцільність вибору ягід чорноплідної аронії, яка належить до роду *Aronia melanocarpa*, обумовлена тим, що серед інших видів плодових та ягідних рослин на території України, ці дикорослі ягоди мають дуже великий вміст антоціанів і площа під цією культурою складає 2,5 тис. га.

В даній роботі ягоди чорноплідної аронії зібрані в період плодоношення в Вінницькій області та заморожені при -20°C . Екстракт антоціанів чорноплідної аронії готували з гомогенізованих ягід в 0,1 М водному розчині хлоридної кислоти, використовуючи метод мацерації.

В якості адсорбенту антоціанів досліджено волокнистий катіоніт ФІБАН К-1, який синтезований в ІФОХ НАН Білорусі прямим радіохімічним щепленням стиролу і дивинілбензолу до поліпропіленового волокна з подальшим сульфуванням. ФІБАН К-1 відноситься до сильно кислотних катіонітів.

Адсорбційні дослідження проводили в статичних умовах при постійному струшуванні протягом 60 хв, змінюючи дозу адсорбенту (3–9 г/л), значення рН (2–4), початкову концентрацію антоціанів (100–300 мг/л) і температуру (283–323 К). Концентрацію антоціанів в екстрактах визначали методом рН-диференціальної спектрофотометрії в перерахунку на ціанідин-3-глюкозид.

Проведені дослідження показали, що адсорбційне вилучення антоціанів чорноплідної аронії збільшується при збільшенні часу адсорбції, дози адсорбенту, температури, та при зменшенні початкової концентрації антоціанів і значення рН екстракту. Встановлено, що вилучення антоціанів чорноплідної аронії на 92 % спостерігається при дозі адсорбенту ФІБАН К-1, яка дорівнює 7,5 г/л, значенні рН = 2, початковій концентрації антоціанів 200 мг/л і температурі 293 К. При збільшенні дози адсорбенту до 9 г/л ступінь адсорбційного вилучення антоціанів збільшується до 98 %. Максимальна ступінь адсорбційного вилучення антоціанів 100 % можлива за таких умов: початкова концентрація антоціанів 100 мг/л, доза адсорбенту 7,5 г/л, рН = 2, температура 293 К.

Таким чином, проведені адсорбційні дослідження показали, що волокнистий катіоніт ФІБАН К-1 можна використовувати для адсорбційного вилучення антоціанів з кислих водних екстрактів чорноплідної аронії, а отримані результати дослідження будуть корисними при оптимізації адсорбційного процесу в промислових масштабах.

**ДОСЛІДЖЕННЯ СТАНУ АДСОРБОВАНИХ НА ПОВЕРХНІ АЕРОСИЛІВ
АДДУКТІВ ТРИС- β -ДИКЕТОНАТІВ Eu(III) ТА 1,10-ФЕНАНТРОЛІНУ**

Фадєєв Є. М., Смола С. С., Снурнікова О. В., Коровін О. Ю.

Відділ хімії лантанідів, Фізико-хімічний інститут ім. О. В. Богатського

НАН України, Люстдорфська дорога, 86, Одеса, 65080, Україна

Fadeyev2@gmail.com

Досліджено сорбцію шести різнолігандних координаційних сполук Eu(III) з 1,10-фенантроліном і β -дикетонами на аеросилах марок А300 та А380. Величина сорбції зменшується в ряду комплексів таким чином: ацетилацетонат > дипівалоїлметанат > бензоїлацетонат > теноїлтрифторцетонат > дибензоїлметанат > бензоїлтрифтор-ацетонат. Зниження сорбції при введенні електроноакцепторних замісників підтверджує механізм, що полягає у взаємодії протонів поверхневих силанольних груп з псевдоароматичною системою хелатних кілець β -дикетонатів. В цілому, вивчені сполуки володіють низькою спорідненістю до поверхні гідрофільних марок аеросилів і формують адсорбційні шари з низьким ступенем заповнення.

Аналіз отриманих ізотерм сорбції та люмінесцентних властивостей сорбатів дозволив дослідити будову адсорбційного шару та стану, в якому знаходяться на поверхні випромінюючі центри. Незважаючи на різне оточення іонів-випромінювачів у складі гібридних склообразних матеріалів і на поверхні аеросилів, виявлено подібну поведінку нековалентно іммобілізованих комплексів Eu(III), яка проявляється в аналогічному виді спектрів люмінесценції, залежностей інтенсивності люмінесценції від концентрації та інших кількісних показників (ширина і співвідношення полос, час життя збудженого стану).

Представлені для гібридних матеріалів спектральні критерії були використані для з'ясування стану комплексів Eu(III), сорбованих на аеросилах. Показано, що тільки сполуки з алкільними замісниками утворюють рівномірний незаповнений моношар. Сорбція комплексів з ароматичними та фторованими замісниками супроводжується утворенням асоціатів, що можна розглядати як прояв полімолекулярної сорбції. При дослідженні кінетики згасання емісії Eu(III) було виявлено, що утворення асоціатів супроводжується зниженням безвипромінювальних втрат енергії і зростанням часу життя збудженого стану у зв'язку з витісненням гасячих люмінесценцію молекул із найближчого оточення Eu(III). Апроксимація кінетичних кривих в біекспоненційному наближенні показала, що для схильних до асоціації сполук навіть при низьких значеннях сорбції (до 0.02 ммоль/г) приблизно 20–50 % часток знаходяться в асоційованому стані, а при подальшому зростанні сорбції до 0.1 ммоль/г частка асоційованих молекул збільшується до значень вище 80 %.

1. Ye.M. Fadeyev, S.S. Smola, M.Yu. Rusakova, E.V. Malinka, N.V. Rusakova // J. Luminescence. – 2017. – V. 194. – P. 631–635.

**ПРО СУМІСНЕ ОКИСНЕННЯ КУМОЛУ І БЕНЗИЛОВОГО СПИРТУ
В ПРИСУТНОСТІ N-ГІДРОКСИФТАЛІМІДУ**

Гринда Ю. М.¹, *Хавунко О. Ю.*¹, Компанець М. О.², Шендрик О. М.³, Опейда Й. О.^{1,3}
¹Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії і вуглехімії
ім. Л. М. Литвиненка НАНУ

²Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАНУ

³Донецький національний університет імені Василя Стуса
oksana.khavunko@gmail.com

Раніше було встановлено, що невеликі добавки бензилового спирту (ВА) до кумолу (RH), діють інгібуючи. Метою цієї роботи було дослідити дію N-гідроксифталіміду (NHPI) в процесі сумісного окиснення кумолу та бензилового спирту молекулярним киснем в області концентрацій, де спостерігається інгібуюча дія ВА. Кінетику окиснення досліджували за поглинанням кисню газоволюмометрично. Швидкість перемішування забезпечувала перебіг реакції в кінетичній області.

Досліджено окиснення індивідуальних компонентів кумолу та бензилового спирту в ацетонітрилі в присутності лише AIBN та AIBN з NHPI (табл.). Порівняння дослідів 1 та 2 показує, що в той час як додавання 0,01 моль/л NHPI при ініційованому окисненні індивідуального кумолу каталізує реакцію, то у випадку окиснення бензилового спирту каталітичного ефекту не спостерігається.

Вивчено вплив відносних концентрацій кумол-бензиловий спирт на швидкість ініційованого AIBN (0,025 моль/л) їх сумісного окиснення як у присутності, так і у відсутності радикального каталізатора NHPI. Показано, що додавання до RH 5 % об. ВА викликає зниження швидкості окиснення в 1,2 рази, тоді як у присутності NHPI спостерігається зниження швидкості реакції в 3,3 рази.

Табл. Швидкості сумісного окиснення RH та ВА в ACN (1:1), [AIBN] = 0,025 моль/л, [NHPI] = 0,01 моль/л, 70 °C, P_{O2} = 1 атм
W_{ai} - присутній AIBN, W_{nh+ai} - присутні NHPI+AIBN

№	[NHPI], моль/л	[RH], % об.	[BA], % об.	W _{ai} · 10 ⁵ , моль·л ⁻¹ ·с ⁻¹	W _{nh+ai} · 10 ⁵ , моль·л ⁻¹ ·с ⁻¹
1	-	-	100	1,72	1,74
2	-	100	-	2,15	3,44
3	-	97,5	2,5	1,80	1,05
4	-	95	5	1,64	1,76
5	-	58	42	1,50	1,54
6	0,005	97,5	2,5		0,82
7	0,01	97,5	2,5		1,05
8	0,02	97,5	2,5		1,23
9	0,04	97,5	2,5		1,78
10	0,06	97,5	2,5		3,11

Не спостерігається дія NHPI в концентрації 0,01 моль/л при окисненні суміші RH – ВА 58:42 та 95:5 в ACN (досліди 5, 4). Разом з тим при співвідношенні RH – ВА 97,5:2,5 є суттєве зростання швидкості окиснення при збільшенні концентрації NHPI (досліди 6–10).

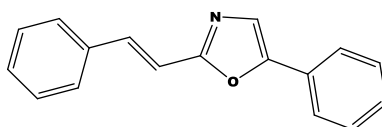
Додавання NHPI поступово зменшує інгібуючу дію ВА, а при концентрації NHPI 0,06 моль/л ця дія практично нівелюється.

При сумісному окисненні кумолу та бензилового спирту, в області малих концентрацій спирту спостерігається сильний інгібуючий ефект пов'язаний з наявністю реакцій обриву HOO· + ROO·. Додавання NHPI зменшує частку цієї реакції за рахунок реакції HOO· + NHPI, де утворюються радикали PINO, що не беруть участі в реакціях обриву ланцюгів.

ФОТОХІМІЧНА *E*-, *Z*- ІЗОМЕРИЗАЦІЯ 2-СТИРИЛ-5-ФЕНІЛОКСАЗОЛУ*Ходжаєва Р. С., Чумак А. Ю., Чепелєва Л. В.*НДІ хімії при Харківському національному університеті ім. В. Н. Каразіна
ndichem@karazin.ua

В створенні електронних пристроїв для запису-збереження інформації, фотоперемикачівна основі органічних сполук перспективним є дослідження спектрально-люмінесцентних властивостей похідних арилоксазолу, що містять стирильний фрагмент, оскільки ці сполуки характеризуються високими квантовими виходами флуоресценції, термо- та фотостабільністю, здатністю до оборотної фотохімічної *E*,*Z*-ізомеризації відносно подвійного зв'язку під дією електромагнітного випромінювання.

Метою даної роботи був синтез та дослідження фотохімічних властивостей 2-стирил-5-фенілоксазолу: встановлення мультиплетності фотоактивного стану, визначення квантового виходу *E*,*Z*-фотоізомеризації.



В електронних спектрах поглинання досліджуваної сполуки спостерігається інтенсивна смуга в області $29860\text{ cm}^{-1}/335\text{ nm}$, $\epsilon = 28770\text{ л/моль}\cdot\text{см}$. В спектрах флуоресценції присутня група смуг високої інтенсивності в області $26320\text{ cm}^{-1}/380\text{ nm}$, $24940\text{ cm}^{-1}/400\text{ nm}$ та $23800\text{ cm}^{-1}/420\text{ nm}$.

При опроміненні розчину оксазолу ультрафіолетовим світлом з довжиною хвилі $\lambda^* = 365\text{ nm}$ в спектрах спостерігається зниження оптичної густини довгохвильової смуги поглинання та підвищення поглинання в більш короткохвильовій області, що пояснюється появою в розчині цис-ізомеру. В спектрах флуоресценції спостерігається загальне зниження інтенсивності випромінювання без зміни форми смуги. В спектрах подвійного сканування флуоресценції до опромінення і після нього спостерігається лише одна смуга, що належить 0-0 переходу транс-ізомеру. Це доводить, що цис-ізомер не має флуоресценції внаслідок порушення спряження флуорофорних частин молекули. *E*,*Z*-фотоізомеризація 2-стирил-5-фенілоксазолу є оборотною, оскільки при опроміненні розчину в області, де цис-ізомер поглинає більше, ніж транс-, спостерігається зворотна зміна спектрів поглинання та флуоресценції. При проведенні експериментів з гасіння фотоізомеризації триплетними гасниками було встановлено, що *E*,*Z*-фотоізомеризація 2-стирил-5-фенілоксазолу проходить в триплетному фотоактивному стані.

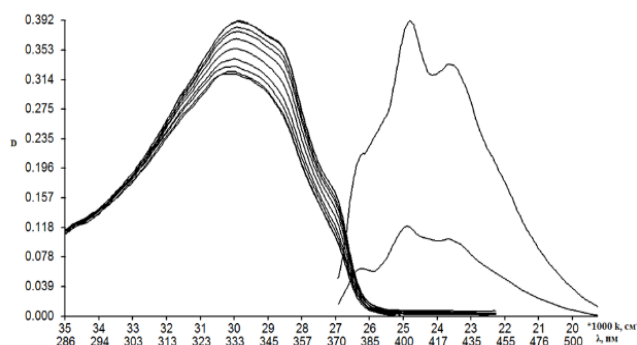


Рис. Зміни в спектрах поглинання та флуоресценції розчину 2-стирил-5-фенілоксазолу в октані під час опромінення світлом ртутної лампи, $\lambda^* = 365\text{ nm}$

КІНЕТИКА НАНОСТРУКТУВАННЯ АМОРФНИХ МЕТАЛЕВИХ СПЛАВІВ НА ОСНОВІ АЛЮМІНІЮ ЛЕГОВАНИХ Y, Gd, Dy

*Хрущук Х. І.*¹, Даниляк М.-О. М.¹, Бойчишин Л. М.¹, Лопачак М. М.¹, Лема А. О.²,
Пандяк Н. Л.³

¹Львівський національний університет імені Івана Франка

²Львівський медичний інститут

³Національний лісотехнічний університет України

hrystynahrushchychchemist@ukr.net

Аморфні металеві сплави (АМС) на основі Al легovanі рідкоземельними металами (РЗМ) використовують як конструкційні матеріали. Проте оптимальні фізико-хімічні властивості спостерігаються у нанокристалізованих АМС, в аморфній матриці яких існують α -Al.

Тому мета роботи полягає у встановленні зміни структурних перетворень АМС легованих РЗМ (Y, Gd, Dy) та встановленні залежності об'ємної частки нанокристалів від T при різних швидкостях нагріву (β) 10, 15, 20 К/хв. Об'єктом дослідження були АМС наступного складу: Al₈₇Dy₅Ni₈, Al₈₇Y₅Ni₈, Al₈₇Gd₅Ni₈. АМС було досліджено методом диференціальної скануючої калориметрії (ДСК) при швидкостях нагріву 10, 15, 20 К/хв. За ДСК-кривими визначено діапазон температур (табл.) в межах яких відбувається зародження (T_1), ріст (T_2) та формування нанокристалів α -Al (T_3).

Таблиця. Температури структурних перетворень АМС

АМС	β , К/хв	T_1 , К	T_2 , К	T_3 , К
Al ₈₇ Y ₅ Ni ₈	10	491	501	515
	15	494	504	515
	20	497	508	520
Al ₈₇ Gd ₅ Ni ₈	10	458	474	491
	15	462	477	496
	20	465	481	499
	20	468	484	502
Al ₈₇ Dy ₅ Ni ₈	10	450	457	464
	15	454	460	466
	20	456	463	469

Як видно з табл., заміна Dy на Y або Gd збільшує температуру структурних перетворень на 30–40 К.

Об'ємна частка трансформованої структури з аморфного стану у кристалічний може бути отримана з ДСК-кривих. При кожній конкретній температурі, об'ємна частка кристалічних фаз (α) визначається відповідно до рівняння: $\alpha = \frac{S_i}{S_T}$, де S_T – загальна площа екзотермічного піка, S_i – площа між початковою точкою піку і точкою при будь-якій іншій температурі в межах піку.

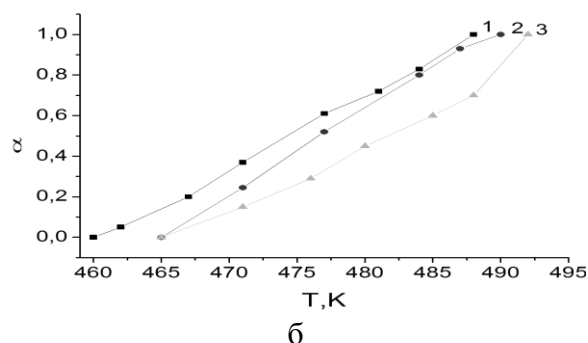
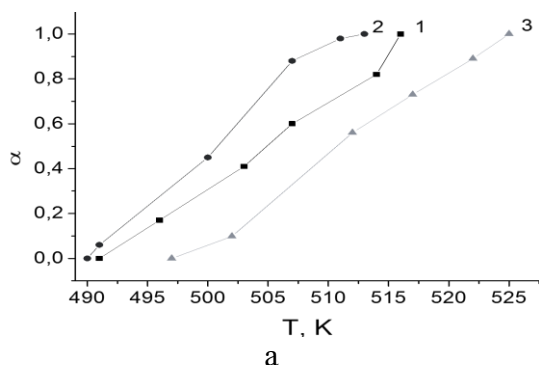


Рис. Залежність об'ємної частки нанокристалів α -Al від температури при різних швидкостях нагріву: 1 – 10 К/хв., 2 – 15 К/хв., 3 – 20 К/хв. Al₈₇Y₅Ni₈ (а), Al₈₇Gd₅Ni₈ (б)

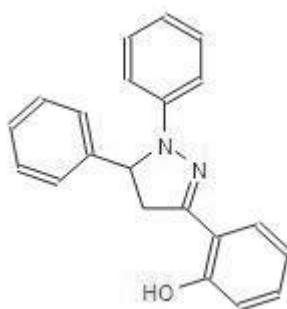
Як видно із залежностей на рис., ступінь нанокристалізації залежить від швидкості нагрівання. Із збільшенням швидкості нагрівання зменшується ступінь структурованості.

**РЕАКЦИЯ ФОТОПЕРЕНОСУ ПРОТОНА ТА СПЕКТРАЛЬНО-
ЛЮМИНЕСЦЕНТНІ ВЛАСТИВОСТІ 1,5-ДИФЕНІЛ-3-(2'-ГІДРОКСИФЕНІЛ)-
2-ПІРАЗОЛІНУ**

Чепелева Л. В., Нужный О. О.

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна
alex_nuzhny@mail.ru

В настоящее время ведется активный поиск соединений, пригодных для обнаружения катионов металлов. Эти соединения должны иметь высокий квантовый выход флуоресценции, хорошую растворимость в растворителях различной природы, быть фото- и термостабильными, обладать высокой селективностью. Исследование производных 1,3,5-триарил-2-пиразолина представляет несомненный интерес, т. к. эти соединения являются эффективными органическими люминофорами и при наличии соответствующих заместителей вполне могут рассматриваться как потенциальные хемосенсоры на катионы различных металлов.



Квантово-химическое моделирование строения 1,5-дифенил-3-(2'-гидроксифенил)-2-пиразолина в основном и электронно-возбужденном состояниях, проведенное методом (TD)DFT, показало, что довольно прочная внутримолекулярная водородная связь существует уже в основном состоянии исследованного соединения, становясь еще более прочной при переходе в нижнее синглетное возбужденное состояние S_1^* . Кроме того, протондонорная группа OH и пиразолиновый цикл заметно сближены в возбужденном состоянии. Эти факторы обуславливают протекание реакции внутримолекулярного фотопереноса протона.

В спектрах флуоресценции 1,5-дифенил-3-(2'-гидроксифенил)-2-пиразолина наблюдаются две полосы. Длинноволновая полоса высокой интенсивности ($\lambda_{\max} = 530$ нм, раствор в ацетонитриле) с аномально большим стоксовым сдвигом (9020 см^{-1}) соответствует испусканию продукта внутримолекулярного фотопереноса протона. Коротковолновая полоса очень малой интенсивности ($\lambda_{\max} = 433$ нм) принадлежит молекулярной форме, где фотоперенос протона не происходит.

Была проведена серия экспериментов по изучению влияния катионов металлов на флуоресценцию исследуемого соединения. Постепенное увеличение концентрации катиона металла вызывает уменьшение интенсивности длинноволновой полосы флуоресценции, следовательно, имеет место тушение флуоресценции фототаутомерной формы. Это тушение имеет динамический характер, т. е. контролируется диффузией. Интенсивность коротковолновой полосы флуоресценции, принадлежащей молекулярной форме, остается без изменений. Таким образом, комплекс с катионом металла данное производное пиразолина не образует. Исследованный 1,5-дифенил-3-(2'-гидроксифенил)-2-пиразолин может быть использован в качестве модельного соединения при установлении природы центров комплексообразования в других производных 1,3,5-триарил-2-пиразолина.

СОРБЦИЯ СОЕДИНЕНИЙ УРАНА (VI) ИЗ МОДЕЛЬНЫХ РАСТВОРОВ, ИМИТИРУЮЩИХ ШАХТНЫЕ ВОДЫ, С ПОМОЩЬЮ ОРГАНО-НЕОРГАНИЧЕСКИХ АНИОНИТОВ

Черевичная И. Ю.

Одесский национальный университет имени И. И. Мечникова,
65082, Украина, г. Одесса, ул. Дворянская, 2
iren_galutskaya@ukr.net

Загрязнение водных ресурсов химическими токсикантами, в том числе, соединениями радионуклидов, является одной из основных проблем современной эпохи. Эти загрязнители наносят большой вред здоровью человека и дикой природе. Для очистки воды от радионуклидов разработаны различные методы, из которых сорбция наиболее перспективна для очистки малоконцентрированных растворов. Несмотря на популярность и всестороннее изучение этого метода, разработка сорбционных материалов, которые одновременно будут не токсичными, экономически доступными и эффективными для извлечения целевого компонента является актуальной задачей.

Цель работы: установить эффективность использования новых органо-неорганических анионитов, синтезированных в Институте общей и неорганической химии им. В. И. Вернадского НАН Украины в качестве сорбентов соединений урана (VI), содержащихся в модельных растворах, имитирующих шахтные воды.

Объектами исследования служили соединения урана (VI), находящиеся в модельных растворах в количестве 7–100 мг/дм³. Сернокислые (U (VI), Ca²⁺, Mg²⁺, Fe³⁺, Al³⁺, SO₄²⁻) и карбонатные (U (VI), NaHCO₃, Ca²⁺, Mg²⁺, Cl⁻, SO₄²⁻) модельные растворы имитировали шахтные воды, образующиеся при вскрытии урановых руд. Исходные значения pH растворов равнялись 2.5 и 8.3 соответственно. Сорбенты (*образцы АС-1, АС-2, АС-3, АС-4, АС-5*) были получены путем модификации поверхности слабоосновной гелевой анионообменной смолы ЭДЭ-10П (*образец АС-0*) гидратированным ZrO₂ и отличались условиями синтеза (концентрации компонентов, температура, состав жидкой фазы). Сорбцию U(VI) исследуемыми ионитами проводили в статических условиях при температуре 20±2 °С при расходе сорбентов 2 г/дм³. Содержание урана (VI) в растворах после сорбции определяли фотометрически в виде комплекса с арсеназо III.

Проведенные исследования показали, что исследуемые иониты можно использовать для сорбции соединений урана, присутствующих в модельных сернокислых и карбонатных растворах, имитирующих ураносодержащие шахтные воды. Степень извлечения соединений урана (VI) из сернокислых модельных растворов составляет 47–79 % и 78–99.5 % из карбонатных модельных растворов, при этом время сорбции составляет 3–6 ч. Во всех случаях для извлечения урана (VI) наиболее целесообразно использовать образец АС-3, полученный обработкой исходного анионита 1 М растворами ZrOCl₂ и NH₄OH и температуре 20 °С, т.к. он наиболее полно и быстро извлекает соединения урана (VI) из модельных растворов. Найдено, что для интенсификации сорбции урана из сернокислых модельных растворов необходимо увеличить расход сорбентов до 5–7 г/дм³. Всесторонне изучена кинетика сорбции урана из модельных сернокислых и карбонатных растворов с помощью современных диффузионных и кинетических моделей. Установлено, что процесс сорбции соединений урана (VI) протекает в смешанно-диффузионном режиме и описывается кинетическим уравнением псевдвторого порядка.

**ВЗАЄМОДІЯ ОКСИДУ ІТРІЮ З ОКСИДАМИ ЛАНТАНУ ТА САМАРІЮ
ПРИ ТЕМПЕРАТУРІ 1500 °С***Чудінович О. В., Широков О. В.*

Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України
03680, м. Київ, Кржижановського, 3
chudinovych_olia@ukr.net

Діаграми стану систем на основі оксидів РЗЕ та ітрію представляють інтерес, як з наукової, так і з практичної точки зору. Оксиди ітрію і лантану входять до складу високотехнологічних стеклов спеціального призначення. Мають можливість пропускати інфрачервоні і поглинати ультрафіолетові промені. Фазові рівноваги у вивчених потрійних системах $\text{La}_2\text{O}_3\text{--Y}_2\text{O}_3\text{--Ln}_2\text{O}_3$ характеризуються утворенням твердих розчинів заміщення на основі різних поліморфних модифікацій вихідних компонентів.

У представлений роботі за допомогою методів рентгенофазового аналізу та петрографії вперше досліджено фазові співвідношення та фізико-хімічні властивості утворених фаз у потрійній системі $\text{La}_2\text{O}_3\text{--Y}_2\text{O}_3\text{--Sm}_2\text{O}_3$ при температурі 1500 °С (50 год) на повітрі у всьому концентраційному інтервалі.

Подвійні системи $\text{La}_2\text{O}_3\text{--Y}_2\text{O}_3$, $\text{Sm}_2\text{O}_3\text{--Y}_2\text{O}_3$ вивчені у широкому інтервалі температур (1300–2400 °С) і концентрацій (0–100 %) достатньо добре, відомості про фазові рівноваги у системі $\text{La}_2\text{O}_3\text{--Sm}_2\text{O}_3$ потребують уточнення.

У системі $\text{La}_2\text{O}_3\text{--Y}_2\text{O}_3$ при 1500 °С утворюються тверді розчини на основі гексагональної (А) в інтервалі від 0 до 21 мол. % Y_2O_3 , моноклінної (В) в інтервалі від 30 до 35 мол. % Y_2O_3 модифікацій La_2O_3 , кубічної (С) модифікації Y_2O_3 в інтервалі від 85 до 100 мол. % Y_2O_3 та впорядкованої фази типу перовскиту LaYO_3 (R) в інтервалі від 48 до 52 мол. % Y_2O_3 .

У системі $\text{Sm}_2\text{O}_3\text{--Y}_2\text{O}_3$ при 1500 °С утворюються поле твердих розчинів на основі кубічної (С) модифікації Y_2O_3 в інтервалі від 46 до 100 мол. % Y_2O_3 та неперервний ряд твердих розчинів на основі моноклінної (В) модифікації оксидів РЗЕ.

Як вихідні речовини використовували Y_2O_3 марки ІТо1, La_2O_3 марки ЛаО-1 та Sm_2O_3 марки СмО-М з вмістом основного компонента 99,99 % і азотну кислоту марки ч.д.а. Зразки готували з концентраційним кроком 1–5 мол. % з розчинів нітратів випаровуванням з подальшим розкладанням нітратів на оксиди шляхом прожарювання при 800 °С протягом 2 год. Порошок пресували в таблетки діаметром 5 і висотою 4 мм під тиском 10 МПа. Зразки піддавали двохступеневій термообробці: у печі з нагрівачами Н23У5Т (фехраль) при 1100 °С (2464 год) і в печі з нагрівачами з дисиліциду молібдену (MoSi_2) при 1500 °С (50 год) на повітрі. Швидкість підйому температури становила 3 град/хв. Випал зразків був неперервним. Охолодження проводили разом з піччю.

Вивчено фазові рівноваги у системі $\text{La}_2\text{O}_3\text{--Y}_2\text{O}_3\text{--Sm}_2\text{O}_3$ при температурі 1500 °С. У дослідженій системі утворюються поля твердих розчинів на основі кубічної (С) модифікації Y_2O_3 , гексагональної (А) і моноклінної (В) модифікацій La_2O_3 і Sm_2O_3 , а також впорядкованої фази типу перовскиту LaYO_3 (R). Ізотермічний переріз цієї системи при 1500 °С характеризується наявністю однієї трифазної (В + С + R), чотирьох однофазних (А- La_2O_3 (Sm_2O_3), В- La_2O_3 (Sm_2O_3), R, С- Y_2O_3) та двофазних (А + В, В + R, С + R, В + С) областей.

ВПЛИВ КІЛЬКОСТІ ВМІСТУ ОРГАНІЧНОЇ ФАЗИ НА В'ЯЗКІСТЬ ПАРАФІНОВИХ ЕМУЛЬСІЙ

Шаповалова А. В., Крутько І. Г., Каулін В. Ю.

Донецький національний технічний університет

alina.shapovalova7@gmail.com

Парафінові емульсії в останні роки знаходять широке застосування в якості компонентів водовідштовхувальним композиції для виробництва деревно-стружкових плит, водостійких гіпсових композицій, водостійких бетонів, замаслювачів при виробництві скловолокна, а також у виробництві фанери, при виготовленні бетонних конструкцій та спеціальних видів бетону.

Парафінова емульсія – отримується шляхом диспергування парафінової сировини в воді з додаванням емульгаторів і стабілізаторів – поверхнево- активних речовин (ПАР). Тип емульсії – аніонна.

Для отримання емульсії, в основному, використовується парафін, який є дуже дорогою сировиною. Тому розробка нових рецептур, способів виробництва і використання більш дешевої сировини даного класу емульсій є актуальним завданням в наш час. В якості парафінової сировини використовували петролатум. Петролатум – суміш парафінів $C_{18}H_{38}$ - $C_{35}H_{72}$ і масла (7–38 %), що отримується при депарафінізації залишкових нафтових масел.

Оскільки парафінові емульсії повинні мати невелику в'язкість (не більше 30 с) для зручності їх використання, в роботі було досліджено вплив кількості вмісту органічної фази і добавок масел І – 20А і ПМС на в'язкість парафінових емульсій. Залежність в'язкості парафінової емульсії від вмісту органічної фази наведена на рисунках 1 і 2.

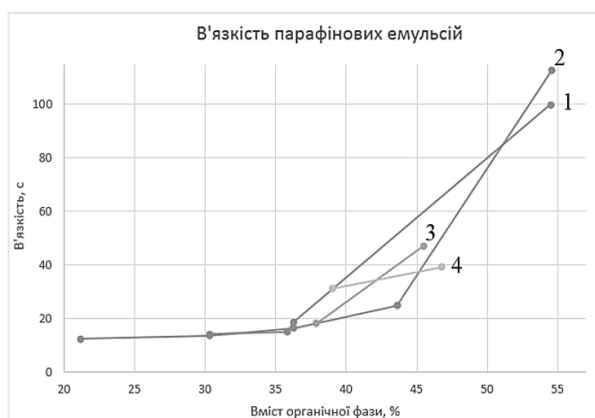


Рис. 1. Залежність в'язкості парафінової емульсії від вмісту органічної фази для емульсій: 1 – ТЕА:СТК – 1:1; емульгатор 8 %; 2 – ТЕА:СТК – 1:1; емульгатор 10 %; 3 – ТЕА:СТК – 0,7:1; емульгатор 8 %; добавка І-20А 2 %; 4 – ТЕА:СТК – 0,7:1; емульгатор 10 %; добавка І-20А 4 %

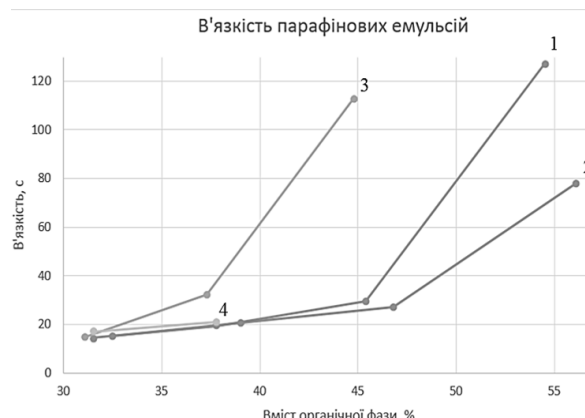


Рис. 2. Залежність в'язкості парафінової емульсії від вмісту органічної фази для емульсій: 1 – ТЕА:СТК – 0,7:1; емульгатор 8 %; добавка ПМС 2 %; 2 – ТЕА:СТК – 0,7:1; емульгатор 10 %; добавка ПМС 4 %; 3 – ТЕА:СТК – 0,7:1; емульгатор 6 %; добавка ПМС 2 %; 4 – ТЕА:СТК – 0,7:1; емульгатор 6 %; добавка ПМС 4 %

Дослідження впливу кількості вмісту органічної фази і добавок (І – 20А, ПМС) на в'язкість парафінових емульсій показали, що чим більший вміст органічної фази, тим більша в'язкість парафінових емульсій. Для того, щоб парафінова емульсія мала в'язкість не більш 30 с, вміст органічної фази залежить від кількості емульгатора і типу добавки. В залежності від витрати добавки і кількості емульгатора вміст органічної фази не повинен перевищувати для: І – 20А 40 – 45 %; ПМС 46 – 48 %.

ВПЛИВ МІКРОХВИЛЬОВОГО ПОЛЯ НА СТУПІНЬ НАБУХАННЯ КОЛАГЕНУ*Шеврьова С. С., Саєвич О. В., Чернушенко О. О.*

Дніпровський національний університет ім. Олеся Гончара

ssheveryova@gmail.com

Фізико-хімічні властивості колагену залежать від його складу, вологості, рН середовища, температури, різних електролітів і інших речовин. У промисловості колаген отримують очищенням білкової сировини, додаванням води і льоду, подрібненням суміші з подальшим гідролізом та тривалою сушкою. Застосування мікрохвильової сушки дозволяє значно скоротити час при виробництві колагену. Однак вплив мікрохвильового поля може призвести до зміни фізико-хімічних властивостей білка. У роботі було досліджено об'ємним методом ступінь набухання зразків контрольного колагену і колагену, який був оброблений мікрохвильовим випромінюванням. Відтворюваність результатів перевіряли на трьох паралельних пробах висушеного і контрольного колагену.

Для обох зразків колагену після 10 хв. витримки спостерігається найбільша величина ступеня набухання. При 20 хв витримки ступінь набухання колагену, після мікрохвильової сушки становиться менше, відповідно до контрольного зразку. При збільшенні часу витримки різниця між ступенями набухання зразків колагену збільшується, але для обох зразків після 50 хв витримки набухання практично закінчується. Показано, що порівняно з контрольним зразком, мікрохвильова сушка призводить до зниження ступеня набухання колагену.

За даними літератури відомо, що проведення мікрохвильової сушки характеризується неоднорідністю дії, яка пов'язана з різною здатністю речовин поглинати енергію. Вода, що входить до складу колагену, є одним з основних компонентів, який обумовлює прискорюючу дію мікрохвильового поля. Вода починає швидко випаровуватися з об'єму зразка, однак при цьому відбувається зміна структури в системі «біополімер-вода». Ступінь набухання білка та його здатність до розчинення залежать від гнучкості полімерних ланцюгів, вплив мікрохвильового поля призводить до її зменшення та ускладнення проникнення молекул води у міжмолекулярні області колагену.

Графічним методом було визначено константу швидкості процесу набухання. Для обох зразків колагену максимальне значення спостерігалось на 10 хвилині, при цьому швидкість набухання контрольного зразка склала $2,814 \cdot 10^{-3}$, а опроміненого – $3,204 \cdot 10^{-3}$ г/мин. Константи швидкості набухання дорівнювали 3,84 и 1,17 для контрольного та опроміненого зразків відповідно.

Проведено аналіз впливу мікрохвильової сушки на ступінь набухання колагену. Встановлено, що при проведенні мікрохвильової сушки ступінь набухання знижується на 59 %. Застосування мікрохвильового поля призводить до зменшення константи швидкості набухання для зразків колагену, але не впливає на характер її зміни.

При дослідженні впливу електролітів на ступінь набухання зразків колагену проведено порівняння процесу набухання білку у ряді електролітів KI, K₂SO₄, H₂O. Встановлено, що при проведенні мікрохвильової сушки ступінь набухання колагену знижується. При порівнянні впливу природи розчинника найбільший ступінь набухання спостерігається у H₂O, найменший у розчині K₂SO₄.

**CHEMICAL ENGINEERING /
ХІМІЧНА ІНЖЕНЕРІЯ**

ПУТИ ПОВЫШЕНИЯ КАЧЕСТВА ЦИАНИСТОГО НАТРИЯ

*Авина С. И., Мязина Е. В.*Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт»
svetlanaavina@gmail.com

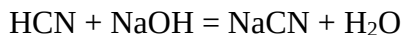
Цианистый натрий используют при цианировании стали для повышения поверхностной твердости, износостойкости и усталости прочности стальных изделий; в гальванотехнике при бронзировании и оцинковке, при серебрении зеркал; гидрометаллургии благородных металлов для извлечения золота и серебра из руд селективным выщелачиванием; флотационных процессах при обогащении металлических руд. Цианид натрия является цианирующим агентом в производстве нитрилов, изонитрилов красителей (индиго), а также применяется в производстве фармацевтических препаратов, для борьбы с вредителями сельского хозяйства.

Мировая практика насчитывает множество способов получения цианида натрия, в зависимости от сырьевой базы и месторасположения предприятия. Так, например, получение цианида натрия, основанное на взаимодействии кокса с содой в восстановительной среде:



Эти способы получения сложны в аппаратном оформлении, являются энерго- и ресурсозатратными и не находят широкого промышленного значения.

На сегодняшний день основным способ производства цианистого натрия является нейтрализация синильной кислоты, полученной каталитическим синтезом метана, аммиака и кислорода воздуха, раствором щелочи:



К недостаткам данного способа получения относят полимеризацию синильной кислоты на стадии ректификации, а также низкое содержание основного вещества в готовом продукте.

В качестве эффективного решения данной проблемы предлагается проведение прямой абсорбции цианистого водорода. Процесс поглощения проводят раствором едкого натра с концентрацией 25–38 %.

Абсорбер представляет собой вертикальный аппарат с трубным пучком внутри, в межтрубное пространство которого подается вода. Газы, выходящие из генератора, направляются в верхнюю часть абсорбера. Раствор едкого натра смешивается с охлажденным раствором цианистого натрия, который подается из сборника. В верхней части на каждой трубке абсорбера установлены тефлоновые эжекторы, с помощью которых происходит эффективное смешение растворов едкого натра и цианистого натрия с цианированными газами. Далее реакционная смесь тонким слоем стекает по внутренней поверхности трубок абсорберов. Раствор цианистого натрия, выходящий из абсорберов, во избежание разложения цианистого натрия подвергаются резкому охлаждению. Полученный охлажденный раствор цианистого натрия поступает на стадию кристаллизации.

Данная технология представляет собой непрерывный процесс, при котором содержание цианистого натрия в товарном продукте достигается до 98 % масс.

РЕГЕНЕРАЦІЯ МОТОРНИХ ОЛИВ*Адамчук А. В., Сфименко В. В., Макачук М. С.*

Національний авіаційний університет

alina_14041996@ukr.net

На сьогоднішній день проблема відновлення якості моторних олив у світі, а особливо в Україні, стоїть дуже гостро. Велика кількість автомобілів споживає багато олив, які можливо піддавати регенерації, що частково б вирішувало економічні та екологічні проблеми держави.

Серед різних напрямів використання відпрацьованих олив найбільш важливе місце займають методи регенерації. Сутність регенерації полягає в очищенні оливи від механічних домішок та води, відгонці паливних фракцій, а також видаленні органічних кислот, смол та інших продуктів окиснення, доведення складу регенованої оливи до необхідних норм присадками.

Вибір методу відновлення якості відпрацьованих олив визначається характером забруднень, що містяться в ній і продуктів старіння: для одних олив достатньо простого очищення від механічних домішок, для інших необхідна глибока переробка, іноді з використанням хімічних реагентів. Для покращення якості олив і їх очищення рекомендовані наступні методи регенерації моторних олив: фізичні, фізико – хімічні, хімічні, комбіновані. На практиці зазвичай використовують комбіновані методи, які забезпечують одержання високоякісних регенованих олив.

У процесі експлуатації двигуна відбувається як кількісна, так і якісна зміна оливи. В результаті випаровування легких фракцій, при використанні олив нафтового походження, їх вигорання, зменшується кількість оливи в двигуні. Якісні зміни пов'язані зі старінням, тобто хімічними змінами вуглеводневого складу. Старіння олив при роботі двигунів являє собою дуже складний процес. В картері працюючого двигуна формується складна суміш працюючої оливи з найрізноманітнішими продуктами її старіння, від яких повністю очистити оливу (фільтрацією) не вдається, внаслідок чого кількість вуглецевих частинок (смол, сажі) в оливі підвищується. Зменшення кількості і погіршення якості працюючої оливи в умовах високої інтенсивності подібних процесів в сучасних високофорсованих двигунах може в підсумку привести до виходу двигуна з ладу.

Виділяють дві основні групи домішок, що забруднюють оливи: органічні (потрапляють в оливу з камери згорання – продукти неповного згорання палива, продукти термічного розкладу, окиснення і полімеризації оливи) і неорганічні (пил, частинки зносу деталей, продукти спрацювання зольних присадок в оливах, частинки, що залишилися в двигуні після його виготовлення – технологічні забруднення). З камери згорання в оливу можуть потрапляти вода, сполуки сірки.

В роботі досліджено основні показники якості моторної оливи Castrol Magnatesc 5W-30 A3/B4 до та після експлуатації в двигуні внутрішнього згорання. Встановлено, що густина оливи збільшилась із 850 г/см³ до 860 г/см³, кількісний вміст води визначений методом Діна і Старка змінився з «відсутнього» до 0,14 % мас., кінематична в'язкість оливи змінилась з 68,5 мм²/с до 77,1 мм²/с.

Однак, незважаючи на глибокі зміни якості при роботі оливи в двигунах, основний її вуглеводневий склад змінюється несуттєво. Якщо з оливи видалити всі механічні домішки і продукти окиснення, загальна кількість яких зазвичай не перевищує 4–6 %, то після додавання пакету необхідних присадок, можливо знову отримати базову оливу хорошої якості. Саме на цьому принципі і ґрунтується регенерація (відновлення) і повторне використання олив.

**ЕЛЕКТРОХІМІЧНЕ ОКСИДУВАННЯ ТИТАНОВОГО СПЛАВУ ВТ6
У РОЗЧИНАХ ЩАВЛЕВОЇ КИСЛОТИ**

Андрущенко О. О., Мизенко О. О., Пилипенко О. І.

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»
opilipenko1984@gmail.com

Титан відноситься до активних металів, однак в звичайних умовах на його поверхні утворюється природна оксидна плівка. Можливим є отримання штучних оксидних плівок на титані, які мають певні властивості. Такі плівки є функціональними покриттями, які використовуються для підвищення корозійної стійкості, біологічної сумісності, а також маркування виробів медичного призначення, виготовлених з титану.

Оксидні плівки на титані одержують декількома методами: хімічним або термічним оксидуванням, плазмовим окисленням, електрохімічним анодуванням. Останній метод завдяки своїй простоті найбільш поширений. Для оксидування титану і його сплавів використовують розчини сульфатної, борної, винної, щавлевої та інших кислот або солей цих кислот.

Метою даного дослідження є встановлення впливу параметрів електролізу на процес електрохімічного оксидування титанового сплаву ВТ6 в щавлевій кислоті. Результатом процесу анодування титану у розчинах щавлевої кислоти є утворення кольорових оксидних плівок товщиною до 1 мкм. Крім складу сплаву, визначний вплив на товщину надає величина напруги, прикладеної до електродів комірки.

Найбільш інформативним для дослідження процесу анодування є вивчення формувальних залежностей, які пов'язують зміну напруги на комірці з тривалістю електролізу і дозволяють досліджувати кінетику росту плівки.

В результаті проведених досліджень встановлено, що залежність часу виходу на задану напругу від густини струму електролізу має характерну форму, яка зберігається для всього ряду кривих, отриманих на зразках, окислених в однаковому режимі. Величина часового проміжку, необхідного для виходу на задану напругу, відповідає часу досягнення граничної для даних умов електролізу товщини плівки і є максимально можливою тривалістю електролізу.

Експериментальні дані показують, що зміна концентрації кислоти у розчині в межах $5\text{--}100\text{ г}\cdot\text{дм}^{-3}$ не впливає на зміну тривалості формування плівки. Гранична товщина плівки залежить лише від заданого значення напруги формовки.

ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНА УСТАНОВКА ДЛЯ ОДЕРЖАННЯ ДОБРИВА ТА БІОГАЗУ НА ОСНОВІ ПОБУТОВИХ ВІДХОДІВ

Баранник К. В., Волошин М. Д.

Дніпровський державний технічний університет

barannik_katya@mail.ua

Біогаз – це суміш метану та вуглекислого газу, яка утворюється у процесі анаеробного бродіння в спеціальних реакторах – метантенках, які збудовані та керуються таким чином, щоб забезпечити максимальне виділення метану. Дуже важливий показник процесу переробки біомаси — отримання не лише біогазу, але і якісного органо-мінерального добрива. Первісним матеріалом для отримання біопалива можуть бути практично будь-які речовини органічного походження. Харчові відходи можна зброджувати окремо або в якості додаткового субстрату. Для вирішення поставленої задачі було створено лабораторну установку біогазового реактору та розроблено методики експериментальних досліджень (рис.).

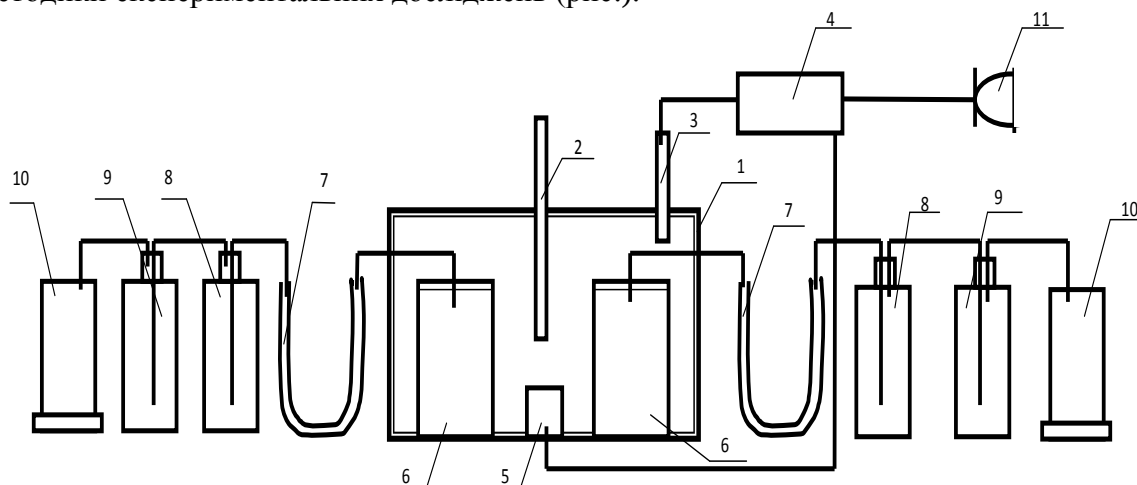


Рис. Схема лабораторної устатки для проведення процесу метанового бродіння.

1 – футерований корпус апарата; 2 – термометр; 3 – температурний датчик; 4 – терморегулятор; 5 – джерело енергії; 6 – реактори; 7 – ємність з висушувачем газу; 8 – ємність з лужним розчином для вловлювання кислих газів; 9 – ємність для збирання очищеного біогазу; 10 – збірник витісненої води; 11 – джерело струму

Методика одержання комплексного добрива та біогазу включає процес метанового бродіння. Отриманий біогаз було зібрано в спеціальні газозбірники. В дослідях використовували мезофільний режим (температура близько 306 K), який є технологічно спрощеним та більш дешевим. Для утворення біогазу та органо-мінерального субстрату (хімічний склад наведено у таблиці) було використано дисперговані і ущільнені органічні відходи, а саме суміш картоплі, капусти, буряку, моркви цибулі, курячий послід та гній ВРХ.

Таблиця. Хімічний склад отриманих добрив (тверда та рідка фракція)

Органо-мінеральне добриво	Хімічний склад, кг/тонну			
	N	NH ₄ -N	P ₂ O ₅	K ₂ O
Тверда фракція	7,14	2,91	4,23	5,71
Рідка фракція	5,65	–	3,30	4,20

Пілотна лабораторна устатка для проведення процесу метанового бродіння має ряд переваг: по-перше, під час одного періоду бродіння можливо проводити досліди з різною сировиною; по-друге, стає можливим слідкувати за змінами відсоткового співвідношення компонентів (CH₄, CO₂) у продуктах біогаз – органо-мінеральне добриво при зміні основних технологічних параметрів (попередня обробка сировини, температура, ензими, ступінь перемішування).

**ПОЛУЧЕНИЕ ТЕПЛОИЗОЛЯЦИОННЫХ КЕРАМИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОТХОДОВ ПЕНООБРАЗОВАТЕЛЕЙ***Белугин Д. С., Богдан Е. О., Попов Р. Ю.*

УО «Белорусский государственный технологический университет»

Bohdan_Ekaterina@mail.ru

В настоящее время в Республике Беларусь теплоизоляционные керамические изделия не выпускаются и являются предметом импорта из стран СНГ и ближнего зарубежья. В связи с этим, весьма актуальными являются исследования, направленные на установление возможности и целесообразности применения полиминерального глинистого сырья Республики Беларусь для получения указанных материалов. Это позволит предприятиям керамической отрасли расширить ассортимент выпускаемой продукции, а также организовать производство отечественных теплоизоляционных керамических материалов для тепловой изоляции зданий, технологического оборудования и теплотехнических установок.

В связи с этим, целью настоящей работы являлась разработка составов масс и технологии получения ячеистых теплоизоляционных керамических изделий с использованием пенообразователей для тушения пожаров, потерявших свои эксплуатационные свойства, и легкоплавкого полиминерального глинистого сырья Республики Беларусь.

В качестве основного сырьевого материала применялась легкоплавкая глина месторождения «Заполье» (Республика Беларусь), в качестве отошающей добавки – кварцевый песок, дегидратированная глина «Заполье», гранитоидные отсеvy, шамот алюмосиликатный, бой кирпича, отходы керамзитового производства. В качестве крепителей, обеспечивающих сохранение геометрических размеров полуфабриката, использовались гипсовое вяжущее марки Г-5 и портландцемент М400. Для создания ячеистой структуры использовался пенообразователь «Барьер-пленкообразующий» с истекшим сроком годности и подлежащий утилизации. Данный пенообразователь применяется для получения воздушно-механической пены при тушении пожаров отдельных видов горючих жидкостей (спирты, альдегиды, кетоны и др.). Пенообразователь «Барьер-пленкообразующий» представляет собой водный раствор поверхностно-активных веществ (ПАВ).

Теплоизоляционные материалы, полученные по шликерной технологии на основе оптимального состава при температуре 1100 °С, характеризовались следующим набором физико-химических свойств: кажущаяся плотность 870–890 кг/м³, истинная плотность 2740–2760 кг/м³, водопоглощение 69,44 %, истинная пористость 67,52 %, коэффициент теплопроводности 0,22–0,25 Вт/(м·К), механическая прочность при изгибе 0,5–0,6 МПа.

Установлено, что фазовый состав синтезированных образцов представлен муллитом, кристобалитом и α-кварцем. Исследование структуры полученных материалов с помощью оптической и электронной микроскопии позволило установить, что требуемые показатели пористости обеспечиваются равномерно распределенными по объему материала порами, характеризующимися изометричной формой и размером от 500 до 1000 мкм.

Проведенные исследования показали целесообразность применения легкоплавкого глинистого сырья Беларуси, отходов керамзитового производства, а также отходов пенообразователей для получения ячеистых теплоизоляционных керамических материалов, которые могут быть использованы в жилищном и промышленном строительстве, а также при теплоизоляции низкотемпературных тепловых агрегатов.

ДОСЛІДЖЕННЯ КІНЕТИКИ ВИДІЛЕННЯ БІОГАЗУ ІЗ СУМІШІ ПОБУТОВИХ ВІДХОДІВ ІЗ ДОДАВАННЯМ КАЛЬЦІЄВМІСНОГО ШЛАМУ*Белянська О. Р., Біленко Т. Є., Мягка Ю. О., Шумило К. П.*

Дніпровський державний технічний університет

belyans@ukr.net

Погіршення екологічного стану довкілля на сьогодні є однією з найгостріших проблем, що пов'язана зі зростанням кількості накопичених промислово-побутових відходів. Найбільш рентабельним шляхом переробки та знешкодження промислово-побутових відходів є процес метанового бродіння. Сучасним питанням є створення технології метанового бродіння промислово-побутових відходів із додаванням кальцієвмісного шламу, що допоможе розширити сировинну базу добрив та утилізувати накопичені відходи. Передбачається, що кальцієвмісний шлам прискорює процес метанового бродіння, тому як вирівнює показник рН до 6,9–7,2 в зброджувальному середовищі. В дослідженні використовували лабораторну установку, що складалась з ємності для бродіння, приймальної ємності та ємності для збору біогазу. Після механічної обробки фрезерною мішалкою: швидкість обертання ротора мішалки – 7 с^{-1} , частота коливання рідини 224 с^{-1} , критерій Рейнольдса $3,49 \times 10^4$. Кінетика виділення біогазу з 1 кг сухої суміші побутових відходів і кальцієвмісного шламу зображено на рис.

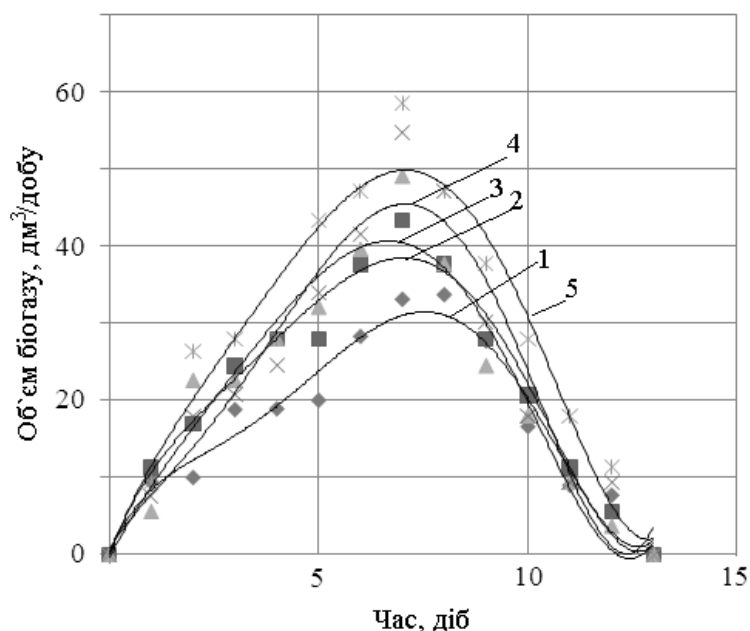


Рис. Кінетика виділення біогазу з 1 кг сухої суміші побутових відходів і кальцієвмісного шламу:

1 – суміш побутових відходів; 2, 3, 4, 5 – суміш побутових відходів при додаванні кальцієвмісного шламу відповідно 5, 8, 10, 15 % на суху речовину

Процес бродіння проходив з різною швидкістю виділення біогазу. Спостерігалось максимальне виділення біогазу з 1 кг сухої речовини на 7–9 добу. Виявлено, що швидкість виділення біогазу протягом 12 діб має однаковий тип проходження процесу (в перші 4–6 діб кількість біогазу зростає, а на 7–9-у добу знижується). Встановлено, що введення процесу метанового бродіння побутових відходів в мезофільному режимі з додаванням 10–15 % кальцієвмісного шламу на суху речовину при попередній обробці сировини фрезерною мішалкою прискорює процес у 0,6–0,7 разів.

ОБґРУНТУВАННЯ ВИБОРУ КОНЦЕНТРАЦІЇ ЕЛЕКТРОПРОВІДНОЇ ДОБАВКИ ДЛЯ ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО СИНТЕЗУ ПЕРОКСИОЦТОВОЇ КИСЛОТИ

Білоус Т. А., Тульський Г. Г., Мухін А. С.

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»
beloustany@ukr.net

Пероксиоцтова кислота (ПООК) – це сильний дезінфектант з широким спектром антимікробної активності. Широкому розповсюдженню перешкоджає висока вартість пов'язана з обмеженим виробництвом та нетривалим терміном зберігання. Як відомо, ПООК в промислових масштабах отримують хімічним методом. Для його реалізації використовують концентровану оцтову кислоту, концентрований пероксид водню та кислотний каталізатор – H_2SO_4 .

Використання електрохімічного синтезу дозволяє одержувати ПООК високої чистоти безпосередньо на місцях використання, тим самим виключаючи витрати пов'язані зі зберіганням та транспортуванням. Кислота виробляється у кількості необхідній для споживання. Основною проблемою електролізу водних розчинів оцтової кислоти є значний питомий опір електроліту та відповідно, високі питомі витрати електроенергії при синтезі ПООК. Низька електропровідність призводить к значним втратам струму при проходженні через електроліт, наслідком чого являється розігрів електроліту. Збільшення температури електроліту негативно впливає на стабільність пероксо-сполук, котрі утворюються на поверхні аноду, та, як наслідок, знижує вихід за струмом цільового продукту (ПООК).

Мета досліджень: дослідити вплив концентрації електропровідної добавки на кінетику анодних процесів в водних розчинах оцтової кислоти на платиновому електроді.

Дослідження впливу концентрації оцтової кислоти на електропровідність показали, що найбільшу питому електропровідність мають розчини в діапазоні концентрацій $2 \dots 5$ моль/дм³ ($\kappa = 1,4 \dots 1,6 \cdot 10^{-3}$ См/см). Для зниження питомого опору електроліту необхідно ввести до його складу електропровідну добавку. В якості електропровідної добавки обрано H_2SO_4 , так як при потенціалах електрохімічного синтезу ПООК вона не буде приймати участь в анодному процесі на відміну від HCl . Вибір концентрації сульфатної кислоти базувався на наступному: падіння напруги в аноліті не повинно перевищувати 50 мВ.

На основі отриманих результатів встановлено: збільшення концентрації сульфатної кислоти від 0,2 до 0,5 моль/дм³ призводить до збільшення електропровідності електроліту та зменшенню перенапруги утворення ПООК; електрохімічний синтез ПООК доцільно проводити в діапазоні густин струму $500 \dots 1500$ А/м², так як він відповідає максимальному виходу за струмом для цільового продукту; склад електроліту для подальших досліджень, моль/дм³: $\text{CH}_3\text{COOH} - 3$, $\text{H}_2\text{SO}_4 - 0,5$; електроліз електроліту обраного складу дає можливість напрацьовувати розчини з концентрацією ПООК 0,01 % ($j = 100$ мА/см²; $Q = 2,6$ А·ч). Діапазон робочих концентрацій розчинів, що застосовується на місцях використання (як дезінфектант в харчовій промисловості та медицині, для дезінфекції стічних вод), складає в % по ПООК 0,001...0,3. Для збільшення виходу за струмом та відповідно діапазону напрацьованих концентрацій ПООК до обраного складу електроліту доцільно додати промотори утворення пероксо-групи. Настуні дослідження направлені на дослідження впливу таких добавок на кінетику анодного процесу при електрохімічному синтезі ПООК та вихід за струмом цільового продукту.

**ВИБІР ПАРАМЕТРІВ СПЕКТРІВ ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ІМПЕДАНСУ
ДЛЯ ОЦІНКИ СТАНУ ПЕРВИННИХ ДЖЕРЕЛ СТРУМУ***Бойчук О. В., Рябоконь О. Л.*Міжвідомче відділення електрохімічної енергетики НАН України
9spiritlucker9@gmail.com

Спектроскопія електрохімічного імпедансу (CEI) широко використовується для вимірювання та дослідження міжфазних та об'ємних електрохімічних властивостей матеріалів та пристроїв на їх основі. Однак не всі вони спроможні оцінювати стан працездатності первинних джерел струму. Тому метою роботи був вибір необхідних параметрів спектрів електрохімічного імпедансу, що оцінюють стан працездатності первинних хімічних джерел струму (ХДС). У якості зразків були обрані первинні лужні цинк-мангові елементи Duracell в габаритах AAA (MN 2400) з напругою 1,5 В, які випробувались двома незалежними методами: 1 – розрядження в гальваностатичному режимі на потенціостаті ПИ50-1 при густині постійного струму з 10, 20, 30, 40, 50, 60 мА/см² при температурі (20±5) °С протягом 80 хв; 2 – вимір імпедансу розряджених ХДС із застосуванням електрохімічного модуля Autolab - 30, PGSTAT301N Metrohm Autolab, оснащеним модулем FRA в інтервалі частот 10⁻²–10⁶ Гц, при амплітуді возмущающего сигналу ±5 мВ. Керування модулем FRA здійснювали за допомогою програми Autolab 4.9. Обробка отриманих результатів проводилась в пакеті Zview 2.0. Вимірювання параметрів первинних джерел струму встановили, що стандартні методи з використанням постійного струму не дають повної оцінки стану працездатності ХДС (рис. 1), а використання значень розподілу ємності в широкому діапазоні частот надає значно більш інформації про стан працездатності електрохімічних систем. Згідно з цим, за однаковий час при навантаженні в 10 мА / см² (рис. 2), ХДС має значно більший ресурс ніж при навантаженні в 60 мА/см² (рис. 3). При цьому показник напруги розімкнутого ланцюга (НРЦ) змінюється дуже повільно, і не дозволяє численно оцінити робочий ресурс ХДС. Найбільш доцільно знімати спектри електрохімічного імпедансу у частотному діапазоні 10¹–10³.

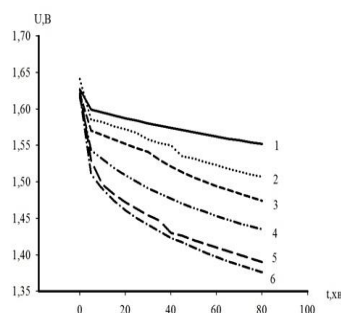


Рис. 1. Гальваностатичні криві розрядження елементів при густині струму: 1 – 10 мА/см²; 2 – 20 мА/см²; 3 – 30 мА/см²; 4 – 40 мА/см²; 5 – 50 мА/см² та 6 – 60 мА/см²

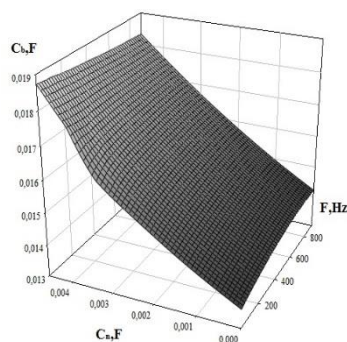


Рис. 2. 3D діаграма первинних ХДС при розрядженні 10 мА/см²

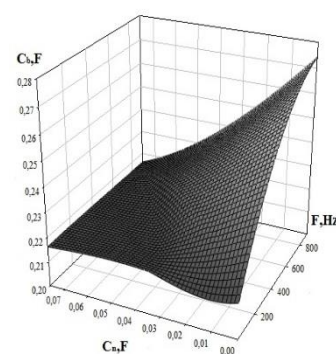


Рис. 3. 3D діаграма первинних ХДС при розрядженні 60 мА/см²

**БАГАТОСВИНЦЕВІ ЛЕГКОПЛАВКІ СТЕКЛА ТА СКЛОКОМПОЗИЦІЇ
НА ЇХ ОСНОВІ***Гордєєв Ю. С., Носенко О. В., Голеус В. І.*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»
yuriihordieiev@gmail.com

Розвиток мікроелектроніки викликало необхідність створення легкоплавких матеріалів для з'єднання деталей із різних матеріалів (кераміки, скла, металів) при температурі не вище 450 °С. Висока температура спаювання може призвести до порушення роботи приладів, в результаті окислення і деформації металевих деталей, які знаходяться в області спаю. Використання легкоплавкого скла в якості припою дозволяє отримати вакуумно-щільний спай при низькій температурі.

Вибір склоутворюючої системи залежить в першу чергу від призначення скла і комплексу фізико-хімічних характеристик, якими це скло повинно володіти.

Метою цих досліджень є розробка складів легкоплавких склоприпоїв і композиційних матеріалів для спаювання кераміки ВК-95 зі сплавом «ковар». Припій повинен водночас володіти низьким значенням ТКЛР $\sim 55 \cdot 10^{-7}$ град⁻¹, невисокою температурою спаювання <450°С, добре змочувати поверхні з'єднувальних деталей та мати високі електроізоляційні характеристики.

Практичні основи стекол для спаювання базуються на склоутворюючих системах PbO-B₂O₃-SiO₂ та PbO-B₂O₃-ZnO. Разом з цими системами досить широке застосування в якості основи легкоплавкого скла отримала система PbO-B₂O₃-ZnO-SiO₂. При цьому склоутворення й властивості скла в даній системі вивчені в області з високим вмістом PbO >60 мол. %.

Нами були проведені дослідження стекол в області системи PbO-B₂O₃-ZnO-SiO₂ з вмістом PbO 55 мол. % та отримані склади стекол с температурою з'єднання 380–440 °С і температурним коефіцієнтом лінійного розширення $90\text{--}117 \cdot 10^{-7}$ град⁻¹. Дослідженні скла мають високі електроізоляційні властивості ($\rho = 10^{10}\text{--}10^{11}$ Ом·см) та добре змочують поверхні металокерамічного вузлу.

Проведені дослідження дозволили знайти область прозорих стекол, що не кристалізуються і визначити вплив складових окислів на процес склоутворення й кристалізаційну здатність.

В результаті проведених досліджень по вивченню склоутворення, кристалізаційних, діелектричних та інших властивостей були обрані оптимальні склади легкоплавких стекол, які представляють інтерес в якості припою для герметичного з'єднання матеріалів з відповідним ТКЛР.

На основі досліджених стекол, розроблені склокомпозиційні матеріали з кристалічним наповнювачем, які характеризуються більш низьким значенням ТКЛР при збереженні легкоплавкості, що дозволило розширити діапазон застосування розроблених матеріалів, зокрема, використовувати їх для низькотемпературного з'єднання металокерамічних вузлів з ТКЛР $50\text{--}60 \cdot 10^{-7}$ град⁻¹.

ТОКСИКОЛОГІЧНА НЕБЕЗПЕКА ВІДХОДІВ ГАЛЬВАНІЧНИХ ВИРОБНИЦТВ

Диманов Б. В., Даценко В. В.

Харківський національний автомобільно-дорожній університет

chemistry@khadi.kharkov.ua

У дійсний час суттєвий вклад у забруднення навколишнього природного середовища (НПС) та водних об'єктів (ВО) вносять зростаюча кількість стічних вод і шламів гальванічних виробництв. Деякі підприємства нейтралізують стічні води, за результатами чого утворюються шлами, які складуються у шламонакопичувачах без переробки та утилізації. Накопичення гальваношламів займає корисні площі і призводить до забруднення водойм. Для пошуку більш раціональних шляхів вирішення проблеми, виникає необхідність у попередньому обліку і санітарно-екологічному оцінюванні таких відходів.

Клас небезпеки (KH) відходів різних виробництв визначали для деяких промислових підприємств міст України (Суднобудівельний завод «Залив», ОАО «Никра», ОАО «Завод ФИОЛЕНТ», ОАО «Нева»), Росії (ООО «Консалтинговая группа «НОРД»), Білорусії (РУП «Белорусский металлургический завод»). У сучасній екологічній практиці ідентифікація класу небезпеки (токсичності) відходів для навколишнього середовища розрахунковим методом здійснюється на визначенні показника (K_{Σ}) та встановленні граничного вмісту токсичних речовин ($C_{\text{гр}}$) у загальній масі відходів. K_{Σ} характеризує ступінь небезпеки відходу при його впливі на навколишнє середовище, і розраховується за сумою показників небезпеки компонентів відходу. Індекс токсичності (K_i) для кожного компонента у відходах розраховували по встановленому фізико-хімічному складу за значенням середньої смертельної дози хімічного інгредієнту при введенні у шлунок (LD_{50}) або гранично дозволених концентрації токсичних хімічних речовин у ґрунті ($ГДК_{\text{п}}$). Промислові відходи мають подібний компонентний склад. У відходах розглянутих підприємств, концентрації металів помітно коливались, мг/кг: цинк – 37–299963, мідь – 36–50000, нікель – 254–161568, хром – 2923–55538, свинець – 10–18565, залізо – 7280–27489, кобальт – ~4974, марганець – 1077–3176, кадмій – ~0,88, ртуть – ~0,92. Така різниця у кількісному вмісті важких металів у відходах виробництва однієї галузі залежить від міцності підприємства та технології процесів, які використовуються. Розрахунок індексу токсичності (K_i) для кожного компонента у відходах показав, що найбільшу токсичність мають в першу чергу сполуки цинку (K_i (по LD_{50}) = 5,8–12,7), потім сполуки заліза (K_i (по LD_{50}) = 9,7–42,2) та сполуки хрому (K_i (по LD_{50}) = 13,5–97,8), а потім вже усі інші сполуки металів, що входять до складу відходів. При регулярному скидуванні в промсток відходів, які вміщують важкі метали навіть в значно малих кількостях, призводить до їх накопичення у НПС у достатньо високих концентраціях, а це має негативний біологічний вплив на організми людини та тварин.

Розрахунок сумарного індексу токсичності відходів підприємств України показує, що згідно класифікації небезпеки хімічних речовин на основі як LD_{50} , так і $ГДК_{\text{п}}$ промислові відходи більшою частиною належать до IV класу небезпеки, тобто є малонебезпечними для навколишнього середовища. Про низьку токсичність відходів свідчить і низьке значення граничного вмісту токсичних речовин ($C_{\text{гр}} \leq 1$) у загальній масі відходів. Тільки відходи російського підприємства ООО «Консалтинговая группа «НОРД» мають значення K_{Σ} (по $ГДК_{\text{п}}$) = 8,95 і K_{Σ} (по LD_{50}) = 3,7, тобто, відносяться до групи високо- або повільнонебезпечних відходів. Така відмінність класу небезпеки відходів різних підприємств гальванічного виробництва можна пояснити різними об'ємами виробництва. Однак, якщо порівняти російське і білоруське підприємство, то на білоруському підприємстві об'єми відходів у 25 разів перевищують відходи російського підприємства, однак при цьому мають низький клас небезпеки. Імовірно, це може бути пов'язано з тим, що на розглянутому російському підприємстві використовують старе обладнання і технологічний процес, тому галузь відрізняється великими об'ємами відходів, мізерністю засобів очищення та нейтралізації токсичних викидів та викидів, що надає більш згубний вплив на екологію.

**ЗАСТОСУВАННЯ УЛЬТРАЗВУКУ НА СТАДІЇ «БІЛОЇ ФІЛЬТРАЦІЇ»
В ТЕХНОЛОГІЇ ПІГМЕНТНОГО ДІОКСИДУ ТИТАНУ**

Дубенко А. В., Ніколенко М. В., Авдієнко Т. М., Верещак В. Г.
ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»
anastasiia.dubenko@gmail.com

Для одержання конкурентноспроможного пігменту діоксиду титану необхідно знизити його собівартість, що можливо за рахунок інтенсифікації стадії його хімічної очистки, іменованої у виробництві як стадія «білої» фільтрації. Справа в тому, що після гідролізу солей титанілсульфату утворюється суспензія гідратованого діоксиду титану (ГДТ), а на його поверхні адсорбуються іони сторонніх електролітів, що погіршують якість цільового продукту. Відмивання ГДТ від таких домішок проводиться, як правило, за допомогою багаторазової репульпації в чистій воді з подальшою декантацією, згущенням суспензії і фільтрацією.

Нами запропоновано сульфатно-флуоридний спосіб одержання пігментного діоксиду титану із зміненого ільменіту, який полягає у використанні фторуючого агенту на стадії сульфатизації. Це дозволяє переробляти домішки рутильної форми діоксиду титану, яка практично не розчиняється у концентрованій сульфатній кислоті при її нагріванні до температури кипіння. Була поставлена задача знайти оптимальні умови відмивки осаду ГДТ від флуорид-іонів. В попередніх експериментах було знайдено, що саме флуорид-іони найбільш сильно адсорбуються на поверхні ГДТ.

У модельних експериментах отримували осади ГДТ в присутності NaF способом нейтралізації розчинів TiOSO_4 розчином лугу. Суспензії ГДТ фільтрували під вакуумом. До осаду на фільтрі у воронці Бюхнера додавали воду, після чого суспензії витримували певний час в умовах ультразвукової обробки. Частота ультразвукового випромінювання становила 22 кГц при потужності генератора 100 Вт та інтенсивності випромінювання $1,2 \text{ Вт/см}^2$. Після ультразвукової обробки суспензію знов фільтрували і в отриманому фільтраті визначали вміст фторид-іонів спектрофотометричним методом.

На рисунку представлені результати досліджень процесу «білої» фільтрації без ультразвукової обробки та з ультразвуковою обробкою суспензії ГДТ.

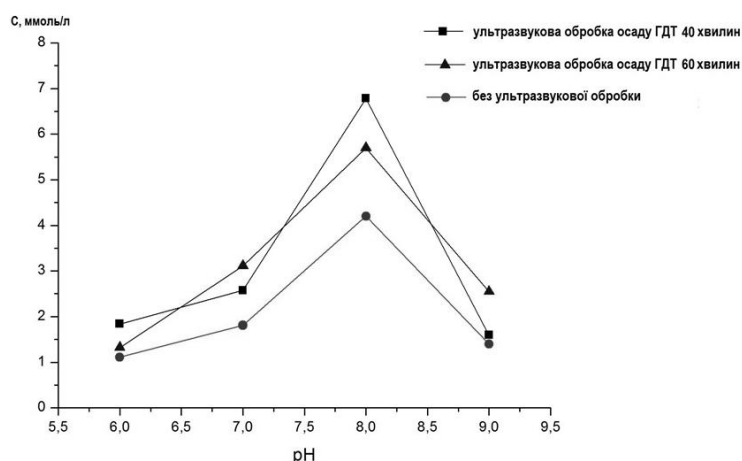


Рис. Концентрація фторид-іонів в розчині після двоступеневої фільтрації осадів

Експерименти показали, що ультразвук інтенсифікує процес десорбції домішок з поверхні осаду ГДТ, а максимум десорбції відповідає pH точки нульового заряду поверхні ГДТ (pH = 8). Зроблено висновок, що процес десорбції флуорид-іонів протікає в дифузійному режимі і для його інтенсифікації можливо використовувати як ультразвук, так і додаткове перемішування суспензії ГДТ.

ВИКОРИСТАННЯ ФУЛЕРЕНІВ В ЯКОСТІ ПРИСАДОК ДО ПАЛИВНО-МАСТИЛЬНИХ МАТЕРІАЛІВ*Єфіменко О. В.*Філія «ЦМГС» Національної акціонерної компанії «Нафтогаз України»
s94000@ukr.net

Протягом останнього часу відбувся досить значний прогрес в технологічних процесах одержання та дослідження наноматеріалів, синтезу нанокластерів ряду металів, фулеренів і вуглецевих нанотрубок, зроблений значний крок вперед в методах вивчення їх властивостей та застосування.

Один із напрямів сучасної хімічної технології, що найдинамічніше розвивається, пов'язаний з відкриттям і дослідженням фулеренів. Останнім часом їхньому вивченню приділяють багато уваги і це логічно. Адже відкриття нової алотропної модифікації вуглецю сприяло значному розвитку багатьох напрямків науки і техніки. Не минуло це відкриття й нафтохімію. Застосування наноматеріалів у цій галузі є особливо перспективним напрямком.

Паливно-мастильні матеріали нафтового походження мають низьку хімічну і термоокиснювальну стабільність, тобто їх вуглеводні характеризуються підвищеною схильністю до окиснення, смоло- і осадоутворення. Встановлено, що стабілізація таких палив та олів традиційними інгібіторами недостатньо ефективна. Існує необхідність розробки і впровадження присадок нового покоління для ефективної роботи паливно-мастильних матеріалів.

Через підвищений знос деталей порушується стабільність роботи насосів-регуляторів, частоти їх обертання, початку автоматичної роботи, витрати палива при мінімальній і максимальній продуктивності, характеристики автоматів запуску, тиску палива. Зміна вище перерахованих показників, які регулюються заводом-виробником, впливає на експлуатаційні параметри двигуна і надійність роботи його вузлів і деталей.

Проведено дослідження можливості застосування фулеренів в якості присадок, що значно поліпшують фізико-хімічні властивості паливно-мастильних матеріалів.

Для оцінки впливу фуллерену C_{60} на антиокисні властивості палив проводили випробування відповідно до ГОСТ 11802. Метод полягає в окисненні зразка палива в присутності міді як каталізатора у приладі ТСРТ-2 за температури 150 °C протягом 4 год з наступною кількісною оцінкою утвореного осаду.

У процесі дослідження спостерігали за зміною концентрації осаду залежно від концентрації фулерену, який додавали як присадку, для покращення антиокисних властивостей палива. Для дослідження було вибрано паливо для реактивних двигунів марки *РТ*. Як показали результати випробувань, що додавання навіть незначної кількості фулерену (до 0,025 г/л) в якості антиокиснювальної присадки, зменшує кількість осаду в паливі з 6 до 3,8 мг/100 см³.

Проведено дослідження впливу фулеренів на змащувальні властивості реактивного палива *РТ* та проаналізовано величину зносу деталей.

Протизносні властивості оцінювалися на приладі УПС-01. За результатами досліджень визначали знос по діаметру плям зносу d .

У процесі дослідження спостерігали за зміною величини зносу залежно від концентрації фуллерену. Як показали результати досліджень присутність в паливі фулерену в концентраціях 0,025 г/л, при випробовуваннях у стандартних умовах тертя, призводить до значних змін характеру вихідної текстури поверхні та зменшення діаметра плями зносу з 0,74 до 0,55 мм. Тому, використання фулеренів в якості антиокисних та протизносних присадок є перспективним напрямком проведення наукових досліджень.

**ВИКОРИСТАННЯ ВІДПРАЦЬОВАНИХ ОЛИВ ДЛЯ ВИРОБНИЦТВА
ПЛАСТИЧНИХ МАСТИЛ**

Іванова І. О., Атаманенко Н. С., Добрівська О. О., Кучерук М. А.

Національний авіаційний університет

inna.ivanova0206@ukr.net

Постійне зростання автопарку призводить до збільшення кількості відпрацьованих нафтопродуктів, в першу чергу моторних олив, що негативно впливають на всі об'єкти навколишнього середовища – атмосферу, ґрунт і воду. Необхідність утилізації відпрацьованих олив в даний час ні в кого не викликає сумнівів, але їх знищення породжує ще більші екологічні проблеми, ніж самі відпрацьовані оливи.

Відпрацьовані моторні оливи токсичні і канцерогенні, мають невисоку ступінь біорозкладання (10–30 %), є суттєвим джерелом забруднення навколишнього середовища, так як потрапляння їх у ґрунт і водойми в даний час перевищує за обсягом аварійні скиди і втрати нафти при її видобутку, транспортуванні та переробці, а при їх утилізації методом спалювання відбувається забруднення атмосфери діоксидом сірки, важкими металами, канцерогенними речовинами.

У зв'язку з цим велике значення має повне або часткове відновлення якості відпрацьованих олив з метою їх повторного використання. Для відновлення відпрацьованих олив застосовуються технологічні операції, засновані на фізичних, фізико-хімічних, хімічних процесах, сутність яких полягає в обробці оливи з метою видалення продуктів старіння і забруднення.

Повторне використання відпрацьованих моторних олив після очищення за прямим призначенням в чистому вигляді або в суміші зі свіжою оливою вимагає кваліфікованого підбору відповідних пакетів присадок, однак і в цьому випадку регенеровані оливи схильні до більш інтенсивного старіння в порівнянні з оливами, одержаними традиційним способом.

В останні роки активно ведуться розробки в галузі використання відпрацьованих і регенерованих моторних олив в якості дисперсійного середовища пластичних мастил, емульсій та інших змащувальних рідин. Одним з напрямків повторного застосування відпрацьованих моторних олив може служити їх використання в якості дисперсійного середовища антифрикційних і консерваційних мастил.

Як правило, мастила складаються з трьох компонентів: 70–90 % дисперсного середовища (рідкої основи – оливи), 10–13 % дисперсної фази (твердого загусника) і 1–15 % добавок (модифікаторів структури, присадок і наповнювачів).

В якості дисперсійного середовища вибрано відпрацьовану всесезонну напівсинтетичну моторну оливу Castrol MAGNATEC 5W-30, пробіг автомобіля на цій оливі склав 20 тис. км. Як загусник мильних мастил використаний стеарат кальцію (ТУ 2432-061-5685807-04). Мильні пластичні мастила одержували наступним чином: зважували необхідні компоненти мастила (стеарат кальцію, нерегенеровану оливу) з розрахунку на загальну масу готового мастила – 100 г. У варильний апарат завантажували нерегенеровану оливу, кальцієве мило і воду (0,5 мл). Вміст апарату при безперервному перемішуванні підігрівали до 110–115 °С і витримували 30 хв. Мильно-масляний розчин охолодили до 105 °С і додали ще 0,5 мл води, не припиняючи перемішування, мастило охолодили у варильному апараті до кімнатної температури.

Для порівняльного аналізу показників якості та умов експлуатації синтезованого пластичного мастила обрано промисловий аналог – мильне мастило Солідол Ж (ГОСТ 1033). Як показали результати досліджень за основними показниками якості синтезоване мастило не поступається промислому зразку.

АНАЛІЗ ТЕМПЕРАТУРНИХ УМОВ КОКСУВАННЯ В ПРОМИСЛОВИХ ПЕЧАХ РІЗНОЇ ШИРИНИ

Кардаш М. О., Збиковський О. І.

Донецький національний технічний університет

oleksandr.zbykovskyi@donntu.edu.ua

Для аналізу були взяті опубліковані в літературі криві підйому температури, отримані в результаті вимірювання за допомогою термопар по ширині вугільного завантаження, що коксується, в промислових печах. Камери коксування, в яких проводились вимірювання, мали ширину 384 і 494 мм. Періоди коксування складали 13,8 і 17 г відповідно.

За цими кривими були розраховані середні швидкості підйому температури в температурних інтервалах, які відповідають певним стадіям процесу коксоутворення (таблиця).

Таблиця. Середні швидкості нагрівання (°C/хв) на різних відстанях від стінки в камерах шириною 384 і 494 мм

Температурний інтервал, °C	Камера шириною 384 мм					Камера шириною 494 мм					
	10 мм	50 мм	110 мм	150 мм	192 мм	10 мм	62 мм	112 мм	162 мм	212 мм	247 мм
200 – 350	–	2,7	1,9	1,9	2,4	–	2,7	1,9	1,8	1,8	2,3
350 – 500	–	4,3	2,6	1,7	2,6	–	3,0	2,5	2,6	2,2	2,5
500 – 650	4,2	2,2	1,8	1,9	3,1	7,1	1,9	1,5	2,2	2,1	2,7
650 – 800	1,1	0,9	0,7	1,9	3,4	2,4	1,0	0,7	0,7	0,9	1,7
800 – 900	0,3	0,3	1,0	1,9	3,2	0,5	0,3	0,4	0,7	1,0	1,8
900 – t_k	0,5	0,9	1,8	1,9	3,0	0,2	0,3	0,7	0,7	2,5	2,5

У вузькій камері (384 мм) пристінкові шари завантаження (10 мм від стінки камери) досягають 800 °C через 3,5 г після початку коксування, а осьові – через 12 г. Час теплового впливу в пристінкових шарах на 9 г більше, ніж в осьових.

У широкій камері (494 мм) пристінкові шари завантаження досягають 800 °C за 2 г, що можна пояснити більш високою температурою (на 50–60 °C) в опалювальних простінках. Осьовим шарам завантаження для нагріву до 800 °C потрібно 15,5 г. Різниця у часі теплового впливу на кокс між пристінковими і осьовими шарами зростає до 13,5 г.

Середня швидкість нагрівання в інтервалі 350–500 °C, що відповідає найбільш важливій для спікання вугільних частинок і формування властивостей міцності коксу стадії пластичного стану, у вузькій камері в міру віддалення від стінки зменшується від 4,3 до 1,7 °C/хв, зростаючи до 2,6 °C/хв в осьовій площині, у широкій камері також зменшується від 3 до 2,2 °C/хв, зростаючи до 2,5 °C/хв в осьовій площині. Зростання швидкості нагрівання в осьовій площині можна пояснити двостороннім підведенням тепла від двох опалювальних простінків. Відмінності в швидкостях нагрівання по ширині широкої камери в цьому температурному інтервалі менше, що приводить до більшої однорідності коксу, що виробляється в ній.

Таким чином кокс, що виробляється в сучасних коксових печах, є продукт-суміш, окремі частини якого, що знаходились в камері коксування на різних відстанях від стінки, сформувались під впливом різних за величиною технологічних факторів. В різновіддалених від стінки камери точках завантаження процес коксування характеризується різними швидкостями нагрівання, різним часом теплового впливу на кокс і близькими за величиною кінцевими температурами коксування.

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РАЗЛИЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ОЧИСТКИ
СТОЧНЫХ ВОД КРАСИЛЬНО-ОТДЕЛОЧНЫХ ПРОИЗВОДСТВ***Комяняк В. А., Шибека Л. А.*

Учреждение образования «Белорусский государственный технологический
университет»
Shibekal@mail.ru

Сточные воды красильно-отделочных производств характеризуются сложным составом, что обусловлено применением в технологическом процессе изготовления текстильных изделий различных красильно-отделочных композиций, содержащих органические и минеральные соединения. Необходимость применения таких композиций связано с производством большого ассортимента изделий и разнообразной цветовой гаммой выпускаемой продукции. Образование значительного количества сточных вод на таких предприятиях обусловлено также большим числом промывок окрашенного полотна. Несмотря на использование многоступенчатой очистки сточных вод на окрасочно-отделочных предприятиях, очищенные стоки, зачастую, характеризуются высокой цветностью. В работе проведены исследования, направленные на поиск новых материалов для удаления красящих веществ из сточных вод красильно-отделочных производств.

Цель работы состояла в изучении процессов доочистки воды красильно-отделочных производств с использованием различных материалов.

Исследования проводились на сточных водах, образующихся на одном из красильно-отделочных предприятий Республики Беларусь и отобранных перед сбросом их в городскую канализационную сеть.

В работе использовали природные глины различных месторождений: «Городок» (Республика Беларусь), «Крупейский сад» (Республика Беларусь), «Веселовское» (Украина), а также образцы торфяной и древесной золы (всего 4 образца), образующиеся при различных условиях сжигания соответствующего топлива в промышленных и бытовых теплоэнергетических установках. Следует отметить, что зола, образующаяся при сжигании древесного и торфяного топлива, в соответствии с классификатором отходов Республики Беларусь имеет 3 класс опасности и, согласно данным статистической отчетности, практически не используется в народном хозяйстве и подлежит захоронению.

Эффективность процесса доочистки сточных вод с использованием указанных материалов оценивали по величине оптической плотности раствора до и после взаимодействия фаз. Концентрация исследуемых материалов составляла 1,5 г/дм³.

Установлено, что наилучшей способностью снижать цветность сточных вод обладает образец золы, образующейся при сжигании древесной массы на одном из деревообрабатывающих предприятий Республики Беларусь (степень очистки составляет 76,6 %), и образец золы, образующейся при сжигании торфа в бытовых условиях (степень очистки составляет 73,4 %). Оставшиеся два образца золы: торфяная и древесная, образующиеся на иных промышленных объектах, имеют степень очистки 64,9 % и 67,5 % соответственно.

Минимальная эффективность обесцвечивания сточных вод наблюдается при использовании природных глин (степень очистки изменяется в диапазоне 44,8–62,3 %). Наибольшая степень очистки сточных вод имеет место при использовании глины месторождения «Веселовское».

Таким образом, измельченные торфяная и древесная зола могут найти применение в процессах доочистки сточных вод, образующихся на красильно-отделочных предприятиях.

ПЕРЕРАБОТКА ШЛАМА ХИМВОДООЧИСТКИ ТЭЦ

*Конач А. И., Залыгина О. С.*Белорусский государственный технологический университет
zolha@tut.by

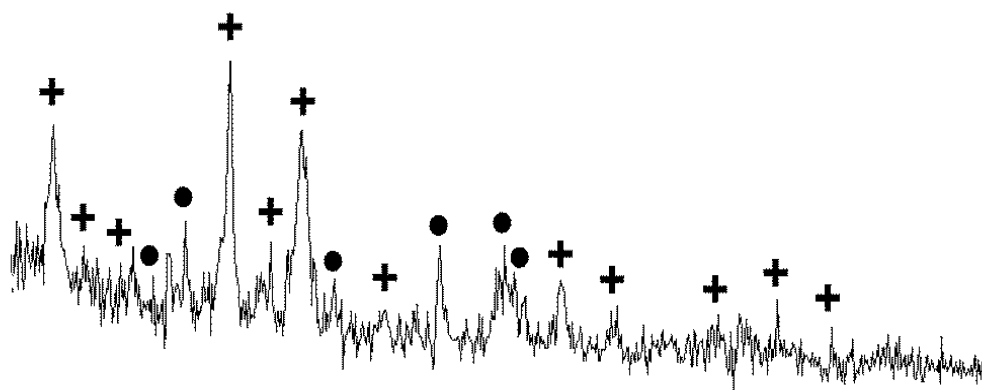
Водоподготовка на ТЭЦ – необходимый процесс работы теплоэлектростанции. При этом образуется значительное количество отходов – шлама химической водоподготовки (ХВО). Поэтому целью данного исследования является поиск путей переработки шламов ХВО с получением товарной продукции.

Исследования проводились на одной из белорусских ТЭЦ, где в качестве коагулянта для удаления взвешенных веществ на стадии водоподготовки используется сульфат железа. В настоящее время на ТЭЦ образуется около 1300 т/год шлама ХВО. К 2016 году на территории ТЭЦ накопилось около 79 000 тонн шлама ХВО.

С помощью электронно-микроскопического анализа было установлено, что шлам ХВО ТЭЦ имеет следующий элементный состав (масс.%): С – 9,54; О – 30,26; Mg – 3,0; Al – 1,12; Si – 6,64; S – 0,91; К – 0,76; Ca – 40,03; Fe – 7,74. С помощью рентгенофазового состава было установлено, что основной фазой шлама ХВО является карбонат кальция.

Существуют различные направления использования известковых шламов ХВО в промышленности и сельском хозяйстве. Основными из них являются: применение для известкования кислых почв; получение известкового удобрения; использование в качестве гидроизоляционного материала при обустройстве котлованов; использование в качестве наполнителя в резинотехнические смеси; применение шлама в качестве адсорбента нефтепродуктов сточных вод; применение для производства извести.

В данном исследовании использование шлама ХВО по названным направлениям затруднено вследствие содержания в нем довольно большого количества железа – 7,74 масс.%. Это связано с использованием в качестве коагулянта сульфата железа. Учитывая хромофорные свойства железа и широкое распространение железистых пигментов, в работе исследовали возможность получения пигмента на основе шлама ХВО ТЭЦ-2Г. Для этого шлам подвергали термообработке при температуре 1000 °С, которая обеспечивает разложение как FeSO_4 , так и CaCO_3 . При этом образуется смесь CaO и Fe_2O_3 , о чем свидетельствуют данные рентгенофазового анализа (рисунок).



● – характеристические пики CaO , + – характеристические пики $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ (маггемит).

Рис. Рентгенограмма прокаленного при 1000 °С шлама ХВО ТЭЦ

Полученный материал коричневого цвета может использоваться в качестве пигмента для окрашивания глазури для керамики, что было подтверждено экспериментальными исследованиями.

ВПЛИВ НАФТОГАЗОВОЇ ГАЛУЗІ НА ДОВКІЛЛЯМаховський В. О., *Крюковська О. А.*Дніпровський державний технічний університет, Україна
rosuna2003@mail.ru

Нафтогазова галузь являє собою важливу складову частину паливно-енергетичного комплексу України, яка разом з іншими галузями забезпечує пошук, розвідку та розробку родовищ нафти і газу, транспортування, переробку, зберігання і реалізацію нафти, газу, продуктів їх переробки. Нафтогазова галузь забезпечує енергетичну незалежність держави, тому її стану і розвитку приділяється значна увага.

Специфіка територіального розміщення підприємств нафтогазового комплексу безумовно впливає на екологічний стан окремих областей України особливо в регіоні Дніпровсько-Донецької западини та Прикарпатті. Актуальним воно є для районів нафтогазовидобутку та нафтогазопереробки, де особливо висока концентрація об'єктів видобутку, переробки, зберігання та транспортування вуглеводневої сировини. Існуючі галузеві технологічні процеси характеризуються високою ймовірністю виникнення аварійних ситуацій. У технологічних процесах кожного з цих підприємств утворюються різноманітні за своїм хімічним складом відходи. Майже всі виробничі об'єкти нафтогазової промисловості у відповідних умовах забруднюють всі компоненти природного середовища різноманітними шкідливими речовинами. Тому нафтогазові підприємства за рівнем шкідливої дії на природне середовище вважаються об'єктами підвищеного екологічного ризику. При розробці нафтогазових родовищ густонаселені райони області зазнають значного техногенного впливу, і всі компоненти довкілля потерпають від його шкідливої дії. Частина нафтових і газових родовищ області розташована в межах заплав та перших надзаплавних терас річок, знаходиться близько державних гідрологічних заказників або займає їх землі. За таких умов навіть незначні техногенні потоки від родовищ можуть суттєво вплинути на природні екосистеми. Особливу можуть викликати викиди рідких вуглеводнів, що спричиняють забруднення існуючих біоценозів. Аварійні розливи при видобутку газоподібних та рідких горючих копалин призводить як до їх виведення з сільськогосподарського обігу, так і сприяє забрудненню токсичними речовинами інших компонентів навколишнього середовища. За останні десятиріччя в Україні було зафіксовано велика кількість аварійних викидів нафти, газу та води при бурінні, більше половини з них відбулося на території Дніпровсько-Донецької нафтогазоносною провінції. У результаті аварій відбувалось забруднення земель, поверхневих та підземних вод.

Несприятливий антропогенний тиск на здоров'я населення виявляється в основному в наслідок накопичення шкідливих забруднюючих речовин у ґрунтах, рослинах і харчових ланцюгах за тривалий період, що впливає на імунологічну та генетичну системи людини. Аналогічну дію спричиняє забруднення поверхневих і підземних вод та вживання питної води, що не відповідає гігієнічним вимогам.

Необхідним заходом, спрямованим на те, щоб запобігти та своєчасно відвернути небезпечний вплив забруднень відходами нафтогазової галузі на довкілля, є проведення моніторингу компонентів оточуючого середовища. Система моніторингу спрямована на підвищення рівня вивчення і знань про екологічний стан довкілля, підвищення оперативності та якості інформаційного обслуговування користувачів на всіх рівнях та підвищення якості обґрунтування природоохоронних заходів і ефективності їх здійснення. Моніторингу підлягають як джерела забруднення навколишнього середовища, також компоненти довкілля, які потерпають від їх техногенного тиску. Це стосується і таких джерел забруднення, якими є відходи нафтогазовидобувних та переробних підприємств, котрі небезпечно впливають на оточуюче середовище.

**РАЗРАБОТКА СОСТАВОВ И ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗНОСОСТОЙКИХ
СТЕКЛОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ***Летченя А. В., Трусова Е. Е.*Белорусский государственный технологический университет, Минск, Беларусь
trusova@belstu.by

Стеклокристаллические материалы относят к наиболее актуальным и перспективным материалам современной техники, обладающим сочетанием ценных и специфических, часто уникальных свойств. В последние годы представляет интерес использование износостойких стеклокристаллических материалов как элементов футеровки барабанов ленточных конвейеров. В данной работе приведены результаты исследования стекол и износостойких стеклокристаллических материалов на их основе. В соответствии с данными литературы перспективной для разработки составов стекол является система $\text{MgO}-\text{CaO}-\text{SiO}_2$, которая характеризуется образованием целого ряда непрерывных твердых растворов – пироксенов, области кристаллизации которых обладают относительно низкими значениями температур ликвидуса. Область исследуемых составов стекол, включает, мас. %: SiO_2 – 50–65; MgO – 10–20; CaO 5–25 и попадает в область кристаллизации пироксеновых твердых растворов. С целью интенсификации процесса стекловарения и снижения температуры синтеза в состав стекла вводится оксид натрия. В качестве катализаторов кристаллизации приняты оксиды титана и циркония.

Варка стекол осуществлялась в газовой печи при 1450–1500 °С с выдержкой при максимальной температуре в течение 1 ч. Скорость подъема температуры в печи составляла 300 °С/ч. Образцы стекол отжигались в муфельной электрической печи при температуре 550 °С. Присутствует коричневое окрашивание разной интенсивности.

Изучены основные физико-химические характеристики стекол. Установлено, что стекла кристаллизуются в интервале температур 860–1100 °С; ТКЛР стекол изменяется от $58,3 \cdot 10^{-7}$ до $76,4 \cdot 10^{-7} \text{ K}^{-1}$; плотность стекол составляет 2593–2667 кг/м³; по химической устойчивости стекла относятся к III гидrolитическому классу, микротвердость стекол изменяется от 5567 до 5870 МПа, теплоемкость стекол составляет 0,69476 Дж/г·К. Изучены зависимости свойств стекол от состава.

Для получения стеклокристаллических материалов использовалась стекольная двухступенчатая термообработка. Режим термообработки стекол выбран в соответствии с данными дифференциально-сканирующей калориметрии. Подготовленные образцы стекла нагревались в программируемой муфельной электрической печи со скоростью 300 °С/ч до температуры 730 °С, обеспечивающей образование зародышей кристаллической фазы, выдерживались 3 ч, затем нагревались до верхней температуры термообработки 1180 °С, выдерживались 2 ч и инерционно охлаждались в печи. В результате термообработки стекол получены стеклокристаллические материалы с мелкокристаллической структурой белого цвета, которые характеризуются следующими свойствами: ТКЛР стеклокристаллических материалов находится в интервале $(72,2-96,5) \cdot 10^{-7} \text{ K}^{-1}$; микротвердость изменяется от 8217 до 9895 МПа, механическая прочность на сжатие – 80–85 МПа, плотность – 2850–2900 кг/м³. Изучен фазовый состав разработанных стеклокристаллических материалов. Показано присутствие фаз: α -кристобалита, диоксида ($\text{MgO} \cdot \text{CaO} \cdot 2\text{SiO}_2$) и энстатита $\text{MgO} \cdot \text{SiO}_2$, рутила (TiO_2). Оксиды титана и циркония дают кристаллические фазы сложного нестехиометрического состава.

Оптимизированы составы стеклокристаллических материалов. По комплексу физико-химических свойств разработанные материалы могут быть использованы как элементы футеровки барабанов ленточных конвейеров.

БАГАТОФУНКЦІОНАЛЬНИЙ РЕАКТОР-НЕЙТРАЛІЗАТОР З МОДУЛЬНИМИ СЕПАРАЦІЙНО-, ТЕПЛО- ТА МАСООБМІННИМИ ПРИСТРОЯМИ

*Люшніченко М. П.¹, Маренок В. М.¹, Смирнов В. А.¹,
Скиданенко М. С.¹, Ляпощенко О. О.¹, Шевчук А. В.²*

¹Сумський державний університет

²ТОВ «Агросервіс»

o.liaposhchenko@pohnp.sumdu.edu.ua

Виробництво рідких азотних добрив, зокрема, аміачної води, в порівнянні з виробництвом твердих азотних добрив обходиться на 30–40 % дешевше, оскільки відпадає необхідність в таких енергоємних технологічних операціях, як гранулювання, сушіння, сортування продукту. Відомо, що основні методи приготування водного розчину аміаку (аміачної води) засновані на абсорбційному поглинанні газоподібного аміаку водою. Наприклад, водний розчин аміаку, що широко застосовується в медицині і відомий під назвою нашатирний спирт, отримують абсорбцією синтетичного аміаку хімічно знесоленою водою. При цьому традиційно в промислових умовах отримують водні розчини технічного аміаку низьких концентрацій – 10 % та 25 % (мас.).

Ефективність абсорбційного поглинання аміаку водою суттєво залежить від температури, що пов'язано зі зменшенням розчинності із зростанням температури, в той же час, розчинність аміаку у воді зростає з підвищенням тиску. У відповідності до закону Генрі витікає, що теоретично стабільну аміачну воду з концентрацією аміаку 34 % (мас.) і вище можна отримати тільки при температурах нижче 10 °С, а при 20–22 °С можна отримати максимальну концентрацію близько 30 %. Зберігати розчини такої концентрації слід при тиску (абсолютному) не нижче 0,2 МПа, чим і обумовлена концентрація аміачної води (25 % мас.), що випускається азотною промисловістю, оскільки вона залишається стабільною навіть при 32 °С. Підвищити вміст основних цільових компонентів (НРК) в отримуваних рідких азотних добривах, що залишаються стабільними навіть за нормальних умов (температура $T = 20$ °С, тиск $P = 0,1$ МПа), можна шляхом заміщення процесу отримання насиченого водного розчину аміаку методом фізичної абсорбції на процеси нейтралізації розчинів кислот (азотної або фосфатної) аміачною водою або газоподібним аміаком, взаємодії солей з аміаком у водному розчині з утворенням стійких амінокомплексів, що представлятимуть собою вже клас рідких комплексних добрив.

Для отримання більш концентрованих водних розчинів запропоновано безперервний спосіб отримання аміачної води високої концентрації (масова доля аміаку 45–50 %, в перерахунку на азот не менше 32 %), заснований на двоступінчатому розчиненні аміаку і насиченні розчину. Для підвищення вмісту азоту у рідких азотних добривах пропонується в зону змішувача-сепаратора додавати фосфатну або азотну кислоти. Апаратне оформлення процесу випаровування зрідженого аміаку, його абсорбційного поглинання водою з поступеним відведенням тепла реакції розчинення аміаку і нейтралізації кислот запропоновано у вигляді комбінованого багатофункціонального об'ємно-трубчастого реактора-нейтралізатора з турбо-ежекційним перемішувачем і вбудованими модульними сепараційними та теплообмінними пристроями, причому така конструкція апарату дозволяє реалізувати як прототечійну, так і протитечійну схему руху потоків. Методами CFD та чисельного термодинамічного моделювання хіміко-технологічних процесів (ХТП) проведено розрахунки матеріальних і теплових балансів з визначенням оптимальних проектних режимних параметрів ХТП. Виконано технологічні та конструктивні розрахунки основних контактних, сепараційних та тепломасообмінних пристроїв апарату.

Робота виконана за підтримки МОН України: ДР №0117U003931.

СИНТЕЗ ФОСФАТНИХ ХАРЧОВИХ ДОБАВОК

Малахова К. В., Ніколенко М. В.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»

пр. Гагаріна, 8, 49005 Дніпро, Україна,

katrin30.01.92.@gmail.com

Ринок харчових добавок пропонує широкий асортимент фосфатвмісних препаратів, які являють собою як окремі фосфати, так і різні їх комбінації. Проте, в Україні відсутні родовища високоякісної фосфорної сировини, і тому фосфатвмісні харчові добавки купують за кордоном. Але у багатьох країнах використовують сировину зі збіднених родовищ для виробництва фосфатів. Тому становить інтерес організувати в Україні виробництво харчових фосфатів на основі власних фосфоритів.

Мета нашої роботи полягала у встановленні закономірностей процесів синтезу високочистих фосфатів кальцію та розробці на їх основі оптимальних технологічних параметрів промислового одержання.

На першому етапі досліджень методом потенціометричного титрування були визначені константи дисоціації фосфорної кислоти для іонної сили розчинів 0,5–1,0. Наприклад, для розчинів з іонною силою 1,0 (в якості фонового електроліту використовували KCl) були встановлені наступні значення концентраційних констант дисоціації фосфорної кислоти ($t = 19\text{ }^{\circ}\text{C}$): $K_1 = 0,13$, $K_2 = 1,1 \cdot 10^{-9}$ та $K_3 = 7,94 \cdot 10^{-11}$. На основі отриманих даних були розраховані діаграми розподілу іонних форм фосфорної кислоти та визначені інтервали рН, що відповідають домінантному вмісту у розчинах іонів H_2PO_4^- , HPO_4^{2-} та PO_4^{3-} .

На наступному етапі досліджень були проведені дослідження з синтезу солей $\text{Ca}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2$, CaHPO_4 та $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$. Термодинамічні розрахунки показали, що дигідрофосфат кальцію $\text{Ca}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2$ слід осаджувати при $\text{pH} \leq 3$, гідрофосфат кальцію CaHPO_4 при $\text{pH} = 4\text{--}9$, а фосфат кальцію $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ при $\text{pH} > 10$. Відповідно до цих рекомендацій були проведені синтези. Спочатку змішували розчини кальцію хлориду і фосфорної кислоти у співвідношенні $\text{Ca}^{2+}:\text{PO}_4^{3-} = 3:2$ або $1:2$, додавали калію хлорид до іонної сили розчину 5 та шляхом додавання по краплям NH_4OH при постійному перемішуванні змінювали рН, чим ініціювали осадження фосфатів кальцію. Після чого, для одержання кристалічних осадів, отриманні суспензії переносили в реактор високого тиску і витримували при температурі $250\text{ }^{\circ}\text{C}$ протягом 5 годин. Далі фільтрували і сушили в сушильній шафі при $100\text{ }^{\circ}\text{C}$. Фазовий склад таких осадів досліджували методом РФА.

Аналіз дифрактограм показав, що основною формою осаду, що одержано при рН 4–10, є фаза CaHPO_4 , при рН 3 – фаза $\text{Ca}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2$. Відсутність фази $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ в осаді, який осаджували при рН 10, можливо пояснити тим, що розрахунки розчинності проведені для нульової іонної сили та для кімнатних температур [1], в той час як синтез проводили при $100\text{ }^{\circ}\text{C}$. Тому в подальших дослідженнях необхідно концентраційні константи фосфорної кислоти, добуток розчинності осадів фосфатів кальцію та вивчити вплив на їх значення температури.

Таким чином, у результаті проведених експериментів встановлені оптимальні умови осадження фосфатів кальцію, які можна рекомендувати для промислового використання.

Література

1. Малахова, К. В. Одержання фосфатних харчових добавок / К. В. Малахова, Е. К. Меджидова, Н. В. Ніколенко // Хімія, біо- та нанотехнології, екологія та економіка у харчовій та косметичній промисловості: зб. тез - Харків, 2017. – С. 124-127.

ДОСЛІДЖЕННЯ ФАКТОРІВ, ЩО МАЮТЬ ВПЛИВ НА ПРОЦЕС МОДИФІКАЦІЇ КРОХМАЛІВ

Миргородська В. Д., Должиков С. С., Авдієнко Т. М., Ніколенко М. В.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»

avdienkotn@gmail.com

В наш час випуск якісних продуктів харчування важко уявити без використання різноманітних харчових добавок, важливе місце серед яких посідають різні модифіковані крохмалі. Крохмаль – представник природних рослинних полісахаридів, який є одним з важливих компонентів харчування для людського організму.

Нативний крохмаль являє собою природний рослинний полімер, що складається з двох складових частин – амілози та амілопектину. Цей вуглевод активно використовується як компонент багатьох технологічних добавок та БАДів. Крім того, у багатокомпонентних системах крохмаль здатний взаємодіяти з ліпідами, цукрами та ферментами, посилювати дію ароматизаторів, регулювати вологість готового продукту.

Модифіковані крохмалі мають змінені (задані) властивості: розчинність у холодній воді, в'язкість клейстеру, прозорість водного розчину, здатність до кристалізації та ін.. Модифікація крохмалів відбувається за допомогою фізичних, хімічних, фізико-хімічних, біологічних факторів. Наприклад, хімічно модифікований крохмаль має меншу в'язкість водного розчину (клейстеру), більш стійкий до процесів заморожування або розморожування, має більші розміри крохмального зерна. Умови модифікування крохмалю та реагенти підбирають таким чином, щоб отримати крохмаль з певними властивостями. Це дає змогу швидко та дешево отримати необхідний компонент для харчової промисловості. Проте, в наш час отримання модифікованих крохмалів з вітчизняної продукції відбувається в незначних кількостях. Більша частина модифікованого крохмалю імпортується з інших країн. Очевидно, це пов'язано з відсутністю методик отримання різних модифікованих крохмалів.

Процес модифікування крохмалю не є складним багатостадійним процесом. Проте, досконало не вивчено всіх механізмів, що протікають з нативним крохмалем під час модифікації. Важливе значення має вивчення властивостей крохмалю під час процесу клейстероутворення – розчинення крохмалю у воді з отриманням в'язкого мутного розчину.

В якості об'єктів дослідження використовували три види крохмалю: крохмаль зі звичайної кукурудзи, крохмаль із восковидної кукурудзи та картопляний крохмаль. Клейстеризації цих крохмалів різняться між собою наступними параметрами: температурою, тривалістю процесу, в'язкістю. Важливо було визначити фактори від яких залежить температура клейстеризації для картопляного та кукурудзяного крохмалю. Були отримані калібрувальні графіки для визначення вмісту амілози у водному розчині крохмалю, що утворюється під час процесу клейстеризації.

Отримані також результати по вивченню впливу ортофосфорної кислоти на процес хімічної модифікації крохмалю зі звичайної та восковидної кукурудзи. Встановлено оптимальну температуру протікання модифікації – 40–45 °С, час обробки – 1 година. Визначено кінематичну в'язкість отриманих водних розчинів.

Перспективним також є дослідження властивостей клейстерів з інших видів крохмалю –горохового, соєвого та ін.. Для отримання точних даних про кількісні та якісні складові крохмальних клейстерів необхідно визначати масові концентрації речовин, що отримуються в процесі клейстеризації. Таким чином, вивчення властивостей процесу клейстеризації, для створення сучасних вискоефективних технологій отримання модифікованих крохмалів, залишається актуальною проблемою для вітчизняної харчової промисловості.

РАЗРАБОТКА СОСТАВОВ КЕРАМИЧЕСКИХ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ЭЛЕКТРОИЗОЛЯЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Мисюк В. С., Попов Р. Ю., Дятлова Е. М.

Белорусский государственный технологический университет
vika.kiseleva.1995@mail.ru

Целью настоящей научно-исследовательской работы является разработка составов масс керамических высокотемпературных электроизоляционных изделий, обладающих высокими значениями удельного объемного сопротивления при нагревании, нулевым водопоглощением, низкими значениями температурного коэффициента линейного расширения, высокой химической устойчивостью.

Для получения подобных материалов изучена широкая область системы $\text{Al}_2\text{O}_3\text{--SiO}_2$ с высоким содержанием Al_2O_3 . В работе предполагалось использование минерализаторов в виде CaF_2 , а также оксидов MgO , SrO , BaO , B_2O_3 . В качестве сырьевых материалов для изготовления опытных образцов использовались: глина «Веско-Гранитик», технический глинозём, карбонат бария, карбонат стронция, карбонат магния, борная кислота и фтористый кальций.

Исследования проводились на основе двух серий составов. Для первой серии в качестве компонентов использовали глину «Веско-Гранитик», технический глинозём, карбонат магния, фтористый кальций, борную кислоту. Синтез образцов первой серии осуществлялся до температуры 1350 °С. Было установлено, что при использовании указанных сырьевых материалов при данной температуре обжига не достигается необходимый уровень физико-технических характеристик. В связи с этим, было предложено использовать другие минерализаторы, а также несколько повысить температуру синтеза. Во второй серии образцы включали в качестве минерализаторов карбонат стронция и бария, а температура обжига составляла 1375 °С.

При сравнительном анализе образцов двух серий, обожженных при одинаковых температурах (1325 и 1350 °С), установлено значительное снижение водопоглощения. Минимальный показатель водопоглощения образцов керамики достигался при использовании комплекса добавок SrO , CaF_2 и BaCO_3 и приближался практически к нулю (0,08 %).

Анализируя данные, полученные при определении удельного объемного электрического сопротивления образцов, можно сделать выводы: что сохраняется зависимость удельного объемного сопротивления от температуры обжига, значения данного показателя примерно одинаковые и достаточно высокие для образцов всех исследуемых составов. Образец, в котором отсутствует оксид стронция, обладает меньшими значениями сопротивления практически на порядок. Значения указанного показателя находятся в интервале от $0,2 \cdot 10^{11}$ до $1,3 \cdot 10^8$ Ом·м, при температуре нагрева от 300 до 500 °С соответственно.

Дилатометрические исследования показали, что ТКЛР керамики находится в пределах допустимых значений, соответствующих требованиям, предъявляемым к высокотемпературным керамическим изоляторам и составляют $5,8 \cdot 10^{-6}$ К⁻¹ (при температуре 300 °С). Исследования поверхности излома образцов с помощью оптической микроскопии свидетельствует об однородности текстуры и позволяют идентифицировать в объеме образцов кристаллы кварца. Данные рентгенофазового анализа позволили установить, что в керамике присутствуют преимущественно α-корунд и в незначительном количестве муллит. По результатам исследований установлено, что совместное ведение комплекса минерализаторов таких как SrO , CaF_2 и BaCO_3 снижает водопоглощение, практически до нуля при температуре синтеза 1350 °С, синтезированные материалы имеют довольно высокие значения электросопротивления ($0,8 \cdot 10^{11}$ при 300 °С и $0,2 \cdot 10^7$ Ом·м при 500 °С), что сравнимо со значениями электрофарфора ($5\text{--}7 \cdot 10^{11}\text{--}10^{12}$ Ом·м) и допустимые показатели температурного коэффициента линейного расширения.

**РОЗРОБКА ПЛАНУ ПРОМИСЛОВИХ ДОСЛІДЖЕНЬ ВПЛИВУ
ТЕХНОЛОГІЧНИХ ФАКТОРІВ НА ЯКІСТЬ КОКСУ
ПРИ ВЕЛИКИХ ПЕРІОДАХ КОКСУВАННЯ**

Мищенко В. П., Збиковський О. І.

Донецький національний технічний університет
oleksandr.zbykovskyi@donntu.edu.ua

В якості об'єкту досліджень були вибрані 2 батареї коксових печей: з середньою шириною камер 407 мм (корисні довжина 12280 мм, висота 4000 мм, об'єм 20 м³) і 480 мм (корисні довжина 11360 мм, висота 4000 мм, об'єм 21,8 м³). Такий вибір пояснюється наступним: більшість коксових батарей в Україні мають печі з середньою шириною 407 мм або близькою до неї; 480 мм – це найбільша середня ширина коксових печей в Україні. Коксові печі цих батарей мають однакову висоту і незначно відрізняються по довжині, що створює умови для отримання достовірних результатів при порівнянні температурних умов коксування в них.

Дослідження повинні бути проведені в печах з середньою шириною 407 мм при трьох періодах коксування 20, 25 і 30 г, а в печах з середньою шириною 480 мм – при середньому за тривалістю періоді 25 г. Таким чином, забезпечується варіювання періоду коксування в широких межах (зростання на 50 % від 20 до 30 г), а однакові періоди коксування (25 г) у вузьких (407 мм) і широких (480 мм) печах дозволять порівняти температурні умови коксування в них.

В промислових печах повинна коксуватися вугільна шихта такого ж складу, як і шихта нульового рівня в лабораторному планованому експерименті. Це дозволить порівняти результати лабораторних і промислових коксувань. Також при періоді коксування 25 г повинна бути прококована шихта з підвищеним вмістом газового вугілля (60 %), склад якої відповідає верхньому рівню варіювання в лабораторному експерименті. Це дозволить дослідити вплив великого вмісту газового вугілля на якість коксу при великих періодах коксування.

Для кожного періоду коксування і для кожного варіанту вугільної шихти необхідно провести два паралельних коксування з метою отримання достовірних результатів. Коксування повинні проводитись тільки в печах з добре відрегульованим теплотехнічним режимом. Під час експерименту необхідно виконувати всі передбачені Правилами технічної експлуатації коксохімічних підприємств операції по контролю і регулюванню теплового і гідравлічного режиму батарей коксових печей.

Температурні умови коксування будуть контролюватися по ширині вугільної заправки за допомогою термопар на протязі всього періоду коксування.

Перед кожним коксування потрібно відібрати проби вугільної шихти, що завантажуються в коксові печі, для визначення показників технічного аналізу, пластометричних характеристик і помелу шихти.

Після кожного коксування повинні відбиратися проби коксу для визначення його гранулометричного складу, показників міцності в промисловому барабані М₁₀ і М₂₅, реакційної здатності, структурної міцності за Грязновим, питомого електроопору і показників технічного аналізу, а також повномірні куски коксу з коксової рампі. Повномірні куски мають бути розрізані на три рівні частини по довжині і потім досліджені для визначення відмінностей властивостей і структури готового коксу по ширині камери коксування.

Реалізація цього плану промислових досліджень, аналіз і порівняння отриманих результатів з результатами лабораторних досліджень дозволить вирішити задачу дослідження впливу технологічних факторів на якість коксу при великих періодах коксування.

**ВИКОРИСТАННЯ ФЕРОСИЛІЦІУ В ТЕХНОЛОГІЇ ВИГОТОВЛЕННЯ
ГАЗОБЕТОНІВ**

Мусіна А. О., Осипова М. О., Сігунов О. О., Кравченко Т. В.
ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»
musinka.alinka19@ukr.net

В теперішній час в умовах української енергетичної кризи існує потреба в якісних і відносно дешевих теплоізоляційних матеріалах, використання яких дозволить зберегти теплову енергію в житлових і промислових спорудах. В якості ефективного теплоізоляційного матеріалу можна розглядати ніздрюваті бетони, що мають високий показник теплозахисної властивості, а також малу об'ємну вагу. Використання таких матеріалів конструкційної або конструкційно-теплоізоляційної групи сприяє зниженню ваги будівель, так як вони в 3–5 разів легше цегляних будівель, а їх вартість на 10–40 % нижча. Такі ніздрюваті бетони мають відносно високу міцність, що дозволяє застосовувати їх також в легких огорожувальних конструкціях.

Метою даної науково-дослідницької роботи є встановлення можливості застосування в технології виробництва газобетонних виробів феросиліцію (FeSi_2) з одночасним підбором оптимальних технологічних параметрів виробництва.

При виконанні дослідницької роботи в якості сировинних матеріалів використовували портландцементний клінкер заводу ВАТ «Івано-Франківськ Цемент», гіпсовий камінь Артемівського родовища, вапно ВАТ «Дніпровський завод будівельних матеріалів», річковий пісок, феросиліцій та ідкий натрій.

Проведення досліджень пов'язаних з розробкою складів композицій комірною бетону проводилися з використанням симплекс-градчастого планування експерименту. Склади композицій газобетонів відповідно до вказаного плану містили, мас. %: цемент – $31 \div 39$, пісок – $50 \div 58$, вапно – $7 \div 15$.

Під час досліджень було розроблено композиції з застосуванням FeSi_2 в кількості 2, 3, 4, 5 мас. % від маси цементної складової. При формуванні зразків застосовували водотверде співвідношення для всіх композицій, яке складало 65 % від маси цементу. Для встановлення впливу температури на процес газовиділення було використано воду замішування з температурою 35, 45 і 55 °C.

Аналіз результатів показав, що щільність отриманого газобетону на основі феросиліцію з температурою затворення води 35 і 45 °C дозволяє віднести його до конструкційного типу ($0,9\text{--}1,06 \text{ г/см}^3$). Склади, які були заформовані з температурою 55 °C можна віднести до конструкційно-теплоізоляційного типу ($0,6\text{--}0,9 \text{ г/см}^3$).

Наступна стадія досліджень була спрямована на встановлення найбільш раціонального вмісту феросиліцію, як газоутворювача. Для цього були збудовані залежності фізико-механічних властивостей газобетонів від кількості феросиліцію. Результати досліджень показали, що спостерігається зменшення щільності композицій для складу №2 на 5–46 %, для складу №5 на 7–16 % та для складу №6 на 8–27 %, в ряду від 2 % вмісту феросиліцію до 5 %. Також спостерігається зменшення межі міцності зразків композицій в ряду від 2 % до 5 % вмісту феросиліцію для складу №2 на 20–84 %, для складу №5 на 55–83 % та для складу №6 на 28–70 %.

Необхідно зазначити, що збільшення вмісту FeSi_2 до 5 мас. %, за характеристикою щільності, дає можливість перевести композиції з виду конструкційних в теплоізоляційно-конструкційні.

Таким чином, рекомендується саме 5 % вміст феросиліцію та температура води замішування 55 °C, але для підвищення показника міцності при підвищеній поризації виробів, необхідно дослідити твердіння виробів при пропарюванні і в автоклавних умовах.

ЗАЩИТНО-УПРОЧНЯЮЩИЕ ПОКРЫТИЯ ДЛЯ ФУТЕРОВКИ ТЕПЛОВЫХ АГРЕГАТОВ, ПОЛУЧЕННЫЕ МЕТОДОМ СВС*Мухлядо В. И., Попов Р. Ю.*УО «Белорусский государственный технологический университет»
rospopov@mail.ru

Огнеупорные покрытия, получаемые в режиме самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС), предназначены для защиты от коррозионного и термического воздействия футеровочных огнеупорных материалов. Известно, что СВС-синтез позволяет обеспечить формирование кристаллических фаз с высокой огнеупорностью и получить изделия с требуемыми эксплуатационными характеристиками. В настоящей работе для проведения СВС-синтеза использовались только экзотермические смеси, в основе которых лежала композиция сырьевых материалов системы R_2O (RO) – Al_2O_3 – SiO_2 .

Для приготовления экспериментальных композиций использовались следующие сырьевые материалы: алюминиевая пудра, легкоплавкая глина месторождения «Лукомль-1» (РБ), натрий кремнефтористый, оксид железа (III), электрокорунд, природный каолин месторождения «Присяновский» (Украина), гранитоидные отсеvy (Микашевичский ГОК, РБ), нефелин-сиенит (РФ), бутылочный стеклобой.

Сырьевые смеси готовились путём смешения в сухом виде исходных сырьевых компонентов, предварительно взвешенных на весах согласно рецептуре. В подготовленную массу добавляют связующее, в качестве которого использовалось жидкое стекло. Полученная суспензия с влажностью 30–35 % кистью наносилась на поверхность образцов шамотных огнеупоров. Толщина нанесенного покрытия составляла 1–2 мм.

После сушки в естественных условиях полученные покрытия подвергались обжигу в электрической муфельной печи при различных температурах. Скорость подъема температуры составляла 150–200 °С/ч.

Образцы оптимального состава, обожженные при температуре 1150 °С, характеризовались следующим набором физико-технических свойств: водопоглощение – 16,0 %; открытая пористость – 21,0 %; кажущаяся плотность – 1348 кг/м³; твердость по шкале Мооса 8, теплопроводность ($T = 200$ °С) составляла 0,400–0,548 Вт/м·°С.

Анализ данных рентгенофазового исследования большинства образцов исследуемых составов свидетельствует о том, что основными кристаллическими фазами покрытий являются α -кварц или его разновидности, корунд, гематит, а также целый ряд твердых растворов криптокристаллической структуры (алюмосиликаты кальция и натрия) по своему химическому составу близкому к плагиоклазу.

Исследование покрытий с помощью электронной сканирующей микроскопии позволило установить на некоторых участках покрытий четкие формы кристаллической составляющей размером 25–40 мкм, что, по нашему мнению, может быть идентифицировано как тридимит – полиморфной разновидности кварца с достаточным характерным габитусом кристалла. Наличие такой составляющей положительно влияет на термомеханические свойства покрытий – улучшается механическая прочность, огнеупорность и температура начала деформации под нагрузкой.

На основании проведенных исследований можно сделать вывод о достаточно приемлемых показателях эксплуатационных свойств синтезированного покрытия, высокой технологичности его получения, что в итоге позволит существенным образом сократить срок ремонта и обслуживания тепловых агрегатов, а также продлить время их эксплуатации.

ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕХНОЛОГІЇ УТИЛІЗАЦІЇ КАЛЬЦІЄВМІСНИХ ШЛАМІВ З ПЕРСПЕКТИВОЮ ОДЕРЖАННЯ БІОМІНЕРАЛЬНОГО ДОБРИВА

Мягка Ю. О., Волошин М. Д.

Дніпровський державний технічний університет
voloshin@ua.fm

При виробництві кальцієвої селітри утворюється велика кількість шламу, який є побічним продуктом виробництва. Основною властивістю кальцієвмісного шламу, як меліоруючої добавки, є здатність вирівнювати початкову рН суміші до потрібного показника, що стає в нагоді при виробництві комплексного добрива для використання на кислих ґрунтах. В той же час, нагальною проблемою є утилізація активного мулу водоочисних споруд. Вітчизняний і закордонний досвід використання активного мулу свідчить про перспективність способу його утилізації у якості добрива. Шлами хімводопідготовки ТЕС складаються переважно із сполук загального азоту та фосфору. Диспергування активного мулу та шламу сприяє вилученню фосфатів, що є шкідливим компонентом активного мулу.

Метою роботи є створення методики утилізації кальцієвмісних шламів з перспективою одержання біомінерального добрива. Передбачається, що додавання кальцієвмісного шламу до зароджуваної суміші промислово-побутових відходів збільшить вихід біогазу та дасть змогу використати зароджуваний осад, як самостійне комплексне добриво.

Дослідили вплив додавання кальцієвмісного шламу цеху РКС підприємства ПрАТ «Хімдивізіон» у концентраціях 30, 41, 47, 57 % від сухої маси спільного завантаження із додаванням активного мулу, та ущільненого активного мулу із додаванням кальцієвмісного шламу ТЕС, концентраціями 0,023 та 0,0194 % на суху масу завантаження. В дослідженні використовували лабораторну установку бродіння промислово-побутових відходів, що складалась з приймальної ємності, біореактора, ємності для бродіння, ємності длябору біогазу. Параметри процесу:(після їх механічної обробки фрезерною мішалкою): швидкість обертання ротора мішалки 7 об/с, частота коливання рідини 230 с^{-1} , критерій Рейнольдса $3,99 \times 10^4$, тривалість перемішування 1хв.

Процес бродіння проходив з різною швидкістю виділення біогазу для кожної з шести проб. Для шламу РКС спостерігалось максимальне виділення біогазу з 1 кг сухої речовини на 5–7 добу, а для шламу ТЕС – на 7–9 добу. Кількість виділеного біогазу на кінець 16 доби для кожної з проб зображено у таблиці.

Таблиця. Сумарна кількість біогазу для шламів ТЕС та РКС

Походження шламу, % на сухе завантаження	ТЕС 0,023	ТЕС 0,0194	РКС 30	РКС 41	РКС 47	РКС 57
Сумарна кількість біогазу, $\text{дм}^3/16\text{ діб}$	1, 972	1,194	0,659	0,670	0,535	0,585

Встановлено, що введення процесу метанового бродіння побутових відходів в мезофільному режимі з додаванням кальцієвмісного шламу ТЕС 0,0194–0,023 % та 4,27–4,94 % активного мулу на суху речовину збільшує вихід біогазу у 2,2–3,7 разів, порівнянно із зброджуваною сумішшю промислово-побутових відходів із шламом РКС без додавання активного мулу, але склад біомінерального добрива на виході по своїм показникам більш якісне у пробах із кальцієвмісними шламами РКС.

КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКИХ ПОКРЫТИЙ СПЛАВАМИ D⁴⁻⁸ МЕТАЛЛОВ

Ненаскина Т. А.², Сахненко Н. Д.¹, Ведь М. В.¹

¹Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт»

²Харьковский национальный автомобильно-дорожный университет

nenastina@ukr.net

Создание полифункциональных материалов с максимально высоким уровнем заданных свойств остается первоочередной задачей для технологов и материаловедов. В этой связи возрастает значение технологий электрохимического синтеза, поскольку он, по сравнению с металлургическим способом получения материалов и физическим нанесением, имеет ряд преимуществ.

Некоторые покрытия, в том числе – сплавами, возможно получить только электрохимическим способом, так как другие пути их нанесения являются менее экономически выгодными или эффективными. Особенно это актуально для покрытий сплавами, одним из компонентов которых является тугоплавкие элементы, такие как вольфрам или молибден. Наконец, гальванические сплавы обладают рядом преимуществ по сравнению с покрытиями индивидуальными металлами, поскольку при обоснованной селекции компонентов достигается эффект улучшения свойств сплава по относительно исходных компонентов.

Известно, что сплавы кобальта нашли широкое промышленное применение для решения задач электрокатализа, поэтому было проведено тестирование каталитической активности тройного сплава Co-Mo-W в модельной реакции выделения водорода путем сопоставления известных кинетических параметров указанной реакции при использовании в качестве электродных материалов словообразующих элементов и платины, на которых реакция протекает с наименьшим перенапряжением (η).

Каталитическую активность синтезированных покрытий сплавом Co-Mo-W тестировали в реакции электролитического выделения водорода в кислой, нейтральной и щелочных средах.

Было установлено, что зависимость $\lg j_H^0 = f(\omega)$ где ω – общее содержание тугоплавких компонентов в сплаве, носит экстремальный характер. Отметим, что наиболее высокие значения плотности тока обмена получены в кислой среде (pH 3), тогда как в щелочной и нейтральной скорость снижается более чем на порядок величины. Для покрытий состава ω (Mo + W) общ ~ 30 % масс. значения j_H^0 даже несколько превышают уровень платинового электрода, что несомненно отражает синергетический характер электрокаталитических свойств сплава и должен стать предметом дальнейших исследований. Полученные экспериментальным путем значения констант а и b дают возможность предоставить уравнения Тафеля ($\eta = a + b \lg j$), описывающих перенапряжение выделения водорода, в форме эмпирических соотношений (табл.), которые отражают влияние соотношения сплавовобразующих компонентов на торможение / ускорение электродной реакции.

Таблица. Эмпирические уравнения перенапряжения выделения водорода в щелочной среде

Состав сплава, масс. %			Эмпирические уравнения перенапряжения выделения водорода
Co	Mo	W	
74,3	10,6	15,1	$\eta = 0,609 + 0,167 \lg j$
70,1	16,1	13,8	$\eta = 0,682 + 0,15 \lg j$
68,3	18,8	12,9	$\eta = 0,691 + 0,159 \lg j$

ТЕХНОЛОГІЯ ОТРИМАННЯ МАРМУРУ ІЗ БЕТОНУ*Омельченко С. О., Пономарьов М. М., Каулін В. Ю.*

Донецький національний технічний університет

sveta1995omelchenko@gmail.com

Технологія «мармур із бетону» дуже проста, вона вбирає в себе краще від двійчастих форм і вібролиття та дозволяє на звичайній сировині (пісок, цемент, пластифікатор, пігменти) і стандартному оснащенні (бетонозмішувач, віброплощадка) виготовляти облицювальні плити, за своїм зовнішнім виглядом і фізико-механічними характеристиками відповідні мармуру.

Ще зо два десятки років тому була поставлена задача розширити сферу застосування декоративного бетону шляхом досягнення фізико-механічних характеристик і зовнішнього вигляду, як у природного мармуру. Для вирішення цього завдання необхідно було знайти відповідь на мінімум два основних питання. Перший з них полягав у тому, як створити щільну глянсову поверхню, яка традиційно досягається методом полірування природного каменю.

По-друге, треба було з мінімальними витратами, не вдаючись до використання полімерів, дорогих компонентів, термічної і механічної обробки, на рядових цементях досягти міцності дрібнозернистого бетону на стиск 100 МПа і на розтяг при згині – більше 10 МПа.

У технології «мармур із бетону» застосовують пластичну бетонну масу з мінімальним водо-цементним відношенням 0,2. Це дозволяє отримати щільний надміцний бетон, ідентичний за структурою з мармуром. Сировиною для виготовлення продукції «мармур із бетону» є річний пісок, вода, портландцемент М500 або високоглиноземистий вогнетривкий цемент GORKAL-70, лігносульфонат та пігменти.

Дослідивши вже існуючі методи, в даній роботі описана нова рецептура отримання вище згаданих зразків. Метою було замінити основний компонент, що надає великої міцності матеріалу – пластифікатор С-3. За своїми фізико-хімічними та механічними показниками лігносульфонат набагато кращий за раніше використовуваний пластифікатор С-3, він також є економічно вигіднішим і, що найважливіше, ЛСТ витрачається менше за інші розповсюджені пластифікатори.

Лігносульфонати технічні представляють собою природні водорозчинні сульфопохідні лігніну. Це суміш різних солей (в основному натрієвих) лігносульфонових кислот із значними домішками редуруючих і мінеральних речовин. Бувають рідкої і порошкоподібної форми. Рідкі – однорідна в'язка рідина темно-коричневого кольору, порошкоподібні – порошок від світло-коричневого до темно-коричневого кольору. В'язкість розчинів лігносульфонатів залежить від природи катіона і температури, причому сильне зниження в'язкості спостерігається при 20–40 °С. Концентрований розчин лігносульфонатів при 100–120 °С – дуже в'язкий малорухливий продукт, при 20 °С – твердий моноліт.

Лігносульфонати застосовують:

- в якості пластифікатору бетону та цементу;
- в якості розріджувача цементно-сировинного шламу при виробництві цементу мокрим способом для зниження вологості шламу;
- в якості пластифікатору матеріалу у виробництві гіпсокартонних листів, фанери, деревно-стружкових і деревно-волокнистих плит;

У ході досліджень було отримано оптимальний (з економічної та фізико-механічної сторони) склад вихідної суміші для виготовлення «мармуру з бетону»: пісок – 67 %, портландцемент М400 – 33 %, ЛСТ – 0,8 % від маси цементу, вода – 10 % від загальної маси.

ВПЛИВ ДОМІШОК АЛЮМОСИЛІКАТУ НА РЕЗИСТИВНІ ТА ТЕПЛОВІ ВЛАСТИВОСТІ ЕЛЕКТРОХІМІЧНОЇ СИСТЕМИ Fe-Fe₃O₄-C-NaOH

Пантелеймонов Р. А.¹, Кравченко О. В.², Першина К. Д.²

¹Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського

²Міжвідомче відділення електрохімічної енергетики НАН України

radik20031@gmail.com

Сучасний розвиток енергетики ставить завдання створення ефективних і недорогих систем перетворення енергії, зокрема елементів резистивного нагрівання. В якості елементів резистивного нагрівання використовувались елементи в габаритах 2016, які складаються із катода складу Fe-Fe₃O₄, графітового аноді і 5 М розчину NaOH з добавками і без добавок алюмосилікату в якості електроліту (табл.). Ступень розігріву елементів вимірювали за допомогою електронного контактного термометра ТР300 в замкненому ланцюгу, що був підключений до первинного джерела струму з напругою 1,5 В.

Таблиця. Склад і напруга розімкненого ланцюга (НРЛ) досліджених систем

№	Система	маса Fe, г	НРЛ, В	T _{макс} , °C
1	Fe-Fe ₃ O ₄ -C-NaOH + алюмосилікат	0,106	0,149	49,8
2	Fe-Fe ₃ O ₄ -C-NaOH	0,1492	0,25	67,7
3	Fe-Fe ₃ O ₄ -C-NaOH	0,1586	0,59	50,7

Аналіз значень НРЛ та кінетичних залежностей розігріву (рис.) встановив, що введення у склад електроліту алюмосилікату значно знижує значення НРЛ, швидкість та максимальну температуру розігріву (табл.), що пов'язано з високою в'язкістю розчину електроліту з домішками алюмосилікату, а також з великим значенням питомого теплового опору. Таким чином, домішки алюмосилікату в електроліт для елементів резистивної системи не доцільними для підвищення температурних та електричних характеристик системи Fe-Fe₃O₄-C-NaOH.

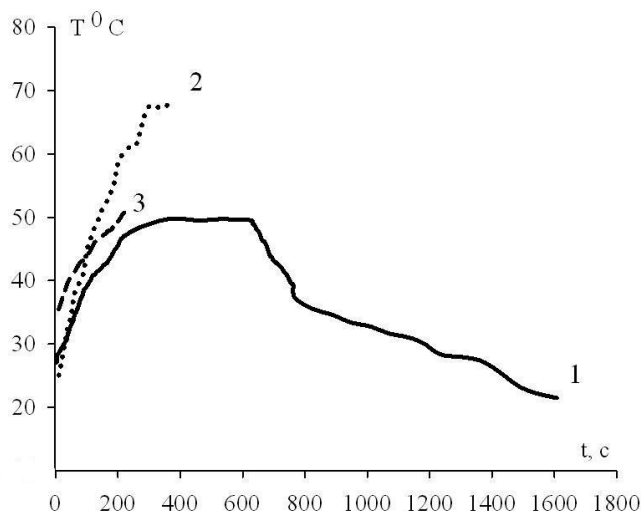


Рис. Кінетичні криві зміни температури систем Fe-Fe₃O₄-C-NaOH

ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ СТРУКТУРИ ПОРИСТИХ СКЛОКРИСТАЛІЧНИХ МАТЕРІАЛІВ (ПСКМ) НА ГЛИБИНУ ЇХ ПРОСОЧУВАННЯ ВОДНИМ РОЗЧИНОМ

Петух С. І., Чабан О. О., Кольцова Я. І.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»
petsvetiv@gmail.com

На сьогоднішній день піноскло, завдяки ефективному поєднанню теплоізоляційних властивостей з екологічністю та необмеженим терміном експлуатації, є найбільш перспективним матеріалом, що використовується для теплоізоляції будинків та споруд. Але порівняно низька міцність (на рівні 0,62–0,70 МПа) обмежує його застосування в якості окремого теплоізоляційно-конструкційного матеріалу. Актуальними є дослідження, спрямовані на розробку шляхів підвищення міцності таких пористих скломатеріалів.

Для вирішення даної проблеми нами в якості газоутворюючих добавок при виробництві пористих матеріалів пропонується використовувати промислові відходи і недефіцитну природну сировину, які в умовах низькотемпературного синтезу сприяють формуванню у міжпорових перегородках кристалічних фаз певної будови та просторової орієнтації, забезпечуючи тим самим підвищення їх механічної міцності. Підвищення міцностних властивостей також можливе за рахунок просочування ПСКМ різними органічними речовинами, які після додаткової термообробки зміцнюють структуру пористого матеріалу.

Метою данної роботи була оцінка можливості просочування ПСКМ різними розчинами. В якості просочувальної речовини використовували водний розчин чорнил.

Для проведення досліджень нами були отримані ПСКМ на основі бою листового скла з використанням в якості газоутворювачів як природної (суглинок), так і техногенної (металургійні шлаки) сировини в кількості від 5 до 20 мас.%. Так як структура зразків впливає на можливість та глибину просочування, нами були обрані зразки з дрібнопористою (розмір пор 0,5–1 мм), середньопористою (розмір пор 1–3 мм) та крупнопористою (розмір пор >3 мм) структурою. Просочували зразки на установці, що складається з парогенератора, пароперегрівача та камери просочення. Дослідний зразок розташовували у камері просочування та прогрівали до температури 105–110 °С, куди за допомогою парогенератора через перегрівач подавали перегріту водяну пару з температурою 120–140 °С. Час продування перегрітою парою складав 10 хв., надлишок пари виходив у атмосферу. Після продування у просочувальну камеру заливали чорнила та просочували на протязі 10 хв., після чого надлишок чорнил зливали.

За результатами проведених досліджень було встановлено, що при використанні зразків ПСКМ з дрібнопористою структурою, незалежно від типу газоутворювача, глибина просочування становила 3 мм, із середньопористою структурою – 5 мм, а з крупнопористою структурою – 10 мм. Таки чином, встановлено, що тип газоутворювача не впливає на глибину просочування. Проте глибина просочування залежить від структури матеріалу та збільшується при збільшенні розміру пор.

**ИССЛЕДОВАНИЯ Co-Cr КАТАЛИЗАТОРОВ НАНЕСЕННОГО ТИПА,
ПОЛУЧЕННЫХ С ПРИМЕНЕНИЕМ КЕРАМИЧЕСКИХ НОСИТЕЛЕЙ**

Привалова Г. С., Авина С. И., Лобойко А. Я., Бутенко А. Н.

Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт»
galyaboxx@gmail.com

В схемах агрегатов производств неконцентрированной азотной кислоты каталитическое окисление аммиака до оксида азота (II) осуществляется на платиноидном катализаторе. Чрезвычайно высокая стоимость каталитических систем на основе металлов платиновой группы обуславливает актуальность разработки катализаторов, не содержащих драгоценные металлы. Частичная или полная замена на такие катализаторы позволит значительно повысить экономическую целесообразность данного процесса.

Условия эксплуатации катализаторов в реакторах окисления аммиака до оксида азота (II) диктуют повышенные требования к их характеристикам. Они должны обладать достаточной механической прочностью, термостойкостью, высокой и стабильной активностью, низким гидравлическим сопротивлением. В связи с этим наибольший интерес представляют катализаторы нанесенного типа. В качестве активной составляющей катализатора была выбрана кобальт-хромовая система, которая по своим каталитическим свойствам близка к катализаторам на основе металлов платиновой группы.

Для приготовления катализаторов применяли керамические носители, используемые в производстве катализаторов конверсии природного газа с водяным паром НИАП-18 и НИАП-03-01. Катализаторы готовили пропиткой носителей в водном растворе, в состав которого входят азотнокислые соли кобальта и хрома, с последующими стадиями сушки и прокаливания. Наибольшую активность в процессе окисления аммиака до оксида азота (II) проявляют кобальт-хромовые системы с соотношением $\text{Co}_3\text{O}_4/\text{Cr}_2\text{O}_3 = 3 \div 4$.

Изучено влияние условий пропитки на суммарное содержание активных компонентов и механическую прочность образцов. С увеличением температуры и времени пропитки суммарная концентрация оксидов кобальта и хрома незначительно повышается.

В свою очередь при увеличении времени и температуры происходит некоторое снижение прочности полученных катализаторов. Изменение прочности обусловлено, по нашему мнению, воздействием агрессивной среды пропиточного раствора, влияние которого усиливается с увеличением температуры и продолжительности нахождения носителей в растворе.

С увеличением числа пропиток возрастает суммарная концентрация активных компонентов, а также механическая прочность. Установлено, что чем выше в носителе степень заполнения их объёма активными компонентами, тем лучше катализатор будет противостоять упругим деформациям.

Суммарное содержание Co_3O_4 и Cr_2O_3 при $n = 4$ достигает 19,0 и 23,5 % в образцах катализатора соответственно на носителях НИАП-03-01 и НИАП-18, подобное различие обусловлено большим водопоглощением последнего.

Активность образцов катализаторов, приготовленных пропиткой носителей НИАП-18 и НИАП-03-01, исследовали на лабораторной установке проточного типа под атмосферным давлением при $T = 973\text{--}1123\text{ K}$. Содержание аммиака в азотно-воздушной смеси поддерживали на уровне 10 % об. При температуре 1073–1083 K активность полученных катализаторов находится на уровне 96–97 %.

НІТРАТНОКИСЛОТНЕ РОЗКЛАДАННЯ АЛЖИРСЬКИХ ФОСФОРИТІВ*Радченко О. В., Ларичева Л. П., Волкова А. Є.*

Дніпровський державний технічний університет

lplaricheva@gmail.com

В Україні на підприємствах, що виготовляють мінеральні добрива, в основному застосовують сульфатнокислотний метод переробки фосфоритів. Даний метод має суттєвий недолік – значні відходи у вигляді фосфогіпсу. Перспективним напрямком переробки фосфоритів є нітратнокислотне розкладання з отриманням мінеральних добрив.

Процес кислотного розкладання фосфатів має особливості в залежності від мінералогічного складу сировини. Алжирські фосфорити використовуються вітчизняними підприємствами для отримання екстракційної фосфатної кислоти та добрив. Знання оптимальних технологічних умов та особливостей здійснення процесу сприяє отриманню більш якісної продукції з найменшими матеріальними та енергетичними витратами, тому дослідження нітратнокислотного розкладання алжирських фосфоритів у залежності від технологічних параметрів є актуальними.

Кислотне розкладання фосфориту здійснювали на установці, яка складалася з термостатованого реактору ємністю 500 см³, обладнаному мішалкою. Температура процесу підтримувалася за допомогою електричного нагрівального елементу та контактного термометру. Відбір проб для аналізу здійснювався у перші 30 хвилин через кожні 5 хвилин, потім – через кожні 30 хвилин.

Експерименти проводилися при температурі 35–75 °С, концентрації нітратної кислоти 35–70 % при загальній тривалості процесу 90 хвилин.

Дослідження показали, що при збільшенні температури відбувається зростання ступеня вилучення Р₂О₅. При цьому, розкладання алжирського фосфориту нітратною кислотою у перші 30 хвилин екстракції відбувалося дуже швидко незалежно від температури. Потім процес значно уповільнювався. Оптимальною температурою нітратнокислотного розкладання фосфатів є 50–60 °С. При більш низьких температурах швидкість розкладання помітно зменшувалася, а підвищення температури більше 60 °С недоцільно із-за збільшення втрат HNO₃ за рахунок виділення оксидів азоту в газову фазу і збільшення корозійної активності середовища.

Експериментальні дані щодо залежності ступеня вилучення Р₂О₅ від концентрації нітратної кислоти при тривалості процесу 30 хвилин і температурі від 35 до 75 °С свідчать про те, що в інтервалі концентрації 35–55 % HNO₃ відбувається незначне зростання ступеню вилучення Р₂О₅ при збільшенні концентрації кислоти. При підвищенні концентрації нітратної кислоти до 60 % мас. та вище відбувалося зменшення ступеня вилучення Р₂О₅ внаслідок кристалізації фосфатів і втрати Р₂О₅ з твелою фазою. Оптимальною є концентрація нітратної кислоти 50–55 % мас. Ступінь вилучення Р₂О₅ при оптимальних технологічних умовах складала 92,45 % мас.

Нітратнокислотний витяг, що утворювався при розкладанні алжирського фосфориту нітратною кислотою при кількості останньої дещо вище стехіометричної, складався, в основному, з розчину фосфатної кислоти і нітратнокислого кальцію. При нестачі нітратної кислоти відбувалося розкладання трикальційфосфату до монокальційфосфату. Реакція алжирського фосфориту з нітратною кислотою протікає у три стадії: дифузія іонів кислоти до поверхні часток природного фосфату, взаємодія природних фосфатів з кислотою, дифузія продуктів реакції у розчин. Математична обробка та аналіз експериментальних даних показав, що головними процесами при кислотному розкладанні алжирського фосфориту є перші дві стадії. Процес одночасно протікає у дифузійній та кінетичній областях.

АНАЛІЗ ВІДПРАЦЬОВАНИХ МОТОРНИХ ОЛИВ

Рудьман Я. О., Кривуш М. С., Чумак О. А.

Національний авіаційний університет

yarudman@gmail.com

Ринок споживання моторних олив в країнах СНД і Східної Європи складає 20–25 % від загального споживання в світі. Наразі Україна споживає понад 1 млн т/рік свіжих олив, а в умовах відсутності нормативу збору, офіційно збирає близько 500 тис т/рік відпрацьованих нафтопродуктів, має реальний сировинний ресурс приблизно рівний аналогічному ресурсу Німеччини – 660 тис т/рік. Але в Україні 90 % обсягів цієї сировини скидається в навколишнє природне середовище або використовується нерационально.

При експлуатації автомобіля під впливом різних факторів олива втрачає свої первинні властивості, тобто вона старіє. Окиснення вуглеводнів оливи, накопичення в ній продуктів неповного згоряння палива, зносу деталей, води, пилу спрацьовування присадок – це основні процеси, що відбуваються при старінні оливи. Характер і швидкість старіння залежать від рівня форсування двигунів, температури деталей, якості палива і оливи, ступеня зношеності деталей і вузлів двигуна автомобіля.

Швидкість спрацьовування введених в оливу присадок залежить насамперед від наступних чинників: типу і теплонапруженості двигуна, його технічного стану, умов експлуатації, якості використовуваного палива.

В якості основних показників, що характеризують властивості працюючої оливи, слід назвати: в'язкість, лужне число, вміст нерозчинних продуктів забруднення, води та інші.

Доведено, що при роботі двигуна під дією високих температур, тиску та часу відбувається зміна фізико-хімічних показників оливи. Показано інтенсивне зростання масової частки механічних домішок, які утворюються у перші 60–120 год роботи двигуна, а потім процес стабілізується. Накопичення механічних домішок відбувається за рахунок окиснення малостабільних вуглеводнів оливи, а також притирання деталей циліндро-поршневої групи. Це призводить до заміни оливи при пробігу автомобіля 1000 км.

Проведено дослідження зміни в'язкості оливи та встановлено її інтенсивне зростання на 2,5–3,0 мм²/с у перші 60–160 год роботи двигуна, а потім відбувається стабілізація даного процесу. Це явище пояснюється випаруванням із оливи легкокиплячих малов'язких фракцій і накопиченням у ній продуктів окиснення.

При роботі двигуна знижується лужність оливи за рахунок спрацювання, вигорання та вимивання водою, розчиненою в оливі, пакету присадок.

Причинами зменшення в оливах масової частки присадок є: адсорбція їх на фільтрувальних елементах масляних фільтрів; адсорбція присадок на механічних домішках і наступне її вилучення разом із домішками системою очищення; адсорбція на поверхні деталей; витрата присадок за функціональним призначенням.

Значно впливає на вміст присадок у оливі якість її зберігання. Встановлено, що значна частина присадок не розчиняється, або мало розчиняється в оливі і складає з нею колоїдну систему, яка дуже чутлива до вологості. Обводнення оливи до 0,2 % мас. призводить до порушення стабільності колоїдної системи і випадання присадок разом із водою в осад. Показано, що через 6 годин випадає в осад понад 75 % присадок. По цій причині оливи необхідно періодично контролювати за вмістом води.

Основними показниками, що призводять до заміни оливи є: приріст її в'язкості на 25 %; зменшення лужного числа до 0,5 мг КОН/г; зниження температури спалаху понад 25 °С; вміст масової частки води в оливі понад 0,5 % та палива понад 0,8 %.

**ЗМІЦНЕННЯ ПОВЕРХНІ ЛІТІЙАЛЮМОСИЛКАТНИХ
СКЛОКРИСТАЛІЧНИХ МАТЕРІАЛІВ ШЛЯХОМ ІОННОГО ОБМІНУ**

Рябінін С. О., Саввова О. В., Воронов Г. К.

Кафедра технології кераміки, вогнетривів, скла та емалей
Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»,
вул. Кирпичова, 2, 61002, Харків, Україна
riabinin_svyatoslav@hotmail.com

Важливою проблемою сьогодення є підтримання високого рівня боєздатності військових підрозділів шляхом підвищення ефективності локального та індивідуального захисту спеціальної техніки та особового складу. Одним з напрямків підвищення бронезахисту матеріалів є розробка нових високоефективних ударостійких ситалів. Їх впровадження дозволить підвищити конкурентоспроможність вітчизняних захисних засобів на світовому ринку.

Важливим аспектом створення вказаних матеріалів є отримання склокристалічних матеріалів з підвищеною міцністю шляхом модифікування їх поверхні. Блокування та стабілізація дефектів на поверхні скломатеріалів може бути реалізована за рахунок підвищення якості поверхні, ізоляції дефектів і захисту поверхні та блокування дефектів стисненням поверхневого шару. Зміцнення поверхні склокристалічних матеріалів шляхом іонного обміну широко на практиці застосовується здебільшого для радіопрозорих виробів, які відрізняються високою вартістю та складністю технології. Встановлення можливості зміцнення захисних бронеелементів на основі склокристалічних матеріалів β -сподуменового складу за оптимальним технологічним режимом і визначає актуальність даної роботи.

Метою даної роботи є розробка оптимальних технологічних параметрів процесу іонного обміну на поверхні літійалюмосилкатних склокристалічних матеріалів.

Дослідні склокристалічні матеріали β -сподуменового складу було отримано в мовах низькотемпературної двостадійної термічної обробки (І стадія 600 °С, тривалість 2÷4 години; ІІ стадія 850 °С, тривалість 2÷4 години) за керамічною технологією шляхом шлікерного лиття характеризується ситалізованою структурою зі ступенем кристалічності 80 об. %.

Для склокристалічних матеріалів заліковування пор відбувається за механізмом в'язкої течії за рахунок забезпечення в'язкості $10^{9,1}$ Па·с в області зародкоутворення кристалів близько температури початку розм'якшення.

Скляні зразки розроблених матеріалів діаметром 15 мм та висотою 10 мм, нагрівали на у парах NaNO_3 впродовж 1 години при температурі 550 °С та на другому етапі – у парах NaNO_3 впродовж 1 години при температурі 450 °С у корундовому тиглі щільно закритому кришкою. Зменшення температури на другому етапі забезпечує зняття надлишкових напруг, які з'явилися при першому етапі.

Фізико-хімічні процеси, які забезпечують ефект зміцнення, полягають в іонному обміні іонів Li^+ на Na^+ , що супроводжується виникненням стискаючих напруг в поверхневих шарах матеріалу і блокуванням поверхневих і об'ємних дефектів на глибину до 250÷300 мкм. Отримані результати свідчать про високу ефективність зміцнення: вже на першій стадії обробки приріст міцності становить близько 10÷20 %. Найбільш ефективне зміцнення (до 30÷50 %) забезпечується при двоетапній обробці.

За результатами проведених досліджень було встановлено оптимальні параметри низькотемпературного іонообмінного зміцнення у взаємозв'язку з особливостями структури склокристалічних матеріалів β -сподуменового складу. Отримані високоміцні літійалюмосилкатні склокристалічні матеріали є перспективними при розробці вітчизняних елементів бронезахисту з високими експлуатаційними властивостями.

ДОСЛІДЖЕННЯ ФОРМУВАННЯ ЕМАЛЕВИХ ПОКРИТТІВ НА АЛЮМІНІЇ В ЗАЛЕЖНОСТІ ВІД ТОНІНИ ПОМЕЛУ СКЛА

Салей Ан. А., Голеус В. І., Козирева Т. І.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»

saleiandrew@gmail.com

Якісні показники електроізоляційних покриттів на алюмінії залежать від властивостей металевої підкладки і склофрити, а також від процесів, які протікають при їх випалі. Так, наприклад, найбільш поширеними дефектами емалевих покриттів на алюмінії є наскрізні пори та тріщини-розриви. При цьому відмічається, що ці дефекти утворюються ще на початковій стадії формування покриття. Для запобігання утворення тріщин-розривів в покритті порошки матеріалів повинні відповідати певній питомій поверхні в залежності від методу нанесення покриття на поверхню металу. Так, питома поверхня порошоків стеклокераміки для нанесення методом обливу повинна становити 200–280 м²/кг, а для нанесення методом трафаретного друку – 500–550 м²/кг.

Для досягнення поставленої мети емаль, призначену для нанесення на алюмінії, подрібнювали до питомої поверхні $S_1 = 133$, $S_2 = 264$ і $S_3 = 617$ м²/кг. Вказані значення питомої поверхні відповідають координатам вузлових точок симплексних решіток, які використовувалися при плануванні експерименту. Оцінка умов утворення суцільної бездефектної поверхні емалевого покриття різного гранулометричного складу на алюмінії здійснювалась за допомогою нагрівальної приставки до оптичного мікроскопу. Всі покриття наносилися методом обливу в середовищі ізопропілового спирту. Алюмінієві зразки поміщалися в піч, нагрівалися від кімнатної температури до температури ізотермічної витримки (580 °С) при якій завершувався процес формування покриття протягом 15–20 хвилин.

На рис. приведена температурна залежність стадії формування покриття та ширина тріщин-розривів на стадії їх злиття в залежності від дисперсності скла.

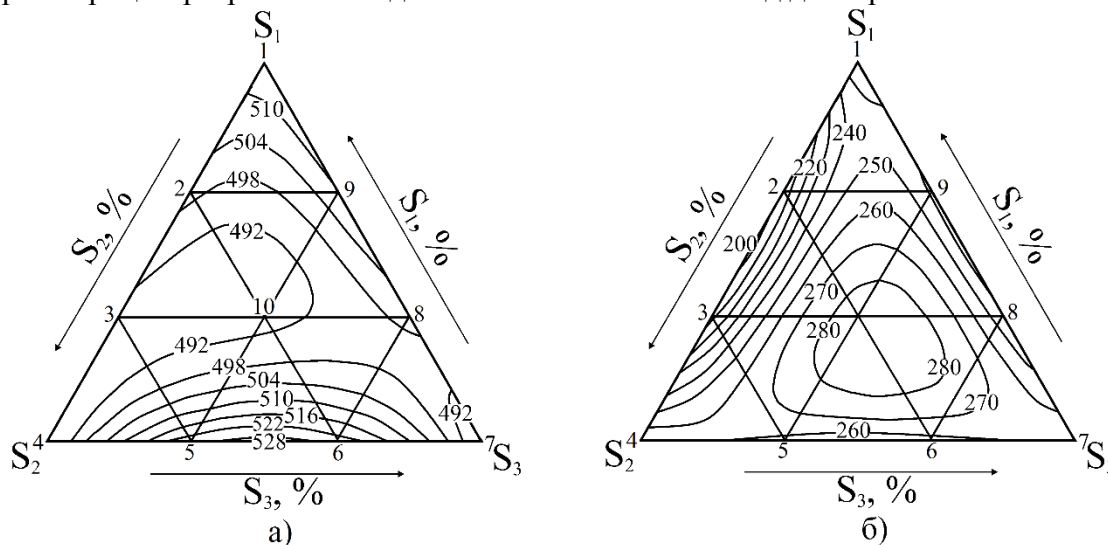


Рис. Ізолінії температури початку злиття тріщин, °С (а) та ширини дефектних тріщин на стадії їх злиття, мкм (б) в залежності від дисперсності скла

Аналіз результатів мікроскопічних досліджень показує, що найбільш раціональний з точки зору температур формування суцільного покриття та утворення мінімальних розмірів тріщин є склади номер 3 ($S_{\text{пит}} = 220$ м²/кг) та номер 4 ($S_{\text{пит}} = 264$ м²/кг).

ІНГІБІТОРНА ЗДАТНІСТЬ ФЕНОЛІВ

Сачанова Ю. І., Овчаренко О. О., Проскуріна В. О., Дженюк А. В.

Навчально-науковий інститут
хімічної технології та інженерії НТУ«ХПІ», г. Харків, Україна
organick@ukr.net

Схильність фенолів до окиснення дозволяє використовувати їх як акцептори окиснювальних агентів (закрема, кисню повітря) або інгібіторів окиснення нестійких речовин при зберіганні. Окиснення фенолів молекулярним киснем легко відбувається за доступу повітря (аутоокиснення). Це явище знаходить застосування при створенні методів примусового очищення фенольних стічних вод та в процесах самоочищення водоймищ. У зв'язку зі значною токсичністю гранично допустимий показник за змістом фенолів в водоймах становить – 0,001 мг/дм³.

Для універсальної кінетичної оцінки процесу аутоокиснення фенолів та розрахункового визначення їх інгібіторної здібності необхідно використовувати результати досліджень макрокінетики окиснення фенолів різної будови молекулярним киснем в водно-лужному середовищі при варіюванні температури, рН, вихідної концентрації реагенту.

Кінетична характеристика процесу визначається на підставі даних з витрати кисню і перевірки зменшення вмісту фенолу. Для кількісної оцінки взаємозв'язку реакційної здатності і структури фенолу можливе використання кореляційного рівняння Гаммета (1).

$$\lg(k/k_0)=\rho\cdot\sigma, \quad (1)$$

де k і k_0 – константи швидкості перетворення фенолу, або деякі сполуки, прийнятої за зразок;

σ – константа, що емпірично характеризує структуру сполуки;

ρ – константа чутливості, величина якої змінюється в залежності від типу реакції і зовнішніх умов. За одиницю прийнято значення для деякого еталонного процесу – дисоціації бензойної кислоти і її похідних у водному розчині.

Рівняння Гаммета дає можливість, при відомих значеннях ρ і σ наближено визначити швидкість окиснення фенолу.

Для опису реальних систем обробка експериментальних даних ведеться зазвичай з кореляцією за принципом найменших квадратів. Швидкість окиснення фенолів пов'язана з їх структурними показниками рівнянням (2):

$$\lg k = -3,55 \cdot \Sigma\sigma + 0,65, \quad (2)$$

де $\Sigma\sigma$ – сума полярних констант для даної сполуки.

У теоретичному аспекті рівняння Гаммета виражає зміну вільної енергії молекули в результаті протікання даної реакції.

При наявності декількох можливих реакційних центрів в молекулі (поліфеноли) вводиться поправка – статистичний фактор. При дотриманні цих умов коефіцієнт кореляції досягає цілком задовільної величини – 0,98. Від загальної кореляції для даної системи декілька відхиляються орто- заміщені гомологи. Однак для фенолу такої структури ефект стеричної перешкоди найчастіше не проявляється.

Таким чином, використовуючи рівняння (1) і (2) можна розрахунковим шляхом передбачити інгібіторну здатність фенолів і їх сумішей.

**ЕЛЕКТРООСАДЖЕННЯ ПОКРИТТІВ Ni-TiO₂
ІЗ МЕТИЛСУЛЬФОНАТНОГО ЕЛЕКТРОЛІТУ ЗА ПРИСУТНОСТІ
ВОДОРОЗЧИННИХ СОЛЕЙ ТИТАНУ(IV) ТА ІОНІВ КУПРУМУ(II)**

Скнар І. В., Скнар Ю. Є.

Державний вищий навчальний заклад
«Український державний хіміко-технологічний університет»
просп. Гагаріна, 8, Дніпро, 49005, Україна
yuriy.skнар@gmail.com

Фотокаталітичні гальванопокриття Ni-TiO₂ можна одержувати різними способами. Широко поширеним є електроосадження із суспензійних електролітів, де титан диоксид вводиться в розчин у вигляді порошку. За іншим способом використовується золь титан диоксиду. Найбільш екстравагантним є нанесення композитів із електролітів, що містять водорозчинну сіль титану(IV). Збільшення фотокаталітичної активності вдається досягти при нанесенні композиту на попередньо сформовану нікелеву матрицю з розвиненою поверхнею.

В даній роботі показана можливість одержання композиту Ni-TiO₂ із метилсульфонатного електроліту за присутності в ньому титан(IV) хлориду та іонів купруму(II). Для запобігання гідролізу солі титану(IV) значення рН підтримували близько -0,5. Для стабілізації електроліту в розчин вводили 0,5 М гідроген пероксиду. Розчин солі титану(IV) та гідроген пероксиду змішували окремо, а потім в необхідній кількості додавали до електроліту нікелювання. Іони купруму(II), концентрацією 2 ммоль/л, вводили в електроліт у вигляді купрум(II) метилсульфонату. Температура електролізу становила 303 К та 333 К. В якості анодного матеріалу використовували нікель марки НПА-1. Значення густини струму становили 10–50 А/дм².

Гальванопокриття, одержані із метилсульфонатного електроліту нікелювання за присутності титан(IV) хлориду та іонів купруму(II), представляють собою шорсткі осадки темно-сірого кольору (рис. 1). Ймовірно, така морфологія поверхні обумовлена тим, що одночасно із осадженням композиту Ni-TiO₂ на катоді відбувається відновлення іонів купруму(II) на граничній густині струму. Останнє є причиною утворення порошкоподібного осаду міді. Отже, формується осад з розвиненою поверхнею, на якій присутні фотоактивні частинки титан диоксиду. Природно, що фотокаталітична активність одержаних композитів виявилась значно вищою порівняно з осадами, одержаними без іонів купруму(II) (рис. 2).

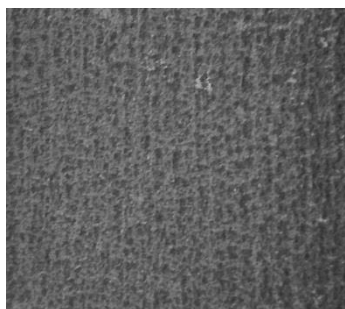


Рис. 1. Покриття Ni-TiO₂, осаджене із електроліту, що містить титан(IV) хлорид і іони купруму(II)

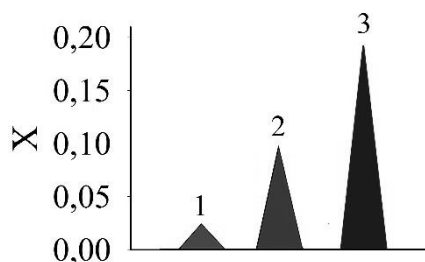


Рис. 2. Ступінь фотодеструкції метилового оранжевого (X) під дією ультрафіолету за присутності композитів Ni-TiO₂, одержаних із: 1 – фонового електроліту; 2 – електроліту, що містить титан(IV) хлорид; 3 – електроліту, що містить титан(IV) хлорид і іони купруму(II)

РАДІОНУКЛІДНИЙ СКЛАД КАЛІЙНИХ ДОБРИВ

*Сніткіна А. І., Хоботова Е. Б.*Харківський національний автомобільно-дорожній університет
chemistry@khadi.kharkov.ua

Окрім природного радіаційного фону виділяють також техногенно змінений фон. Він визначається як випромінювання від природних джерел іонізуючого випромінювання (природних радіонуклідів і космічного випромінювання), яке не мало б місця, якби не використовувався якийсь технологічний процес, не призначений безпосередньо для генерування іонізуючого випромінювання. Однією з причин такого зміненого фону може бути використання добрив, що містять природні радіонукліди (ПР), такі як ^{40}K , ^{226}Ra і ^{232}Th .

Вивчення радіоактивних властивостей калійних добрив дає можливість визначення ефективної питомої радіоактивності природних радіонуклідів у калійних добривах і рівень забруднення ґрунтів радіонуклідами цих добрив і їх залишкової допустимої концентрації в ґрунті.

Експериментальне визначення питомих активностей радіонуклідів в зразках калійних добрив проводилося за допомогою гамма-спектрометричного методу з напівпровідниковим детектором. Обрані зразки калійних добрив, які використовуються на практиці в господарствах Харківської області. У зразках калійних добрив була виявлена наявність ПР. Первинні експериментальні дані, одержані при дослідженні калійних добрив, приведені в таблиці. Аналіз даних показав, що сумарна питома радіоактивність проб добрив коливається в межах від 2470,0 до 6190,0 Бк/кг. Для калійних добрив характерна присутність двох ПР: ^{226}Ra , ^{40}K . Найбільша активність 6190,0 Бк/кг у проби монокалійфосфату (Польща). Гідрокомплекс обумовлений присутністю радіонукліду ^{226}Ra , який дає внесок 0,4 %, що суттєво не збільшує суму питомих активностей.

Інше калійне добриво – майстер №1 (Іспанія) має сумарну активність набагато нижче – 2470,0 Бк/кг, проте характеризується відсутністю ^{226}Ra . Внески ізотопів радію в зразок гідрокомплексу відносно низький. Проте гідрокомплекс характеризується присутністю всіх двох вище перерахованих ізотопів на відміну від досліджених зразків майстер № 1, № 2 та монокалійфосфату, в яких не виявлено сумісної їх присутності.

Таблиця. Результати γ -спектрометричного аналізу калійних добрив

№	Добрива	Питома радіоактивність, Бк/кг (внесок, %)		Сума питомих активностей, Бк/кг
		^{226}Ra	^{40}K	
1	Майстер (Іспанія)	-	2470,0 (100 %)	2470,0
2	Майстер (Іспанія)	-	4890,0 (100 %)	4890,0
3	Гідрокомплекс (Польща)	10,1 (0,4 %)	2760,0 (99,6 %)	2770,1
4	Монокалійфосфат (Польща)	-	6190,0 (100 %)	6190,0

Зразки майстера (№ 1, 2) та монокалійфосфат № 4 характеризуються відсутністю ізотопу ^{226}Ra . У зразку № 3 виявлений ізотоп ^{226}Ra , проте з достатньо високою активністю 2770,1 Бк/кг. ^{40}K володіє високою біологічною активністю. Найбільша активність присутня в зразку монокалійфосфату № 4 складає 6190,0 Бк/кг.

СПОСОБИ ПІДВИЩЕННЯ ЗАХИСНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ОПТИЧНИХ СИТАЛІВ

Топчий В. Л., Саввова О. В., Бабіч О. В.

Кафедра технології кераміки, вогнетривів, скла та емалей,
Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»,
вул. Кирпичова, 2, 61002, Харків, Україна
t_v_l2010@ukr.net

Використання оптичних ситалів як захисних елементів пов'язано зі складністю забезпечення їх високого світлопропускання та значної термічної і механічної міцності. Забезпечення високих міцносних властивостей склокристалічних матеріалів може бути реалізовано шляхом спрямованої кристалізації стекол та формування об'ємної тонкокристалічної структури з вмістом високоміцних кристалічних фаз (β -сподумену, дисилікату літію, α -кордієриту, муліту) кількістю > 50 об. % в умовах тривалої високотемпературної термічної обробки. Однак досягнення прозорої структури матеріалів у видимій частині спектру може бути реалізовано лише при незначному вмісті кристалічної фази з розміром не більше 0,4 мкм. Поєднання експлуатаційних властивостей, які забезпечуються при умовах, що взаємно виключають одна одну, є складним технологічним завданням на вирішення якого спрямована дана робота.

Це складне завдання може бути вирішено за умови раціонального вибору та проектування склокристалічних матеріалів і забезпечення ефективного управління їх властивостями за рахунок реалізації високоупорядкованої дисипативної структури на етапі їх варки та термічної обробки.

Формування досконалої оптимальної субмікронної текстури за механізмом фазового розподілення було забезпечено для склокристалічного матеріалу на основі літій силікатного скла при співвідношенні $\text{Li}_2\text{O} / \text{SiO}_2 = 1 / 4$. Розроблений склокристалічний матеріал з вмістом дисилікату літію ≈ 50 об. % було отримано за двостадійним низькотемпературним режимом термічної обробки. В даному випадку значна кількість кристалів дисилікату літію, що має даний напрямок росту по відношенню до загальної кількості кристалів, підвищує ступінь орієнтації текстури матеріалу, що приводить до зростання міцності на стиск до 650 МПа та ударної в'язкості до 5,5 кДж/м².

Показники механічних властивостей для розроблених комбіновано-дефектних літій силікатних склокристалічних матеріалів можуть бути суттєво підвищені за рахунок блокування об'ємних та поверхневих дефектів поверхні шляхом модифікування складу поверхні методом іонного обміну у парах NaNO_3 . При цьому температуру іонного обміну слід обирати з урахування формування значної кількості зародків кристалів метасилікату літію при температурі початку розм'якшення за рахунок протікання процесу метастабільного фазового розділення. Це може призвести до прояву опалесценції в стеклах і, як наслідок, зниження світлопропускання матеріалу. При забезпеченні оптимальних технологічних параметрів обробки (температура 550 °С, тривалість 1 година) міцність на стиск розроблених склокристалічних матеріалів може бути підвищена до 30 % при збереженні світло пропусканні 72 %.

Важливим фактором ефективного функціонування оптичних елементів є їх висока стійкість до дії органічних кислот, які вивільняються внаслідок метаболізму плісневих міцеліальних грибів. Розроблені склокристалічні матеріали характеризуються достатньо високою біостійкістю, що за характером обростання поверхні мікроскопічними грибами складає лише 1 бал. Це пояснюється високою структурною міцністю ситалів та наявністю у їх складі дисилікату літію, який характеризується високою стійкістю до дії органічних кислот.

Забезпечення високих захисних властивостей розроблених оптичних ситалів на основі літій силікатних стекол за рахунок використання сучасних технологій дозволить підвищити конкурентоспроможність вітчизняних бронематеріалів.

PREPARATION AND INVESTIGATION OF $\text{Er}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$ CO-DOPED $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ CERAMIC

Trusova E.^{1,2}, Bača Ľ.², Veteška P.², Janek M.^{2,3}

¹Belarusian State Technological University, Minsk, Belarus

²Slovak University of Technology, Bratislava, Slovakia

³Comenius University, Bratislava, Slovakia

trusova@belstu.by

Nowadays, much attention is paid to the investigation of compounds $\text{Re}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ with the pyrochlore structure, where “Re” corresponds to La, Ce, Gd, Sm, Nd etc. Such materials are employed in a variety of different applications due to their interesting optical, electrical, magnetic and catalytic properties. A number of different dopants have been studied to obtain visible emissions under IR-excitation. Erbium and ytterbium are one of possible dopants and used to achieve up-conversion luminescence. Lanthanum zirconate ceramics with the pyrochlore structure codoped $\text{Er}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$ are prospective media for efficient up-conversion. For the preparation of such ceramics solvo-chemical synthesis was used. Lanthanide nitrate and zirconyl nitrate hydrates were dissolved in distilled water with small amount of nitric acid. Obtained clear solution was drop by drop added to the ammonium hydroxide. The pH of the resulting solution was adjusted to about 7.5–8 and gel-like precipitates were dried at 80 °C. Dried powders were calcined at 400 °C in air atmosphere for 4h. The powders were pressed into discs of about 9 mm diameter and 1 mm thickness and fired at 1500 °C with annealing period lasting 2 h. XRD data (Fig.1) indicate the formation of the $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ phase with a pyrochlore structure. The doping with doped $\text{Er}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$ resulted in slightly deviated pyrochlore unit cell parameters. However, addition of yttrium and erbium can also leads to a structural transformation from the ordered to the disordered pyrochlore structure. The up-conversion luminescence spectra of the $\text{Er}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$ co-doped ceramic using 980 nm excitation are shown in Fig. 2. The emission in the green region centered at 525 and 545 nm are related to the $^2\text{H}_{11/2}$ and the $^4\text{S}_{3/2}$ excited states transitions of the Er^{3+} ions. The band corresponding to the red emission over the 620–680 nm range is related to the $^4\text{F}_{9/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$ transitions.

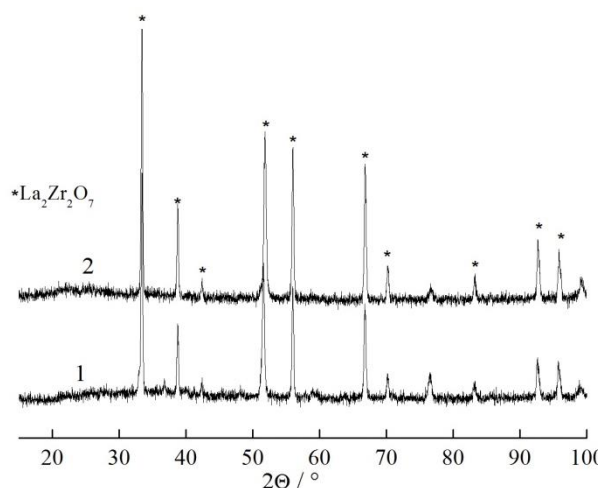


Fig. 1. XRD patterns of $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ ceramics without dopants (1) and $\text{Er}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$ co-doped (2)

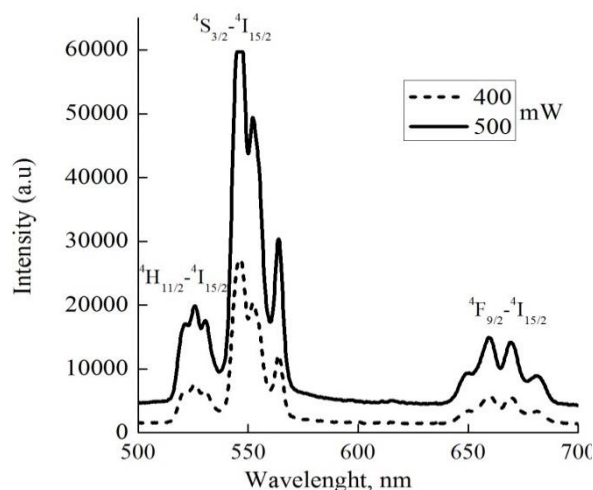


Fig. 2. The up-conversion luminescence spectra of the $\text{Er}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$ co-doped ceramic

Acknowledgements. The authors acknowledge financial support by the National Scholarship Programmer of the Slovak Republic supporting the study stay of Assoc. prof. Dr. E. Trusova at the Department of Inorganic Materials, Faculty of Chemical and Food Technology, SUT.

НОВИЙ СПОСІБ ПЕРЕЕСТЕРИФІКАЦІЇ РОСЛИННИХ ОЛІЙ ТА ЖИРІВ БІОЛОГІЧНОГО ПОХОДЖЕННЯ

Федоришин О. С.

Інститут сорбції та проблем ендоекології НАН України
Україна, 03164 Київ, вул. Генерала Наумова, 13
f777f@ukr.net

Як правило, в якості каталізаторів переестерифікації до останнього часу використовували в класичній технології гомогенні основні і кислотні каталізатори, які мають ряд недоліків: вони дорогі, псуються при зберіганні, вимагають дезактивації каталізаторів після реакції, попередньої ретельної осушки жирових сумішей, використовуються одноразово, дають велику кількість шкідливих стоків та ін.

Тому для реалізації багатьох промислово важливих процесів і, в першу чергу при синтезі біодизеля, важливою є розробка гетерогенних каталізаторів, які більш зручні в роботі, практично не створюють екологічних проблем, не викликають корозії апаратури, їх можна використовувати багаторазово. Все це і обумовлює високу актуальність даного дослідження, спрямованого на створення нових твердих кислотних каталізаторів для одержання біодизельного палива.

На даний час досліджено значну кількість твердих кислот і основ в якості таких каталізаторів, але найбільшого успіху вдалося отримати французькій компанії Axens, яка розробила процес Esterfip-h з використанням власного гетерогенного каталізатора на основі оксидів цинку та алюмінію. Головною перевагою даного процесу є одержання чистого гліцерину. Основним недоліком гетерогенних процесів переестерифікації олій, в тому числі і Esterfip-h, є висока температура (200–250 °C), яка робить неможливе використання високоефективних іонообмінних смол. Тому, нами були синтезовані нові гранульовані сильнокислотні гетерогенні вуглецеві каталізатори синтезу біодизельного палива, виготовлені на основі синтетичних сополімерів і смол, а також природних фруктових кісточок і шкаралупи кокосового горіха.

Визначено основні структурно-сорбційні характеристики синтезованих каталізаторів; з використанням хімічного і потенціометрического методів, охарактеризовані їх кислотні властивості, наявність і розподіл поверхневих функціональних груп по кислотності. Кінцевий продукт мав величини $S_{\text{пит}}$ від 5 до 850 м²/г, об'єм пор W_s – від 0,05 до 0,30 см³/г; всі одержані зразки були мікро- і мезопористі з радіусами пор $r \sim 12\text{--}120$ Å; обмінна ємність синтезованих зразків змінювалася від 1,2 до 5,8 мг-екв/г.

Оптимізовано умови одержання вуглецевих матеріалів з високим вмістом поверхневих функціональних груп що забезпечувало високі виходи біодизеля при температурах 150–160 °C, модифікованих різними способами, з максимальною каталітичною активністю в реакції переестерифікації ріпакової олії не тільки сухим метанолом і етанолом, але і цими ж спиртами, що містять 4–6 % води.

Показано, що за допомогою розроблених вуглецевих каталізаторів можна одержувати кінцевий продукт зі зниженою в'язкістю при 95–100 %-вому перетворенні і багаторазовому використанні одного і того ж каталізатора.

Запатентовано новий спосіб переестерифікації рослинних олій і / або жирів біологічного походження (патент на винахід № 101360), на підставі якого розроблено і запатентовано установку для переестерифікації рослинних олій і / або жирів біологічного походження (патент на винахід № 109799), найкращим каталізатором для якої є кільця Рашига з нанесеним на них кислотним фосфоровмісним вуглецевим матеріалом.

ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ АМІНІВ НА ГІГРОСКОПІЧНІСТЬ КЛІНКЕРУ

Флейшер Г. Ю., Трус І. М., Гарбуз А. С.

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут
імені Ігоря Сікорського»
watrushkoo@gmail.com

Органічні добавки широко застосовуються в якості інтенсифікаторів помелу під час операцій сухого та мокрого помелу сировинних матеріалів, активних мінеральних добавок та цементів. Інтенсифікатори помелу дозволяють вирішити наступні задачі: 1) підвищити продуктивність млина при заданій тонині помелу; 2) збільшити тонину помелу при постійній продуктивності млина або 3) підвищити обидва показника; 4) покращити дисперсність при постійній питомій поверхні; 5) підвищити ефективність сепарації матеріалу. Це досягається введенням, зазвичай, невеликих кількостей (менше 0,1 мас. %) інтенсифікаторів помелу. Але, навіть, при таких низьких витратах інтенсифікатори помелу мають суттєвий вплив на наступні властивості цементу: гігроскопічність та текучість дисперсного цементу, реологічні властивості цементної пасти, процеси гідратації та структуроутворення в цементному камені.

Важливою проблемою сьогодення є втрата активності цементу при зберіганні внаслідок його високої гігроскопічності, тобто здатності поглинати вологу з оточуючого середовища. В ряді випадків інтенсифікатори помелу можуть збільшувати гігроскопічність цементу. Тому задачею даного дослідження є визначення впливу органічних сполук на гігроскопічність клінкеру.

З цією метою було застосовано ряд амінів: діетаноламін, триетаноламін, триетиламін, діетилентриамін та етилдїізопропіламін у вигляді хімічно чистих рідин. Добавки вводилися до лабораторного кульового млина під час помелу клінкеру. Для визначення гігроскопічності отримані клінкери зберігалися в ексикаторі у середовищі з відносною вологістю 95–98 %. Результати дослідження наведені в таблиці.

Найменування добавки	Приріст маси клінкеру, мас. %, при концентрації добавки, мас. %, у віці 10 тижнів			
	0,00	0,05	0,10	0,15
Діетаноламін	3,92	4,18	4,87	5,41
Триетаноламін	3,92	3,98	4,23	4,77
Триетиламін	3,92	0,96	3,72	3,84
Діетилентриамін	3,92	3,13	3,99	4,82
Етилдїізопропіламін	3,92	3,81	2,89	2,66

З отриманих результатів можна зробити ряд висновків. По-перше, збільшення концентрації добавки призводить до збільшення гігроскопічності клінкерів. Виняток становить лише етилдїізопропіламін. По-друге, оптимальні концентрації добавки, за яких відбувається зменшення гігроскопічності клінкерів, знаходяться, переважно, в межах до 0,05 мас. %. Виняток становить етилдїізопропіламін та триетиламін, які при всіх дослідних концентраціях зменшують гігроскопічність клінкеру.

Якщо розташувати добавки за зменшенням їх ефективності, то отримуємо ряд триетиламін (0,05 мас. %) – етилдїізопропіламін (0,15 мас. %) – діетилентриамін (0,05 мас. %) – триетаноламін (0,05 мас. %) – діетаноламін (0,05 мас. %). Аналізуючи структуру молекул добавок, можна дійти висновку, що оптимально з метою зменшення гігроскопічності клінкерів використовувати добавки з однією функціональною групою та насиченими вуглеводневими радикалами. Поява у структурі молекули бокових функціональних груп у вуглеводневих радикалах зменшує ефективність добавок.

ПОРІВНЯЛЬНИЙ АНАЛІЗ ЕФЕКТИВНОСТІ МЕТОДІВ ЗАПОБІГАННЯ УТВОРЕННЮ ТРИГАЛОГЕНМЕТАНІВ ПРИ ПІДГОТОВЦІ ПИТНОЇ ВОДИ

Хмарська Л. О.¹, Заруба С. В.²

¹Державний вищий навчальний заклад

«Український державний хіміко-технологічний університет»

²Дніпровський національний університет ім. Олеся Гончара

liia_khmarska@udhtu.edu.ua

Проблема забезпечення населення України якісною питною водою є одним з найактуальніших питань сьогодення. Близько 1/5 загального об'єму споживаної води за окремими показниками не відповідає нормам ДСанПіН 2.2.4-171-10. Одним з процесів отримання питної води необхідної якості, зокрема з епідеміологічної точки зору, є хлорування. На більшості водопровідних станцій України в якості знезаражувального агента використовують вільний хлор або хлорвмісні речовини. Однак при проведенні знезараження у такий спосіб відбувається утворення хлорорганічних сполук, зокрема тригалогенметанів (ТГМ). Одним з найоптимальніших методів запобігання утворення ТГМ є амонізація, яка, крім того, дозволяє пролонгувати знезаражувальну дію хлору й зменшити об'єм його використання. В якості амонізуючого агента на більшості очисних споруд використовують аміачну воду. Ця речовина доволі небезпечна (II клас небезпечності) і нестійка, а її застосування потребує великої площі для зберігання та значних капіталовкладень. Вирішенням даних проблем є використання аміаку у зв'язаній формі – у вигляді солей амонію. Однією з таких речовин є «АМОПОЛ» (ТДВ ПХЗ «Коагулянт», Україна). «АМОПОЛ» – неорганічна речовина зі вмістом Нітрогену 21 % за масою (у перерахунку на суху речовину), що відноситься до IV класу небезпеки.

Проведено низку лабораторних випробувань в умовах однієї з насосно-фільтрувальних станцій (НФС) Дніпровського регіону, де порівнювалися два процеси: преамонізація й постамонізація. У якості вихідної води використовувалась вода р. Дніпро.

У процесі преамонізації, «АМОПОЛ» додавали до введення хлорної води й коагулянта. При проведенні постамонізації додавали спочатку коагулянт, далі – «АМОПОЛ» і в останню чергу – хлорну воду. Дозування коагулянту відбувалося відповідно до технологічного регламенту НСФ, а кількість «АМОПОЛ» була розрахована виходячи зі співвідношення $\text{Cl}_2:\text{NH}_3 = 7:1$.

Таблиця. Результати лабораторного дослідження води після її обробки

Проба	Доза реагентів			Параметри води						
	Коагулянт, мг/л	Хлор, мг/л	«АМОПОЛ», мг/л	Хлороформ, мкг/л	Каламутність, мг/л	Кольоровість, град.	залиш. Al, мг/л	Залишковий хлор, мг/л		
								сумарний	вільний	зв'язаний
Без амонізації	30	4,5	–	129	1,09	16	0,38	1,0	0,5	0,5
Постамонізація	30	3,5	2	27	<0,58	23	0,52	1,6	0	1,6
Преамонізація	30	1,0	0,57	7	<0,58	30	0,76	0,8	0	0,8

Як видно з отриманих результатів, вищу ефективність продемонстрував процес преамонізації: при цьому у порівнянні з існуючою схемою концентрація хлороформу зменшується на 95 %, а каламутність – на 47 %.

Даний метод може бути рекомендований до використання у стандартних технологічних схемах водопідготовки, це дозволить отримати питну воду, що відповідає нормам ДСанПіН 2.2.4-171-10.

РАДІОНУКЛІДИ У СКЛАДІ АЗОТНО-ФОСФОРНИХ ДОБРІВ

Цибань А. П., Хоботова Е. Б.

Харківський національний автомобільно-дорожній університет

chemistry@khadi.kharkov.ua

Однією з причин техногенно зміненого радіаційного фону може бути використання мінеральних добрив, що містять природні радіонукліди (ПР). Визначення активності ПР надає можливість прогнозувати рівень залишкової допустимої концентрації в ґрунті. Експериментальне визначення питомих активностей ПР в зразках азотно-фосфорних добрив проводилося за допомогою гамма-спектрометричного методу з напівпровідниковим детектором. У зразках азотно-фосфорних добрив була виявлена наявність ПР. Первинні експериментальні дані, одержані при дослідженні азотно-фосфорних і фосфорних добрив, приведені в таблиці. Для азотно-фосфорних добрив характерна присутність трьох ПР: ^{232}Th , ^{226}Ra , ^{40}K . Аналіз даних показав, що сумарна питома радіоактивність проб добрив коливається в межах від 44,3 до 4545,4 Бк/кг. Найбільша активність 4545,4 Бк/кг у проби нітроамофосу (РФ) обумовлена присутністю ^{40}K , який дає внесок 98,78 % у загальну активність. Інше азотно-фосфорне добриво – амофос (РФ) має сумарну активність набагато нижче – 81,4 Бк/кг, проте також характеризується високим вмістом ^{40}K – 62,4 %. Внески ізоотопів торію і радію в зразки амофосів відносно низькі. Проте амофоси характеризуються присутністю всіх трьох вище перерахованих ізоотопів на відміну від досліджених зразків суперфосфату, в якому не виявлено сумісної їх присутності.

Таблиця. Результати γ -спектрометричного аналізу азотно-фосфорних і фосфорних добрив

№ з/п	Добрива	Питома радіоактивність, Бк/кг (внесок, %)			Сума питомих активностей, Бк/кг
		^{232}Th	^{226}Ra	^{40}K	
1	Нітроамофос (РФ)	38,1 (0,84 %)	17,3 (0,38 %)	4490,0 (98,78 %)	4545,4
2	Амофос (РФ)	15,3 (18,8 %)	15,3 (18,8 %)	50,8 (62,4 %)	81,4
3	Суперфосфат (Україна, м. Суми)	-	411,0 (100 %)	-	411,0
4	Суперфосфат (Україна, м. Донецьк)	-	21,5 (48,5 %)	22,8 (51,5 %)	44,3

Зразки суперфосфату (№ 3, 4) характеризуються відсутністю ізоотопу ^{232}Th . У зразку № 3 виявлений тільки ізоотоп ^{226}Ra , проте з достатньо високою активністю 411,0 Бк/кг. У суперфосфаті виробництва м. Суми відсутній ізоотоп ^{40}K . Це окремий випадок для фосфорних добрив, який з позитивної сторони може характеризувати початкову сировину, оскільки ^{40}K володіє високою біологічною активністю. Активність ізоотопу ^{40}K , присутнього в зразку суперфосфату № 4 складає 51,5 %. Вміст деяких природних радіонуклідів в азотно-фосфорних добривах виявився нижчим, ніж середнє значення по Україні. Наприклад, питома активність ^{232}Th в зразку № 2 амофосу в 1,5 разів нижче, ніж середня по Україні (24 Бк/кг), так само і з величиною питомої активності ^{226}Ra (середнє значення по Україні – 22 Бк/кг). Зразок суперфосфату № 3 (м. Суми) характеризується шестикратним перевищенням середнього значення питомої активності ^{226}Ra по Україні, яке складає 67 Бк/кг. Зразок суперфосфату № 4 – навпаки зниженим значенням активності радію.

**ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДУ АНАЛІЗУ ІЄРАРХІЙ ДЛЯ ВИБОРУ
КАТАЛІЗАТОРА***Шаган Д. В., Бугаєва Л. М.*

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
dmitryshagan@gmail.com

Якість продукції є одним з найважливіших показників роботи будь-якого виробничого підприємства, а високий рівень якості продукції – основний гарант його ефективної діяльності.

Умови досягнення високих показників за тими чи іншими параметрами часто є суперечливими. Тому проблема підбору оптимального каталізатора, як правило, є нетривіальною, важко піддається логіці однозначних рішень та вимагає використання розгалуженої стратегії прийняття компромісних рішень.

Завдання прийняття рішення вимагає порівняння альтернатив і вибору кращої з них. Для вибору альтернативи часто використовують метод аналізу ієрархій. Цей метод полягає в тому, що при наявності багатьох альтернатив, коли дати реальну оцінку кожній з них важко, порівнюють попарно дві альтернативи між собою і віддають перевагу тій чи іншій.

Загальна структура процесу вибору каталізатора може бути представлена в ієрархічній формі, що зображена на рис.

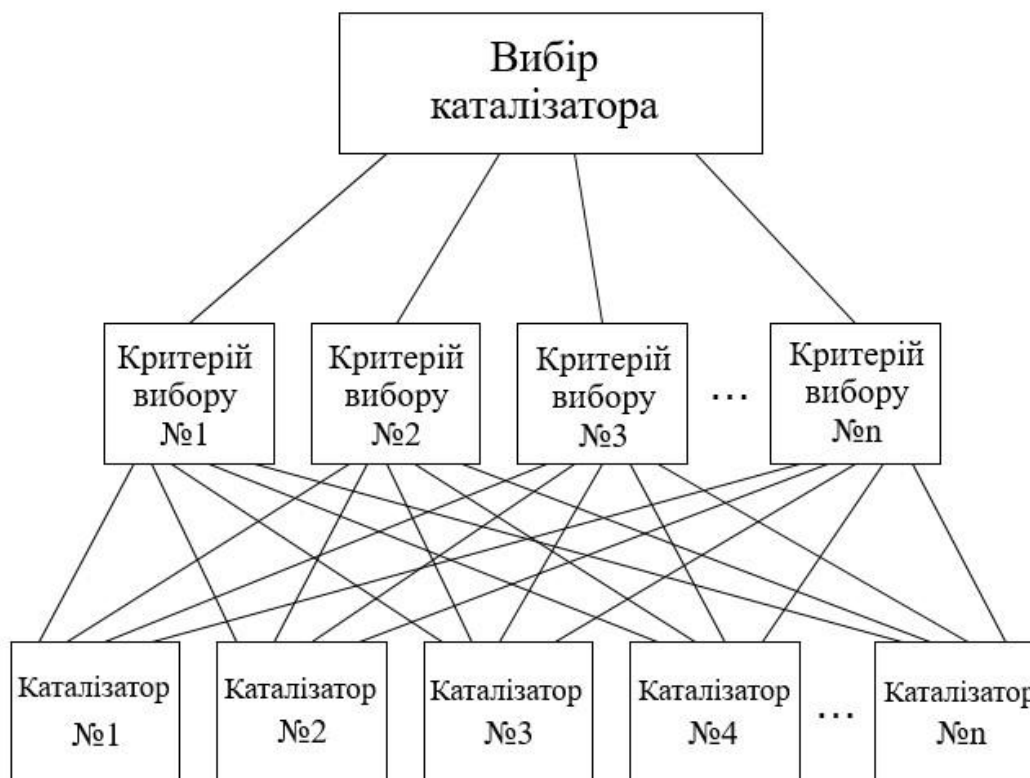


Рис. Ієрархія вибору каталізатора

Отримана ієрархія є першим етапом проектування та розробки системи підтримки прийняття рішень для вибору каталізатора, яка буде корисною при пошуку критеріїв вибору, а також при розробці відповідної програми.

ОСАЖДЕНИЕ НИКЕЛЯ ИЗ ОТРАБОТАННЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ НИКЕЛИРОВАНИЯ ГИДРОКСИДОМ НАТРИЯ

Шаметько К. Ю., Залыгина О. С., Чепрасова В. И.

Белорусский государственный технологический университет
zolha@tut.by

Одной из важнейших проблем гальванического производства является образование отработанных растворов электролитов, которые характеризуются высокой концентрацией ионов наносимых металлов (до 250 г/л). По площади покрываемых деталей второе место занимают никелевые покрытия, уступая только цинковым. Сброс отработанных электролитов никелирования на очистные сооружения приводит к нарушению их работы и попаданию ионов никеля в окружающую среду. При этом никель характеризуется высокими канцерогенными свойствами и имеет низкие значения ПДК – 34 мкг/л в воде поверхностных водных объектов. Поэтому особенно актуальным является разработка способа переработки отработанных электролитов никелирования с получением товарных продуктов.

В настоящее время наиболее распространенными являются сернокислые электролиты никелирования, поэтому для исследования был отобран отработанный электролит сернокислого никелирования (ОЭН) одного из белорусских предприятий. Высокая концентрация хромофорных ионов никеля в нем позволила предположить возможность получения на его основе пигментов. В качестве осадителя был выбран гидроксид натрия, т.к. его использование позволит получить гидроксид никеля, который широко используется как пигмент в стекольной и керамической промышленности.

На основании результатов потенциометрического титрования было установлено, что наиболее полное осаждение Ni^{2+} из ОЭН гидроксидом натрия NaOH наблюдается при $\text{pH} > 13$, однако, установить pH конца осаждения не удалось. Для уточнения оптимального количества осаждающего раствора гидроксида натрия были проведены дополнительные исследования в области высоких значений pH (таблица).

Таблица. Результаты осаждения Ni^{2+} из ОЭН предприятия 1 (проба 1-1) 1,5 н. раствором гидроксида натрия при высоких значениях pH

pH	Соотношение $N_{\text{OH}^-}/N_{\text{Ni}^{2+}}$	Выход осадка, г на 1 л ОЭН	Остаточная концентрация Ni^{2+} , г/л
12	1,2	105,2	0,042
13	1,3	108,1	0,019
Более 13	1,35	110,5	не обнаружено
Более 13	1,4	110,6	не обнаружено
Более 13	1,45	110,5	не обнаружено

Из таблицы видно, что оптимальным является соотношение $N_{\text{OH}^-}/N_{\text{Ni}^{2+}} = 1,35$, т. к. при дальнейшем повышении количества осадителя выход осадка не увеличивается, что свидетельствует о максимальном осаждении ионов никеля.

Исходя из химического состава исследуемых электролитов, можно предположить, что полученный осадок представляет собой гидроксид никеля $\text{Ni}(\text{OH})_2$. Однако, рентгенофазовый анализ свидетельствует об образовании смеси гидроксидов более сложного состава: $3\text{Ni}(\text{OH})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$; $\text{Ni}_{1,945}\text{O}_3\text{H}_{0,815}$ и $\text{Ni}_2\text{O}_2(\text{OH})_4$. Полученный осадок зеленого цвета после высушивания имеет плотную структуру и может использоваться в качестве пигмента.

Таким образом, осаждение Ni^{2+} из ОЭН гидроксидом натрия позволит уменьшить негативное воздействие гальванического производства на окружающую среду и расширить сырьевую базу для получения пигментов.

ДОСЛІДЖЕННЯ РІВНЯ ФЕНОЛЬНИХ РЕЧОВИН У ВИЧАВКАХ ВИШНІ ЗВИЧАЙНОЇ

Ясінська А. І., Сабадаш Н. І.

Національний університет харчових технологій
petrychenko_nastya@ukr.net

В останні роки використання еко-продуктів набуває популярності, в зв'язку з цим у харчовій промисловості використовують природні добавки та компоненти.

Наприклад природні барвники, можна отримувати з переробленої сировини на іншому харчовому підприємстві, з огляду на, те що консервні заводи переробляють багато тисяч тон фруктів в рік, відходи сокових виробництв (вичавки) можуть бути дешевою і доступною сировиною для виробництва антоціанових барвників, виходячи з цього виробництво антоціанового барвника з вичавок вишні є **актуальним**, оскільки сировина буде вважатися ресурсозберігаючою.

Фенольні сполуки, такі як фенольні кислоти і флавоноїди, мають високу біологічну активність, в тому числі антиоксидантної, антибактеріальної, антиалергічної, противірусної, протизапальної і навіть антивіковим ефектом.

Очевидно, що ягоди вишні можуть бути природним джерелом фенольних антиоксидантів і протимікробних сполук. Використання екстракту вишні може представляти інтерес для харчової, фармацевтичної та косметичної промисловості, для яких присутність природних добавок необхідно для збільшення їх антиоксидантних властивостей.

Гарний витяг активних природних сполук з рослинної сировини залежить від типу розчинника, використовуваного при екстракції рослинної сировини.

Матеріали та методи дослідження. Проведено порівняльний аналіз вмісту фенольних сполук у вичавках вишні звичайної. У якості об'єкту використовували вичавки вишні звичайної.

Вміст фенольних сполук в вичавках вишні звичайної було визначено при різних розчинниках, таких як: 70 %-ий етанол, 96 %-ий етанол, вода, хлороформ.

Визначення вмісту фенольних сполук полягає в окисленні реактивом Фоліна-Чокальте (до складу якого входить вольфрамат натрію і фосфомолібдат натрію) з утворенням блакитного комплексу, що має максимум поглинання при довжині хвилі 490 нм. Концентрацію фенольних речовин виражали в мг/г сухої речовини.

Визначення оптичної густини проводили при 490 нм у кюветі товщиною 10 мм. У якості контрольного розчину використовували дистильовану воду, додаючи усі реагенти.

Результати та їх обговорення. Для спостереження вмісту фенольних речовин у вичавках вишні звичайної, обрали 4 види розчинника: 70 %-ий етанол, 96 %-ий етанол, вода, хлороформ, оскільки в них приблизно однакова температура кипіння.

У результаті проведених досліджень встановлено різний рівень накопичення у вичавках вишні сполук фенольної природи. Результати наведені в таблиці.

Таблиця. Вміст фенольних речовин у вичавках вишні звичайної мг/г

№ з/п	Концентрація фенольних сполук			
	70 %	96 %	Вода	Хлороформ
1.	6,2	6,0	5,4	0

В ході аналізу результатів досліджень було встановлено, що найбільш високе накопичення фенольних сполук у вичавках вишні звичайної – 6,52 мг/г спостерігається при використанні розчинника – 70 %-го етанолу.

**CHEMICAL EDUCATION /
ХІМІЧНА ОСВІТА**

**ІНДИВІДУАЛІЗАЦІЯ НАВЧАННЯ ІЗ СТЕРЕОХІМІЇ НА ОСНОВІ
ДИСТАНЦІЙНОГО КУРСУ НА ПЛАТФОРМІ MOODLE***Антонова П. В., Ситник Н. С., Швед О. М.*Донецький національний університет імені Василя Стуса
antonova.p@donnu.edu.ua

Дистанційне навчання – сучасна перспективна форма освіти. Якісно створені дистанційні курси спрощують засвоєння матеріалу відповідних дисциплін та забезпечують індивідуальний характер навчання. Moodle – безкоштовно розповсюджуваний програмний комплекс, який надає широкий спектр можливостей для повноцінної підтримки процесу навчання в дистанційному середовищі – різноманітні способи представлення учбового матеріалу, перевірки знань та контролю успішності.

Метою роботи є розробка контролюючих та інтерактивних елементів курсу для вивчення вибіркової дисципліни «Основи стереохімії» для студентів денної та заочної форми навчання ступеня освіти «Бакалавр» освітньої програми «Хімія» в системі Moodle.

Курс «Основи стереохімії» має метою ознайомлення студентів з просторовою будовою молекул та вивченням впливу цієї будови на реакційну здатність сполук та продукти їх перетворення. Курс вміщує достатньо складні для сприймання розділи – точкові групи, стереоізомери, топізм та інші, що потребують розвиненої просторової уяви у студентів. Саме тому при засвоєнні цього курсу важливим елементом навчання є матеріал для самостійної роботи, з яким можна працювати в індивідуальному темпі, повертатись до попередніх тем у разі потреби. Для вирішення цих задач перспективним методичним прийомом є дистанційні курси, що створені на платформі Moodle.

Основою дистанційного курсу Moodle є електронні матеріали: програма курсу, лекції, завдання для індивідуальної роботи, що розроблені раніше в якості навчально-методичного матеріалу. Проте автоматичне перенесення цих розробок на платформу Moodle є неможливим. Для створення якісного курсу в системі Moodle необхідним є не лише форматування матеріалу, але й інший філософський підхід до розробки курсу. Перш за все курс повинен бути інтерактивним з великою кількістю перехресних посилань в інші розділи дисципліни, тестові завдання, різноманітні глосарії, якими забезпечено матеріал певної теми. Наявність перехресних посилань та контролюючих тестових завдань надає змогу активно опанувати матеріалом, розвивати просторову уяву.

Розроблений на платформі Moodle дистанційний курс «Основи стереохімії» включає текст лекцій в класичному розумінні, тестові та практичні завдання, глосарії. Лекції доповнено інтерактивними запитаннями для самостійної перевірки засвоєння матеріалу. В курсі передбачена можливість організації чату та форуму для спілкування студентів з викладачем. Це надає перевагу дистанційному курсу над звичайними електронними посібниками. Необхідною умовою якісного представлення матеріалу з даного курсу є зображення структурних формул речовин в певному редакторі. Таким вимогам відповідає хімічний редактор ChemDraw. Для виконання принципу єдності матеріал представлено в однаковій кольоровій палітрі.

Таким чином, розроблено дистанційний курс «Основи стереохімії», що відповідає вимогам якісного навчання та включає контролюючі та інтерактивні елементи, що забезпечують високу ефективність у взаємодії викладачів та студентів у зручний для кожного час.

ФОРМУВАННЯ КОМПЕТЕНТНОСТЕЙ ПРИ ВИКЛАДАННІ ХІМІЇ*Бойко Ю. В.*

Дніпровський державний аграрно-економічний університет

julia.boyko@gmail.com

У період реформування освіти надзвичайно гостро постає питання її вдосконалення та відповідності світовим освітнім стандартам.

Вважається, що впровадження компетентнісного підходу при викладанні хімії дозволить розв'язати ряд проблем. Такими проблемами на даний час є:

- нерозуміння місця хімії у життєдіяльності людини;
- створення у суспільній свідомості негативного ставлення до хімії, яку звинувачують у всіх екологічних та побутових проблемах: «Для нашого суспільства характерною є тотальна хемофобія та кричуща хімічна необізнаність як у побутових, так і в професійних питаннях»;
- недостатній рівень прикладних хімічних знань населення, який загрожує безпеці життєдіяльності, адже кожен з нас в повсякденному житті використовує різноманітні речовини та хімічні явища;
- необхідність орієнтуватися у зростаючому потоці хімічної інформації, і вміння її критично осмислювати рекламну інформацію.

Трансформація освіти відповідно до компетентнісного підходу потребує запровадження системи заходів щодо визначення основних напрямів діяльності викладачів:

- визначення переліку компетентностей;
- визначення способів набуття кожної з них;
- відбір змісту дисципліни, який може забезпечити формування всієї системи компетентностей;
- встановлення рівня та показників сформованості компетентностей на кожному етапі навчання;
- розроблення процесу контролю та корекції процесу формування компетентностей.

У цьому контексті складовими предметної компетентності з хімії можуть бути:

- здатність розрізняти речовини і хімічні явища в навколишньому світі;
- вміння проводити спостереження та досліди хімічного характеру;
- вміння використовувати хімічні знання для розв'язання теоретичних та прикладних проблем, пов'язаних з реальними ситуаціями в світі;
- вміння оцінювати доцільність використання речовин та хімічних явищ для розв'язання індивідуальних та суспільно – значущих завдань;
- вміння безпечно (для себе, оточуючих, довкілля) поводитися з речовинами та хімічними процесами в побуті та на виробництві;
- вміння оперувати хімічними знаннями та їх критично осмислювати;
- розуміння ролі хімії в розвитку суспільства та забезпеченні добробуту людини;
- розуміння місця хімії як природничої науки у повсякденному житті.

Це дозволить в нових умовах виховувати компетентну особистість, яка не лише володіє знаннями, а й уміє адекватно діяти у складних ситуаціях, застосовуючи знання й беручи на себе відповідальність за свою діяльність, оскільки без цього людина не має шансів адаптуватися до динамічних умов середовища.

**ВЗАЄМОЗВ'ЯЗОК ДЕЯКИХ ФУНДАМЕНТАЛЬНИХ ТА СПЕЦІАЛЬНИХ
ДИСЦИПЛІН ПРИ ПІДГОТОВЦІ ІНЖЕНЕРІВ-ТЕХНОЛОГІВ***Горайнова Ю. А.*

Донецький національний університет економіки і торгівлі
імені Михайла Туган-Барановського
Goryaynova@donnuet.edu.ua

Навчальними планами підготовки бакалаврів з галузі знань 18 «Виробництво та технології» за спеціальністю 181 «Харчові технології» спеціалізації «Технології в ресторанному господарстві» в Донецькому національному університеті економіки і торгівлі імені Михайла Туган-Барановського передбачено вивчення дисциплін як циклу загальної, так і професійної підготовки. До першого, серед інших, належить харчова хімія.

Для повного її опанування необхідні знання із класичних хімічних курсів (загальної, неорганічної, аналітичної, органічної, фізичної хімії та біохімії), а також знання законів фізики. Харчова хімія знаходиться на стику хімії, біології і медицини. Вона тісно пов'язана з біохімією, фізіологією харчування, ботанікою, зоологією та іншими науками. Безумовно, для майбутніх інженерів-технологів харчова хімія є необхідною для більш глибокого розуміння багатьох дисциплін циклу професійної підготовки. Таких як «Технологія продукції ресторанного господарства», «Поглиблене вивчення технології в ресторанному господарстві», «Харчові технології», «Методи контролю в галузі» тощо. Однією з найважливіших спеціальних дисциплін є «Теоретичні основи харчових технологій».

В процесі вивчення цього курсу студент набуває знань про основні поняття та визначення, що використовуються у технологіях харчових виробництв; про сутність усіх фізико-хімічних та мікробіологічних процесів, що відбуваються при технологічній обробці сировини; про зміни технологічних властивостей сировини і основних харчових речовин (білків, жирів, вуглеводів) при усіх засобах обробки. Курс «Теоретичні основи харчових технологій» передбачає наступні види робіт: лекційні та лабораторні заняття, самостійна робота. За календарно-тематичним планом студенти вивчають такі теми: «Характеристика й зміни білків харчових продуктів у технологічному процесі», «Жири, їхня характеристика й зміни в технологічному процесі», «Вуглеводи в технологічному процесі виробництва харчових продуктів», «Функціонально-технологічні властивості крохмалю та крохмальних полісахаридів», «Характеристика вуглеводів клітинних стінок», «Фізико-хімічні, біохімічні та мікробіологічні основи харчових технологій». Також вони виконують лабораторні роботи, наприклад: «Визначення ступеня денатурації білків», «Вивчення впливу термообробки на функціонально-технологічні властивості білків м'язової тканини теплокровних тварин», «Зміна рослинної олії в процесі смаження виробів у фритюрі», «Зміна властивостей вуглеводів при технологічній обробці», «Вивчення властивостей ферментів» та багато інших.

Як ми бачимо, основу знань будови, фізичних та хімічних властивостей білків, жирів, вуглеводів, ферментів, барвників, різних дисперсних систем студенти отримують, звичайно, на заняттях з харчової хімії при вивченні таких розділів, як «Дисперсні системи. Розчини», «Вода», «Основні класи неорганічних та органічних сполук» та поглиблюють їх в подальшому у розрізі харчової технології.

Отже, знання харчової хімії є необхідними для глибокого розуміння теоретичних основ харчових технологій, які в свою чергу є підґрунтям для підготовки високоякісних та компетентних фахівців в сфері харчових технологій.

**ЗАВДАННЯ ДО ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ З ДИСЦИПЛІНИ
«БІОХІМІЯ КЛІТИНИ»**

Гуцалюк М. Ю.¹, Лесишина Ю. О.¹, Ількевич Н. С.²

¹Донецький національний університет імені Василя Стуса

²Житомирський державний університет імені Івана Франка
ju.lesyshyna@donnu.edu.ua

Дисципліна «Біохімія клітини» відноситься до циклу фахових дисциплін професійної та практичної підготовки студентів хімічного факультету ступеня освіти «Магістр» за освітньою програмою «Біохімія». Мета курсу – формування у студентів сучасних уявлень про особливості будови, молекулярної організації та функціонування про- та еукаріотичних клітин; біохімічних механізмів проліферації; регуляції клітинного циклу; адаптації клітин до умов мікрооточення; механізмів міжклітинної комунікації. Особливий акцент робиться на вивченні методів дослідження клітин і клітинних структур.

Навчальним планом дисципліни передбачено проведення лекцій і практичних занять, спрямованих на розвиток і поглиблення теоретичних знань шляхом вирішення конкретних завдань, а також формування навичок самостійної дослідницької роботи, обробки і критичного оцінювання результатів.

Організація практичних занять з дисципліни включає виконання студентами наступних видів завдань:

- опрацювання лекційного матеріалу, робота з підручниками та науковими публікаціями за відповідною темою;
- відповіді на контрольні питання;
- змальовування препаратів і схем;
- складання таблиць для систематизації теоретичного матеріалу;
- рішення задач і тестових завдань різного рівня складності;
- рішення ситуаційних задач (з професійним вмістом);
- підготовка доповідей і рефератів тощо.

Мета даної роботи полягає у розробленні завдань та ситуаційних задач до практичних занять з дисципліни за темами: «Основи клітинної теорії»; «Загальні принципи структурно-функціональної організації цитоплазматичної мембрани в еукаріотичній клітині»; «Структурно-функціональні особливості енергетичного апарату клітини»; «Структурно-функціональні особливості цитоскелету».

Приклад:

Тема практичного заняття: «Основи клітинної теорії».

Мета практичного заняття: засвоєння основних положень клітинної теорії; ознайомлення з будовою прокаріотичної та еукаріотичної клітини; порівняльний аналіз структурно-функціональної організації прокаріотичної та еукаріотичної клітини.

Обладнання і матеріали: схеми будови прокаріотичної та еукаріотичних клітин рослинного і тваринного походження.

Завдання 1. Змальовування схем будови прокаріотичної та еукаріотичних клітин рослинного і тваринного походження.

Завдання 2. Аналіз схем і заповнення таблиці «Відмінні ознаки будови прокаріотичних та еукаріотичних клітин».

Завдання 3. Аналіз будови еукаріотичних клітин з позицій системного підходу до їх структурно-функціональної організації, який включає опис функціональних апаратів клітини: (синтетичного, енергетичного, ендосомально-лізосомального, цитоскелету) і заповнення відповідної таблиці.

НОВЫЕ ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ХИМИИ*Егорова Л. М.*

Харьковский национальный автомобильно-дорожный университет

lilya15041935@gmail.com

Актуальной проблемой в современном образовании является смена информационно-репродуктивного подхода новыми педагогическими технологиями. В своей работе мы используем вместе с традиционными формами обучения и дистанционную поддержку. Дистанционная форма обучения предусматривает индивидуальное обучение каждого студента по разработанному для него плану. Интенсивность и продолжительность занятий студент может регулировать самостоятельно.

Основу процесса дистанционного обучения составляет целенаправленная и контролируемая интенсивная самостоятельная работа студента, который может учиться по индивидуальному расписанию, имея комплект средств обучения. В процессе изучения учебного материала студент может получать консультации или обмениваться информацией с преподавателем, но большую часть времени студент работает непосредственно с электронными учебниками, конспектами лекций, методическими указаниями. Поэтому для успешного обучения очень важно чтобы в электронных пособиях выполнялись принципы доступного изложения материала, наглядности, удобство интерфейса, возможности самоконтроля и т. д.

Для эффективного обучения химии разработан дистанционный курс «Общая химия» в среде Moodle для студентов-заочников. В этом курсе в доступной для самостоятельного изучения форме изложены основные теоретические вопросы по химии в виде лекций и презентаций. Текст сопровождается графиками, формулами, таблицами, схемами, которые способствуют более легкому восприятию материала. В конце каждой темы есть тесты, ответив на которые студент может оценить степень изучения данной темы. Рассмотрены также примеры решения типичных задач по темам. По сравнению с традиционным учебно-методическим обеспечением достоинства электронного курса таковы:

- наглядность и информативность учебного материала
- автоматизация и интенсификация труда педагога;
- возможность самоконтроля знаний по результатам изучения отдельных тем при автономной работе;
- хранение больших объемов информации;
- учет индивидуальных способностей студентов.

Для обратной связи со студентами преподаватель использует форумы, вебинары, чат, электронную почту, обмен вложенными сообщениями.

Итак, Moodle является динамической учебной средой, позволяющей реализовать основные методические принципы:

- Мотивационный потенциал;
- Большая степень интерактивности обучения;
- Возможность самоконтроля;
- Обеспечение наглядности;
- Доступность;
- Наличие постоянно активной справочной системы.

Все выше перечисленное помогает преподавателю решить главную задачу современного образования – формирование у студентов коммуникативной компетенции.

**КОМПЕТЕНТІСНИЙ ПІДХІД У ХІМІЧНІЙ ОСВІТІ – ВИМОГА
СЬОГОДЕННЯ***Кочерга Є. В.*

КВНЗ «Дніпровська академія неперервної освіти»

blago-2013@ukr.net

Система освіти України, у тому числі й хімічна, яка перебуває на шляху реформ, вимагає від її учасників зміни «ЗУНівського» підходу на компетентнісний. Компетентнісний підхід передбачає наявність у фахівця не лише знань, умінь та навичок у певній сфері діяльності, а й мотивацію до обраної діяльності, певні особистісні риси, які б сприяли ефективній та творчій роботі за обраним напрямком.

Певна частина випускників хімічних спеціальностей після закінчення вузів залишаються працювати у системі освіти вчителями та викладачами. І для них особливо актуальним є компетентнісний підхід, оскільки вони мають розвивати та удосконалювати компетентності не лише в собі, а й формувати їх у підростаючого покоління.

Темп збільшення та поширення інформації у наш час настільки швидкий, що необхідно не просто передавати знання, а вчити здобувати знання. Крім того, наявність великої маси знань зовсім не гарантує успіх у професійній діяльності, адже на ринку праці цінується вміння використовувати знання на практиці, пристосовувати їх до реалій сьогодення. Процеси глобалізації передбачають уміння здобувати знання не лише в межах країни проживання. Мережа Інтернет надає можливість доступу до знань з усього світу. Тобто, знайти необхідну інформацію – це зовсім не проблема, а важливо вдало застосувати здобуті знання та інформацію.

Важливість компетентнісного підходу саме в хімічній освіті визначається ще й тим, що на сучасному етапі розвитку суспільства саме хімії належить провідна роль у його розвитку. Адже цифровий світ існує завдяки досягненням хімії, поряд з фізикою та математикою, рівень розвитку яких дає можливість фізичного створення, зберігання та передавання інформації. Тобто, без цих природничих наук фізично не можливе існування інформаційного світу.

Компетентнісний підхід у хімічній освіті передбачає формування та розвиток як предметної (хімічної), так і ключових компетентностей.

Власне хімічна компетентність передбачає розвиток хімічного мислення – розуміння взаємозв'язку матеріальних об'єктів реальної дійсності за схемою: структурна організація речовини – фізичні та хімічні властивості – знаходження в природі та взаємоперетворення – застосування – вплив на навколишнє природне середовище; хімічної грамотності – вміння записувати хімічні формули та рівняння, розуміти їхню суть та здійснювати за ними необхідні обрахунки; вміння знаходити необхідну хімічну інформацію та використовувати її; вміння поводитися з хімічними речовинами, здійснювати з ними певні перетворення і прогнозувати результати цих перетворень; хімічної відповідальності – усвідомлення ролі різноманітних хімічних речовин і матеріалів у життєдіяльності людини та в існуванні довкілля (О. Гулай, 2013).

До ключових компетентностей відносяться такі, як спілкування державною (і рідною у разі відмінності) мовою, спілкування іноземними мовами, математична компетентність, основні компетентності у природничих науках і технологіях, інформаційно-цифрова компетентність, уміння вчитися впродовж життя, ініціативність і підприємливість, соціальна та громадянська компетентності, обізнаність та самовираження у сфері культури, екологічна грамотність і здорове життя.

Отже, важливість компетентнісного підходу в хімічній освіті є беззаперечною. Усі компетентності взаємопов'язані та повинні розвиватися лише системно та безперервно.

РОЗРОБКА МЕТОДИЧНОЇ ЛІТЕРАТУРИ ДО КУРСУ «КРИСТАЛОХІМІЯ»*Норик О. А., Борисова К. В., Розанцев Г. М.*

Донецький національний університет імені Василя Стуса

knorik456@gmail.com

В останні роки постійно поповніться і поновлюються бази кристалографічних даних, завдяки відкриттю нових речовин та дослідженню їх структури. В такому випадку, для того, щоб студенти мали доступ до нової інформації, треба постійно оновлювати та доповнювати матеріалом, як лекції, так і практичні заняття. Таким чином для розвитку основних компетенцій, треба не тільки додавати нові форми роботи зі студентами, а й пропонувати їм для засвоєння, поряд з традиційним матеріалом, ще й сучасний, навіть якщо він на сьогодні є проблемним.

Навчальна дисципліна «Кристалохімія» є базовою нормативною дисципліною для студентів хіміків проте, існує потреба у такому, ще не проведеному дослідженні, яке б узагальнило, систематизувало існуючі відомості з даної дисципліни.

Об'єктом дослідження є «Кристалохімія» як самостійна навчальна дисципліна, а основними задачами було: дослідити основні аспекти методичної літератури до курсу, вибрати методичну літературу до даної навчальної дисципліни, яка б дозволила досягти кращого засвоєння студентами закономірностей ближнього і дальнього порядків елементів у твердому стані, залежно від їх властивостей, формувало чітке уявлення про елементи симетрії, розподіл кристалів за сингоніями, забезпечило володіння міжнародною символікою, розуміння і трактовку символів просторових груп симетрії кристалів, знання основних законів кристалографії, категорій цієї дисципліни та вміння застосовувати на практиці ці знання при встановленні формул симетрії кристалічних багатогранників, побудові стереографічних проекцій елементів симетрії та граней кристалічних багатогранників, розгляді моделей кристалічних структур речовин тощо.

Після виявлення особливостей розробки такого навчально-методичного комплексу з навчальної дисципліни, було сформовано курс основною частиною якого є з лекції, практичні завдання, методики виконання лабораторних робіт, завдання для самостійної роботи. Теми, що складають основну частину курсу, було доповнено задачами, тестовими завданнями для перевірки та закріплення знань.

Для розв'язання поставлених завдань були використані наступні методи дослідження: теоретико-критичний аналіз літератури з теми дослідження; зіставлення, узагальнення і синтез здобутої інформації.

На основі даного дослідження була створена методична література до курсу «Кристалохімія», що дозволяє розширити доступ студентів до нової інформації, узагальнити та систематизувати існуючий матеріал. Робота може бути використана студентами ВНЗ для підготовки до семінарських занять, також може бути використана викладачами для проведення лекції, практик.

АЛХІМІЧНА ДОБА В УКРАЇНІ

*Родигін К. М.*¹, Родигін М. Ю.²¹Донецький національний університет імені Василя Стуса²Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України
rodygin@ukr.net

У своїй історичній генезі хімія пройшла через певні закономірні етапи розвитку. Одним з них є алхімічний, протягом якого відбувалися розвиток і поєднання теоретичних та практичних складових явища. Важливість цього періоду підкреслював академік П. Вальден, зауваживши на прикладі Московії-Росії, що відсутність алхімічного періоду розвитку хімічної науки на теренах певної країни означає вторинний та неповноцінний характер такого розвитку. Постає закономірне питання: чи мав місце розвиток алхімії на теренах України?

Алхімічний слід в Україні не обмежується символом солі в гербі міста Бахмут, а має багато інших проявів. Так, у книзі Кирила Транквіліона-Ставровецького «Перло многоцінне» (1646 р.) згадано «... нове алхімство – дива гідне діло!». Алхімія не є дивиною для автора й характеризується як соціально значущий прояв премудрості. Символічне визнання української алхімії міститься у книзі Міхаеля Майєра «*Symbola aureae mensae duodecim nationum*» (1617 р.), де до переліку «12 стовпів алхімії» входить «анонімний Сармат», що зокрема репрезентує українські (руські) землі. Про вкоріненість феномена свідчить цикл легенд про львівського алхіміка XVI – XVII ст. Григорія Лискевича.

Вочевидь, за тих часів у Львові склалася атмосфера сприятлива для алхімічної діяльності. Принаймні, звідти у 1578 р. король Стефан Баторій направив місцевого міщанина Бояновського до відомого алхіміка Леонарда Турнессера у справі виготовлення ексклюзивного антидота. Історія зберегла імена алхіміків-іноземців, що практикували у Львові, – Ієроніма Ройснера (*Hieronimus Reussner aus Lemberg*), Леонарда де Маурперга, Ієроніма Ведельського (Віттенберга). Збереглися відомості й щодо місцевих алхіміків. У 1671 р. королем Міхалом Корибутом-Вишневецьким було дано дозвіл на аптекарську діяльність братам-алхімікам Емануелю та Самуелю Леві. Причетними до алхімічної діяльності були численні представники роду Алембеків (Альнпеків). Проте найвідомішим львівським алхіміком є автор трактату «*Sekrety z ogrodu philozowskiego, zebrane prawdzsiwe o kameniu blogoslawionim philozowskim z wykladem pisane roku Panskiego 1626*» Андрій Торосович, що тримав лабораторію на вул. Вірменській. Вірменська складова української алхімії простежується вглиб віків принаймні до XIV ст., коли до Львова на навчання в авторитетного вірменського алхіміка магістра Дмитра приїздили Бартоломій з Праги та Леонард де Маурперг із Кракова.

В українських джерелах алхімія фігурує й у XVIII ст. Так, у творчості філософа Григорія Сковороди неодноразово згадано як власне алхімію, так і її засадниче поняття філософський камінь. Це є закономірним, оскільки явище алхімії за тих часів в Україні було поширеним, про що свідчить фраза з опису алхімічної лабораторії Северина Жевуського у Підгорецькому замку: «безрезультатні експерименти деяких значних панів XVIII ст.». Яскравим прикладом такого типу алхіміків є Тадеуш Грабянка, що обладнав лабораторію у своїх подільських маєтностях, де принаймні до 1784 р. працював над пошуками філософського каменя і приймав численних гостей-герметиків, зокрема, за легендами, самого графа Каліостро (з яким він навіть ототожнюється у деяких енциклопедіях).

Таким чином, сукупний аналіз наведених проявів алхімії дозволяє стверджувати її існування та розвиток на теренах України щонайменше протягом XVI – XVIII ст.

ХІМІЧНА ОСВІТА В ТЕХНІЧНОМУ ВНЗ*Свашенко Ю. В.*, Даценко В. В.Харківський національний автомобільно-дорожній університет
chemistry@khadi.kharkov.ua

Реформування системи професійної освіти на сучасному етапі не може не торкнутися і загальноосвітніх предметів природничо-наукового циклу, в тому числі хімії, які є невід'ємною частиною професійної підготовки. Проведене в останні роки на кафедрі хімії Харківського національного автомобільно-дорожнього університету тестування студентів першого курсу, приступають до вивчення хімії, показало відсутність базових знань з хімії у 20–30 %. Для ліквідації прогалин у шкільній освіті на кафедрі хімії ХНАДУ 2–3 рази на тиждень протягом семестру проводяться загальні та індивідуальні консультації для студентів. На цих заняттях студенти досить швидко відновлюють свої прогалини знань з хімії, без яких неможливо подальше вивчення дисципліни.

Вивченню курсу дисципліни «Хімія», а також для організації самостійної роботи студентів допомагають методичні матеріали кафедри, розроблені з урахуванням диференційованого підходу в навчанні. Конспект лекцій містить основні і додаткові теоретичні відомості для успішного навчання студентів. Для ознайомлення студентів з зазначеними навчально-методичними розробками, вони містяться на електронному освітньому порталі ВНЗ.

Головним завданням навчання хімії, як фундаментальної дисципліни в технічному ВНЗ, є формування професійних якостей майбутнього фахівця. Курс хімії в ХНАДУ створено з урахуванням найбільш важливих тем і питань, необхідних у подальшій професійній діяльності. Оскільки досліджуваний матеріал краще засвоюється при проведенні експериментальної роботи, особливу увагу приділено проведенню лабораторного практикуму. При виконанні лабораторних робіт студенти знайомляться з методиками проведення аналізів, правилами обслуговування лабораторного устаткування і умовами проведення хімічного експерименту.

Для наукового становлення майбутнього фахівця в ХНАДУ на перших курсах навчання були організовані курси робітничих професій, що функціонують в якості однієї з форм науково-дослідних робіт студентів і безпосередньо пов'язані з перспективами майбутньої спеціалізації. На курсах студенти мають можливість познайомитися з методами наукового дослідження, зі способами збору матеріалу, з прийомами його обробки, дізнатися про вимоги до наукового апарату дослідження й до оформлення змісту.

Оволодіння практичними навичками наукового дослідження не передбачено навчальним планом, студенти цікавляться ними виключно для саморозвитку, в силу своїх інтересів і перспектив. Основною формою проведення наукової роботи в ХНАДУ, яка виконується в позаурочний час, є залучення студентів до виконання наукових досліджень, що проводяться кафедрами за держбюджетною і госпдоговірною тематикою. Прикладна спрямованість робіт дозволяє розвивати у студентів не тільки якості вченого, а й винахідника.

Широке визнання в ХНАДУ отримали наукові студентські семінари, мета яких полягає в оволодінні методикою і технологією наукового дослідження, набуття навичок спілкування та комунікативної культури. На засіданнях семінарів разом з науковими співробітниками кафедри студенти по черзі виступають з доповідями про результати своїх перших наукових досліджень, активно обговорюють підходи, методики й технології їх виконання.

**ЖОВЧ ЯК ОБ'ЄКТ ЛАБОРАТОРНОЇ ДІАГНОСТИКИ
ПРИ ВИВЧЕННІ ДИСЦИПЛІНИ «КЛІНІЧНА БІОХІМІЯ»**

Скубенко К. Г., Лаховець К. М., Лесишина Ю. О.

Донецький національний університет імені Василя Стуса
skubenko.k@donnu.edu.ua

Навчальним планом підготовки студентів хімічного факультету ступеня освіти «Магістр» за освітньою програмою «Біохімія» передбачене викладання дисципліни за вибором студента «Клінічна біохімія». Одним із завдань лабораторного практикуму цієї дисципліни є дослідження хімічного складу організму, органів, клітин і субклітинних структур як в нормі, так і при патології.

Основними біологічними об'єктами, що використовують для проведення подібних біохімічних досліджень, є кров і сеча. Проте поява нових методів, підвищення їх чутливості та специфічності сприяє постійному розширенню об'єктів біохімічного аналізу, тому в цілях діагностики все ширше використовують й інші біологічні рідини: слину, піт, ліквор, жовч тощо.

Жовч, як один з найважливіших травних секретів, є продуктом складної і багатогранної діяльності клітин печінки, дослідження якого дозволяє одержати широку інформацію про стан гепатоцитів і всієї гепатобіліарної системи. Поглиблене вивчення фізико-хімічних властивостей жовчі необхідне для розробки нових способів діагностики, лікування та профілактики захворювань жовчовивідної системи, особливо жовчнокам'яної хвороби.

Лабораторне дослідження жовчі включає визначення її фізичних властивостей (колір, прозорість, консистенція, реакція; відносна густина) та хімічного складу. При хімічному дослідженні визначають вміст жовчних кислот, білірубину та холестерину, використовуючи при цьому ті ж самі методи, що і при роботі з сироваткою крові. В біології та медицині також проводяться дослідження поверхнево активних властивостей жовчі, її здатність до міцелоутворення та солюбілізації.

Мета даної роботи полягала у розробці серії лабораторних робіт з теми «Фізико-хімічні властивості жовчі як об'єкту лабораторної діагностики»; опрацюванні класичних експериментальних методик визначення кількісних характеристик жовчі, їх вдосконаленні з урахуванням матеріально-технічних можливостей навчальної лабораторії; набуття навичок роботи з біологічними об'єктами тощо.

Як об'єкт дослідження використовували препарат «Жовч медична концентрована» («Фарма Черкас», Україна).

В ході роботи було вивчено основні фізико-хімічні показники жовчі в нормі та при патології; досліджено значення біохімічного аналізу жовчі для оцінки функціонального стану печінки та організму в цілому; проаналізовано різноманітні методи і методики дослідження жовчі; опрацьовано лабораторні методики визначення специфічних компонентів жовчі та її поверхнево активних властивостей.

В результаті були розроблені методичні рекомендації до виконання лабораторних робіт «Визначення відносної густини жовчі», «Спектрофотометричне визначення загального вмісту жовчних кислот за реакцією Петтенкофера в модифікації Я. І. Карбача», «Визначення поверхневого натягу жовчі сталагмометричним методом», «Визначення критичної концентрації міцелоутворювання жовчі».

WORK WITH GIFTED CHILDREN: "CHEMICAL OLYMPIADS"*Fazliev S. A.*Tashkent Pharmaceutical Institute, Tashkent, Uzbekistan
sunnnatullofazliyev@mail.ru

Finding and "extracting" gifted children in a particular field of science has been one of the difficult problems and to develop new methods or to improve the existing are still considered relevant. At the same time, an important part of the requirements imposed by such methods is the creation of a system for working with gifted children. The Olympiad is a method that has been tested for centuries and performs all the necessary functions related to the work with gifted children: to find talented students, to raise the knowledge of teachers, parents, leaders and chairmen of the Olympiad, to motivate future geniuses, to reward them for worthy knowledge, to draw the interest of others surrounding towards certain subjects and etc.

Modern chemical Olympiads are significantly different from the Olympiads of the last century, even 10 years ago the level of tasks and the volume of material were several times smaller than now. In addition to the national Olympiads, the International Mendeleev Chemistry Olympiad (IMChO), the International Chemistry Olympiad (IChO) and various regional, commemorative and even commercial Olympiads among schoolchildren in chemistry are distinguished. These Olympiads have already crossed the half-century of life and work very reliably. Here evaluated students' both theoretical knowledge and practical experience. International chemical Olympiads every year take place in different countries and thus this event performs a culture-educational, educational and touristic role and unites young people from all over the world.

Further in higher education students check their knowledge at the state level Olympiads. Unfortunately, student chemistry Olympiads are not as developed as mathematical Olympiads. In I.R. Iran, annually held the International Student Olympiad in Chemistry, which involves representatives of only 4 states (!), there are also Internet-Olympiads, many of which are commercial. But the prospects in the Internet Olympiad are high, since the geography of the Olympiad will be so extensive, children only in Antarctica cannot participate, as there is no Internet. Less expenses in organization of the Olympiad also stimulate this variety. Internet education is now very popular, but in the case of the Olympiad, we will lose publicity and openness both in the process of solving problems, and in evaluating them. Besides, it would be impossible to conduct practical tasks, which are an indispensable part of this magic subject through internet.

The current tasks in the chemical Olympiads are more interdisciplinary. Complex questions in them relate to a large extent with other natural objects, such as physics, biology, geology, geography, mathematics, thereby differing from their inter disciplinary predecessors, which are inferior to modern assignments for the ability to develop the creativity and outlook of students.

Particular attention is drawn to individual or team Olympiads in several subjects, often natural sciences. It seems that the differentiation between the sciences has gone very deep, but still possessing good knowledge of the natural sciences for schoolchildren who have not yet reached the boundaries of an acute division of sciences is not difficult. In future and even now, such specialists are much appreciated, because a physicist-chemist is stronger than a simple chemist, not two, but three times.

The last and very "fashionable" kind of tasks for chemical Olympiads are situational tasks that are very closely related to everyday life and are mainly used for beginners in this subject to stimulate their interest in the new discipline. It is possible to use such tasks in Student Olympiads, even in university exams. This will increase a practicality of the Olympiad, gives a chance to get a lot of experience required in real life, at work.

**CHEMISTRY OF POLYMERS
AND COMPOSITES /
ХІМІЯ ПОЛІМЕРІВ
І КОМПОЗИТІВ**

**GEL-LIKE FORMS OF DRUGS ON THE BASIS OF SOLUTIONS
OF SUCCINAMIDE OF CHITOSAN WITH GLYCEROL***Bazunova A. A.*

Bashkir State University

mbazunova@mail.ru

A very serious problem is creation of gels for medical purposes with a given set of properties based on naturally occurring polymers such as chitosan and its derivatives, which have biocompatibility and absence of toxicity. Polymeric gels may be used as transport forms of drugs for wound healing coating and implantable prosthetic devices.

Elastic and plastic (rheological) properties such as viscosity, yield stress, viscous modulus, elasticity modulus, and thixotropy show a number of indicators and quantitative parameters characterizing the processes associated with the production and use of polymer gels. In case of development of polymeric dosage forms, rheological parameters affect the indicators such as ease of use and dosing.

We chose the approach to the creation of viscoelastic systems based on succinamide of chitosan (SHTZ) without crosslinking agents, comprising the formation of an additional network of physical links by introducing a low molecular weight modifier – glycerol. The selection of these data modifiers for the regulation processes of gelation of SHTZ solutions is due to the fact that glycerol is capable of forming intermolecular hydrogen bonds with macromolecules of polysaccharides.

We studied rheological behavior of the solutions of SHTZ in the mixture of water-glycerol of various volumetric ratios and found out the following results. The addition of glycerol in SHTZ–water is accompanied with a significant increase in viscosity almost in the entire range of studied polymer concentrations. Formation of mesh links in the presence of glycerol begins significantly at lower concentrations of SHTZ than in the case of aqueous polymer solutions. For example, when we take glycerin (20 % v.) we observe a significant increase of the dynamic viscosity with 4.0 wt % SHTZ concentration compared to the viscosity of aqueous polymer solutions, but if we take glycerin (30 % v.) we get the same result with 3.0 wt % SHTZ concentration.

With 3.0 wt % SHTZ concentrations at ratios of water : glycerol (v/v) 70:30, the elastic modulus of the studied systems is greater than the viscosity modulus and the systems become elastic and viscous.

Thus, the structure of SHTZ in the solution is accompanied by the formation of an additional network of physical links, nodes which aggregate SHTZ macromolecules formed in a mixed solvent of water–glycerol. It promotes earlier formation of viscoelastic properties that ultimately leads to the gelation at lower polymer concentrations than in the case of SHTZ solutions without glycerol addition. The resulted gelled systems possess a good biocompatibility with hematological indicators, and therefore they can be used as polymeric forms of drugs.

THE COMPUTER SIMULATION OF CONSTANT PHYSICAL FIELDS

*Bardadym Y.¹, Sporyagin E.²*¹Institute of Macromolecular Chemistry of NAS of Ukraine, Kiev, Ukraine²Oles Honchar Dnipro National University, Dnipro, Ukraine

ferocen@i.ua

The use of physical fields is quite cheap and safer method. Functional materials with distinct physical and chemical properties can be obtained. The use of mathematical (computer) simulation plays an important role along with experimental research methods. Modeling using digital computers is one of the most powerful means of research. It enables to calculate and simulate experiments at the design stage. Application of modeling allows you to understand how the real object is constructed, its structure, basic properties, laws of development and interaction with the surrounding world, learn to manage the object (or process), to determine the optimal ways of managing it for given goals and criteria, as well as to predict the direct and indirect effects of the implementation of the specified methods and forms of influence on the object. Therefore, this work is devoted to the study of the effect of external permanent magnetic or electric fields on the structure, thermophysical, dielectric properties of epoxy polymers and their composites containing metal oxide and polyaniline.

Samples of composites were formed from epoxy resin ED-20, and triethylenetetramine company "Fluka". Powder cadmium oxide company «Merck Chemicals» and polyaniline were used as fillers. Polyaniline was synthesized by the method. The content of metal oxides was 3 vol. % and polyaniline – 1 vol. %. Samples of composites were subjected to curing with different conditions. The influence of constant magnetic and constant electric fields was $2 \cdot 10^5$ A/m and $1.5 \cdot 10^4$ V/m respectively. All curing processes were done at 293–297 K for 24 hours. Then all polymeric samples were carried out temperature stabilization at 333 ± 2 K for 24 hours.

System studies of structure, thermophysical, thermomechanical and dielectric properties of composites filled with diamagnetic or paramagnetic metal oxides formed under the influence of external constant physical fields were carried out. Patterns of connection between the structure and the physical and mechanical properties of epoxy composites were first established. This makes it possible to purposefully influence external physical fields on the process of solidification of composites in order to obtain materials with a certain complex of functional properties. The introduction of inorganic filler causes the epoxy polymer to dissolution of the structure and reduces the glass transition temperature of the epoxy composite. The estimation of the influence of constant physical fields on the tangent angle of the dielectric losses of the filled composites shows that the orientation effect of constant physical fields increases the free volume of molecular chains of the chemical network of the epoxy polymer.

The ideas of constructing mathematical models and mechanisms of the influence of permanent magnetic and electric fields on epoxy polymers and their composites containing metal oxides and polyaniline have been developed. Based on the results obtained, the method of calculating an electromagnet and a cylindrical capacitor using the software «Elcut» has been improved. The obtained research results can be used as a scientific basis for finding optimal conditions for the formation of the structure of polymer composites filled with dispersed fillers, which will allow obtaining materials with the necessary pre-determined physical, mechanical, electrophysical and thermophysical properties. The obtained materials can be used for the production of thermistors, ion switches of current, elements of microelectronics and supercondensator, as well as coatings for various materials.

**ПОЛІМЕР-ПОЛІМЕРНІ КОМПОЗИТИ НА ОСНОВІ ВОДОРОЗЧИННИХ
ПОЛІМЕРІВ ТА ПОЛІАНІЛІНУ**

Білосорочка Е. О., Дутка В. С., Ковальський Я. П.
Львівський національний університет імені Івана Франка
elsabilos@gmail.com

Полімер-полімерні композити (ППК) на основі електропровідного полімеру поліаніліну (ПАНІ) та водорозчинних полімерів володіють універсальними властивостями, які дозволяють застосовувати їх у багатьох електронних пристроях та сенсорах.

Нами одержано полімер-полімерні композити поліаніліну з діелектричними матрицями: полівініловим спиртом (ПВС), поліметакриловою кислотою (ПМАК) та кополімером стиролу з малеїновим ангідридом (СТМА).

Композити отримували шляхом окиснювальної поліконденсації аніліну за наявності пероксидисульфату амонію у водних розчинах в присутності відповідного полімеру та хлоридної кислоти. Одержані кінетичні криві поліконденсації мають S-подібну форму, що свідчить про автокаталітичний характер процесу. На першій стадії процесу відбувається формування активних частинок, які ініціюють процес росту макромолекул ПАНІ. На цій стадії відбувається також утворення комплексів між ланками полімерів. Після проведення окислювальної поліконденсації аніліну відповідні ППК виділяли та досліджували їхні фізико-хімічні параметри.

Важливою характеристикою ППК є електропровідність. Нами була досліджена електропровідність отриманих композитів і показано, що зростання вмісту діелектричної матриці в ППК призводить до зменшення електричної провідності.

Вивчено морфологію синтезованих ППК. Сформовані композити мали вигляд склоподібних областей, в яких проглядалися частинки ПАНІ.

Дослідження термомеханічних показали, що присутність поліаніліну суттєво впливає на температуру склування полімерів. Для композитів ПАНІ-ПВС збільшення вмісту електропровідного полімеру призводить до зростання температури склування, а у випадку композиту ПАНІ-СТМА – температура зменшується. Вказані закономірності свідчать про значний вклад взаємодій між макромолекулами ПАНІ та досліджуваних водорозчинних полімерів.

Між макромолекулами ПАНІ та ПВС, ПМАК, СТМА відбувається сильна міжмолекулярна взаємодія, яку було підтверджено методом ІЧ-спектроскопії.

Проведені квантово-хімічні обчислення для макромолекул ПАНІ з різною кількістю ланок аніліну вказують на те, що ПАНІ може перебувати у багатьох конформаційних станах. Знайдено теплоти утворення макромолекул з різною кількістю ланок аніліну, потенціали іонізації макромолекул, а також їх об'єми та площі. Показано, що зі зростанням кількості ланок аніліну потенціал іонізації дещо спадає. Залежність теплоти утворення від кількості ланок аніліну є лінійною. Розраховані парціальні заряди на атомах нітрогену та зв'язаного з ним гідрогену свідчать про сильну поляризацію макромолекул поліаніліну. Поляризація макромолекул ПАНІ сприяє утворенню комплексів полімер-полімер. Одним з механізмів формування цих комплексів може бути утворення водневих зв'язків між макромолекулами ПАНІ та ОН-групами ПВС.

**ПОЛІМЕР/ПОЛІМЕРНІ ПЛІВКОВІ КОМПОЗИТИ
НА ОСНОВІ ЦЕЛЮЛОЗИ ТА ПОЛІАНІЛІНУ**

Бубіс М. Р., Журавецька І. М., Верещагін О. М., Стеців Ю. А., Яцишин М. М.

Львівський національний університет імені Івана Франка

maria_bubis@ukr.net

Гібридні полімер/полімерні плівкові композитні матеріали на основі неелектропровідних (НЕПП) та електропровідних полімерів (ЕПП), як от поліанілін (ПАН), є важливими матеріалами, які можуть мати цікаві застосування [1]. Серед НЕПП особливої уваги заслуговують штучні полімери, тобто природні полімери, як наприклад целюлоза (Цл), яка шляхом хімічного модифікування перетворена в діацетилцелюлозу, триацетилцелюлозу, карбоксиметилцелюлозу, метилгідроксietилцелюлозу, тощо. Функціоналізована целюлоза може слугувати матрицею носієм, або бути основним чи допоміжним компонентом гібридного композитного матеріалу з ПАН. Целюлоза є найбільш поширеним і поновлюваним природним полімером, який є невичерпним ресурсом для будь якої хімічної галузі. Поліанілін є найважливішим представником ЕПП який володіє надзвичайно великим розмаїттям морфологій частинок, високими: оборотністю, електропровідністю, хімічною стійкістю та екологічністю. Поєднання властивостей обох цих полімерів дозволить отримувати матеріали для електроактивних, адсорбційних та каталітичних покриттів, які можуть бути використані в оптичній сенсоріці, як електродні матеріали для високо продуктивних гнучких суперконденсаторів, тощо [2].

Для синтезів композитних плівок використовували водорозчинну целюлозу марки Pharmacoat 645 (Цл), анілін (Ан), амонійпероксодисульфат (АПС), пероксид водню (ПВ), цитратну кислоту (ЦК), дистильовану воду, полістирольні чашки Петрі та плівки з ацетату целюлози. Гібридні композитні плівки отримували шляхом випаровування розчинника з приготовленого розчину компонентів: Цл – Ан – АПС (ПВ) – H₂O. Утворення композитної плівки Цл/ПАН відбувалося в результаті окиснювальної полімеризації Ан АПС. Утворені плівки товщиною 10, 20 і 30 мкм мали зелене забарвлення властиве для емеральдинової солі поліаніліну – цитрату поліаніліну.

Досліджено вплив концентрації Ан та АПС на утворення гібридних композитних плівок Цл/ПАН. Встановлено, що оптимальними концентраціями компонентів для утворення прозорих зеленого забарвлення гібридних композитних плівок є концентрації аніліну та АПС, які не повинні перевищувати порогу коагуляції нанорозмірних молекулярних агрегатів поліаніліну, які утворюються в результаті окиснення аніліну амоній пероксодисульфатом.

Осадження плівкових гібридних композитів Цл/ПАН на целюлозну плівку підвищує механічну міцність утворених плівка-плівка композитів з високою адгезією гібридної плівки до плівки з целюлози - підкладки.

[1] Hnizdiukh Yu.A., Yatsyshyn M.M., Reshetnyak O.V. Chapter 12. Surface Modification of Polymeric Materials by Polyaniline and Application of Polyaniline/Polymeric Composites / Computational and Experimental Analysis of Functional Materials // O.V. Reshetnyak, G.E. Zaikov (Eds.) [Series: AAP Research Notes on Polymer Engineering Science and Technology]. – Toronto, New Jersey: Apple Academic Press, CRC Press (Taylor & Francis Group), 2017. – P. 423–472.

[2] Mo Z.-L., Zhao Z.-L., Chen H., Niu G.-P., Shi H.-F. Heterogeneous preparation of cellulose–polyaniline conductive composites with cellulose activated by acids and its electrical properties // Carbohydr. Polym. – 2009. – Vol. 75. – P. 660–664.

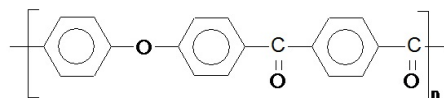
ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ УГЛЕПЛАСТИКОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭФИРЭФИРКЕТОНОВ

Веремейченко Н. А., Буря А. И., Набережная О. А., Томина А.-М. В.

Днепропетровский государственный технический университет
ol.burya@gmail.com

Многие ведущие химические, космические и авиастроительные фирмы мира разрабатывают всё новые термопластические композиционные материалы, находящие широкое применение в машиностроении. Одним из перспективных полимеров такого класса является полиэфирэфиркетон (ПЭЭК), обладающий высокой тепло-, атмосферо-, износо- и химической стойкостью, наряду с хорошей технологичностью при переработке.

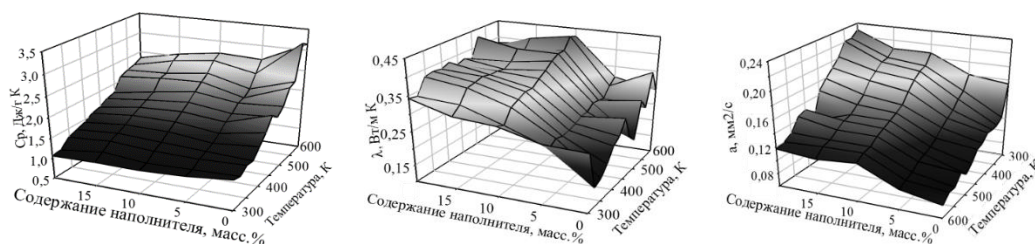
ПЭЭК – ароматический термопластичный полимер, состоящий из фениленовых циклов, карбонильных групп и атомов кислорода, с линейной полукристаллической структурой, высокими эксплуатационными и технологическими свойствами. Строение его звена:



Высочайшие механические и термические свойства углеродного волокна (УВ) общеизвестны, так в работе приведены результаты исследования углепластиков (УП) на основе ПЭЭК. Для получения композитов использовали РЕЕК (Vitrex), с характеристиками: кристалличность $\psi = 33\%$, плотность $\rho = 1,3 \text{ г/см}^3$, предел прочности на разрыв $\sigma = 103 \text{ МПа}$, модуль Юнга $E = 3,8 \text{ ГПа}$; углеродное волокно (0–20 масс.%) марки T700SC (Toray), имеющее плотность $\rho = 1,3 \text{ г/см}^3$, предел прочности на разрыв $\sigma = 4,9 \text{ ГПа}$, модуль Юнга $E = 230 \text{ ГПа}$.

УП получали смешением навесок исходных компонентов во вращающемся магнитном поле в присутствии ферромагнитных частиц, с дальнейшим таблетированием и формованием путем компрессионного прессования. Теплофизические характеристики композитов определяли на приборе NETZSCH LFA 457 в температурном интервале от 298–598 К и скоростью нагрева 5 К/мин на образцах $d = 25,4 \text{ мм}$.

Полученные данные для теплоемкости (C_p), теплопроводности (λ) и температуропроводности (a) соответственно приведены на рис.



Анализ результатов показал, что введение УВ положительно сказывается на тепло- и температуропроводности УП на основе ПЭЭК, в исследуемом диапазоне температур. Такое поведение, с одной стороны, связано с собственной более высокой теплопроводностью наполнителя, а с другой, согласно теории Лоз, с увеличением молекулярной массы цепи, из-за внедрения в неё различных атомов и соединений, что создает большое разнообразие физических связей и термических сопротивлений. Плавность скачка теплоемкости, скорее всего, объясняется увеличением кристалличности УП и появлением в его объеме кристаллитов с температурой плавления меньшей, чем у исходного полимера и их преждевременным плавлением.

Таким образом, теплопроводность УП повышается на 128 %, в сравнении с исходным полимером, что наряду с высокой термо- и износостойкостью углепластиков на его основе, описанной в других работах авторов, дает возможность рекомендовать его для разработки деталей различных конструкций в машиностроении, которые работают в экстремальных условиях.

ВПЛИВ АМІНІВ НА ДИСПЕРСНІСТЬ ЦЕМЕНТУ

Гарбуз А. С., Флейшер Г. Ю.

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут
імені Ігоря Сікорського»
Garbuznastjusha88@gmail.com

Кількість електроенергії, яка необхідна для виробництва тугоплавких і неметалевих силікатних матеріалів становить 110 кВт/т. Безпосередньо на помел клінкеру витрачається близько 40 % цієї енергії. Тому є актуальною проблема зниження енергозатрат при тонкому помелі цементу.

Результати процесу помелу залежать від багатьох факторів: режиму помелу, техніко-економічних характеристик млина, фізико-технологічних властивостей добавок і клінкеру.

Вирішення цієї проблеми можливе зміною режиму помелу, вдосконаленням конструкцій бронефутерівок трубних млинів, а також введенням ефективних хімічних добавок, які сприяють прискоренню процесу руйнування матеріалу, який розмелюється.

Для оптимізації процесу помелу широко використовують поверхнево-активні речовини, які вводять до помельного агрегату. Навіть у невеликій кількості (до 0,1 %) вони сприяють прискоренню процесу помелу, збільшенню питомої поверхні та частки найтоншої фракції.

В якості інтенсифікаторів помелу широко використовуються алканоламіни (триетаноламін, триізопропаноламін), гліколі (поліетиленгліколь, поліпропіленгліколь) та поверхнево-активні речовини, які зазвичай використовуються в якості пластифікаторів розчинових та бетонних сумішей (поліакрилати, полікарбоксилати та ін.).

Виходячи з вищевказаного, метою даної роботи було дослідження інтенсифікуючої дії хімічних добавок, які містять у своєму складі аміногрупу.

Для дослідження використовувалися у чистому вигляді триетиламін (ТЕА), диетилентриамін (ДЕТА) та етилдіізопропіламін (ЕДІПА) та клінкер виробництва ВАТ «Подільський цемент».

До лабораторного кульового млина було завантажено однакову кількість клінкеру, 3 % гіпсу та добавку у кількості 0,1 %. Помел відбувався протягом 1,5 години, після чого визначалася питома поверхня за допомогою приладу Т-3. Результати наведені у таблиці.

Таблиця. Питома поверхня цементу з добавками

Назва досліджуваного порошку	Питома поверхня, $S, \text{см}^2/\text{г}$
Цемент	3017
Цемент + ТЕА	3451
Цемент + ДЕТА	4418
Цемент + ЕДІПА	4086

З отриманих результатів експерименту можна дійти висновку, що усі вищеназвані добавки збільшують питому поверхню. Якщо розташувати добавки за зменшенням ефективності, отримаємо ряд: диетилентриамін – етилдіізопропіламін – триетиламін. Тому, можна стверджувати, що азотовмісні добавки можуть бути використані як інтенсифікатори помелу.

**ИССЛЕДОВАНИЯ НЕВЫСЫХАЮЩИХ ГЕРМЕТИЗИРУЮЩИХ
БУТИЛКАУЧУКОВЫХ КОМПОЗИЦИЙ***Гарькавий Д. Ю., Авраменко В. Л.*

Национальный технический университет "Харьковский политехнический институт",
г. Харьков, Украина
e-mail-avramenko@kpi.kharkov.ua

Целью данной работы является исследование влияния наполнителей и пластификаторов на адгезионно-когезионные свойства невысыхающих композиций на основе бутилкаучука.

Было изучено влияние технического углерода N330 и мелкодисперсного талька.

Зависимость прочности композиций от содержания техуглерода носит экстремальный характер. С увеличением дисперсности наполнителя когезионная прочность увеличивается. Также при увеличении содержания техуглерода в композиции наблюдается зависимость: когезионная прочность увеличивается, а адгезионная – снижается.

Введение минерального наполнителя – микроталька, не приводит к значительным повышением когезионной прочности композиции.

В результате испытаний, было установлено, что оптимальным наполнителем для обеспечения технологичности невысыхающих герметиков и хороших показателей по адгезионно-когезионным свойствам является техуглерод N330, а для создания высоконаполненных композициях (содержания наполнителя до 60 %) допускается мелкодисперсный тальк, который практически не ухудшает адгезионно-когезионную прочность композиции.

Одним из основных компонентом в герметизирующих композициях являются пластификаторы, которые используются для повышения адгезионных свойств и эластичности герметиков (особенно при низких температурах).

Введение пластификаторов в рецептуру неотверждаемых герметизирующих материалов, как правило, несколько уменьшает когезионную прочность, но значительно улучшает ее адгезионные свойства, эластичность и однородность герметизирующей композиции. Для испытаний были выбраны следующие пластификаторы: индустриальное масло И-20А (парафино-нафтенный пластификатор) и ароматический пластификатор ПН-6Ш.

Введение всех типов пластификаторов практически равномерно снижает вязкость герметизирующего состава, как при температуре переработки 140 °С так и при максимальной температуре эксплуатации 90 °С. Испытания показали, что ароматический пластификатор ПН-6Ш является оптимальным решением и обладает лучшими пластифицирующими свойствами, чем парафино-нафтенное масло И-20А.

По результатам проведенных исследований, было установлено влияние основных компонентов на свойства невысыхающих герметизирующих бутилкаучуковых композиций. Из наполнителей, предпочтительней использовать техуглерод N330, а для создания высоконаполненных композициях (содержания наполнителя до 60 %) допускается мелкодисперсный тальк, который практически не ухудшает адгезионно-когезионную прочность композиции. Также были проведены испытания по пластифицирующим компонентам в невысыхающих композициях на основе неполярного бутилкаучука и показана эффективность применения парафино-нафтенных и ароматических пластификаторов.

**ВПЛИВ ІНІЦІАТОРА НА КІНЕТИКУ РОЗКЛАДАННЯ КОМПЛЕКСНОГО
ГАЗОУТВОРЮВАЧА ДЛЯ ОТРИМАННЯ ПЕКОВИХ ПІН***Данило І. І., Костенков А. В., Крутько І. Г.*

Донецький національний технічний університет

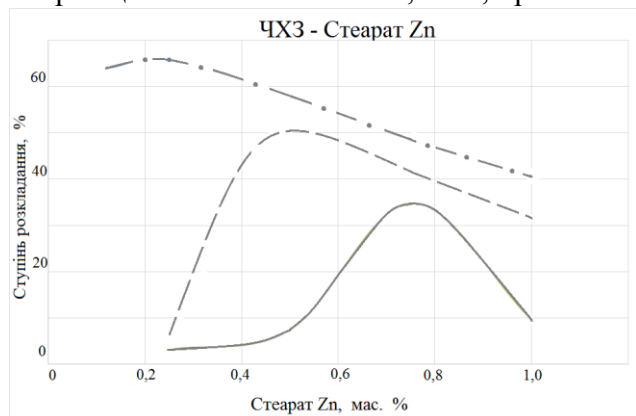
daniryna@ukr.net

Вуглецеві піни – гетерогенні системи, в яких дисперсійною фазою служить газ, а дисперсійним середовищем полімерна матриця. Основою для отримання вуглецевих пін є дорогі синтетичні та природні полімери. Модифікований кам'яновугільний пек володіє набором властивостей, що відповідають аморфним полімерам. Тому пек може використовуватися в якості полімерної матриці для отримання пекокомпозиційних матеріалів.

Речовини, які застосовуються для спінювання полімерів, називають газоутворювачами. Для спінювання модифікованого пеку застосовували хімічний газоутворювач – азодикарбонамід ЧХЗ-21 (ЧХЗ). При температурах 130–150 °С пек знаходиться в високоеластичному і в'язкотекучому стані, тобто має в'язкість, що забезпечує утворення піни. Для зниження температури розкладання ЧХЗ з 205 °С до 150 °С додавали ініціатори.

Одним з найважливіших параметрів в процесі спінювання полімерної матриці є швидкість та повнота розкладання газоутворювача. Кінетику розкладання ЧХЗ досліджували для різних типів і вмісту ініціатора в ізотермічних умовах. Температура досліджень змінювалась в інтервалі 130–150 °С. В якості ініціаторів використовували стеарат Zn, ПВХ та бінарний ініціатор суміш стеаратів Zn та Ca (співвідношенні Ст.Zn : Ст.Ca = 2 : 1). Кількість ініціатора у комплексному газоутворювачі (КГУ) варіювалась від 0,12 до 1,0 мас. частки по відношенню до 1 частки ЧХЗ.

При введенні ПВХ в якості ініціатора спостерігали найменший ступінь розкладання ЧХЗ при витримці 60 хв. та температурі 130, 140, 150 °С, який досягає максимальних значень 0,99 %. Використовуючи суміш стеаратів Zn та Ca, максимальний ступінь розкладання при T = 150 °С і витримці 60 хв. дорівнює 46,57 %. Максимальний ступінь розкладання ЧХЗ при витримці 60 хв. досягається при використанні в якості ініціатора стеарата Zn. Так при T = 130 °С максимальний ступінь розкладання при витримці 60 хв. становить 34,87 %, при T = 140 °С – 50,51 % і при T = 150 °С – 65,78 %.



На графіку наведено залежність ступеня розкладання КГУ складу ЧХЗ-ZnSt₂ в залежності від температури та кількості ініціатора. Спостерігаємо, що для кожної температури є екстремум, який відповідає максимуму ступеня розкладання КГУ. Зі збільшенням температури зменшується кількість

ініціатора стеарату Zn у кожній точці максимуму. Точки максимуму на кривих відповідають раціональним складам ЧХЗ-ZnSt₂ для кожної температури.

Таким чином встановлено, що найефективнішим ініціатором є стеарат Zn. Досліджено, що ступінь розкладання ЧХЗ залежить від температури та кількості стеарата Zn.

ГИДРАТНЫЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТНОЙ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ ЯНТАРЯ И ВЫСОКОДИСПЕРСНОГО КРЕМНЕЗЕМА*Елагина Н. В., Крупская Т. В., Туров В. В.*Институт химии поверхности им. А. А. Чуйко НАН Украины
krupska@ukr.net

Янтарь является природным органическим минералом, который давно и широко используют в нетрадиционной (прежде всего китайской) медицине как лекарственное средство для повышения иммунитета, лечения воспалительных процессов, ревматических болей и др. Основными веществами, которые могут обеспечить лечебный эффект служат янтарная кислота и некоторые виды терпенов.

Перспективным типом биоактивных добавок на основе природного янтаря могут стать его композитные системы с аморфным высокодисперсным кремнеземом. Целью настоящей работы было изучение взаимодействия измельченного янтаря и его композитной системы на основе кремнезема 1/9 с водой.

В качестве исходного материала использовались отходы от обработки янтаря, которые представляли собой порошок светло-желтого цвета, размер его частиц составлял от единиц до нескольких десятков микрон. Для приготовления композита порошок янтаря смешивали с нанокремнеземом А-300 с удельной поверхностью 285 м²/г. В результате формировался композитный материал, в котором янтарь равномерно распределялся по поверхности частиц кремнезема. В композитных системах размер видимых частиц янтаря уменьшается, а часть его переходит в иммобилизованное на поверхности кремнезема состояние, о чем свидетельствует слегка желтоватая окраска образца.

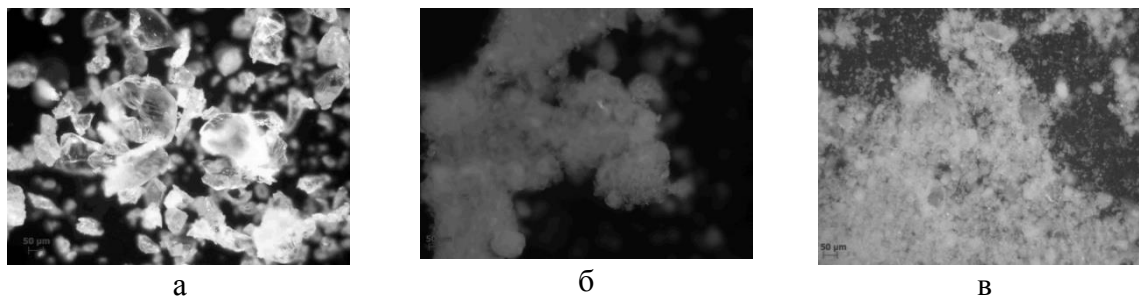


Рис. Микрофотографии исходного порошка янтаря (а), композитной системы янтарь/кремнезем (б) и порошка уплотненного кремнезема (в) в отраженном свете

Методами низкотемпературной ¹H ЯМР спектроскопии и термогравиметрии изучено состояние воды в гидратированном порошке янтаря и композитной системы янтарь/SiO₂ при их соотношении 1:9. Показано, что процесс газификации янтаря в составе композита завершается при температуре T = 550 °C, что почти на 100 °C ниже, чем для исходного янтаря. Вероятной причиной является уменьшение размера частиц янтаря при его иммобилизации на поверхности нанокремнезема. Обнаружено, что для системы янтарь/SiO₂ с увеличением концентрации воды от 100 до 280 мг/г увеличивается вклад от кластеров воды, радиус которых не превышает 1.5 нм. Показано, что в присутствии сильных кислот на границе с гидрофобной средой, часть воды, связанной с поверхностью композита янтарь/SiO₂ переходит в слабоассоциированное состояние, что может служить одним из признаков повышения биодоступности веществ, десорбируемых из композита.

Публикация содержит результаты исследований, проведенных при грантовой поддержке поддержанного фонда фундаментальных исследований по конкурсному проекту № 76.

**СИНТЕЗ И ХАРАКТЕРИСТИКА НАНОЧАСТИЦ АЛЬБУМИНА
И ПОЛИМОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ ДЛЯ ИММОБИЛИЗАЦИИ
ИХ ЛЕКАРСТВЕННЫМИ ПРЕПАРАТАМИ**

Жанарова Л. Ж., Жумагалиева Т. С., Тажбаев Е. М., Арыстанова Ж. Т.
Карагандинский государственный университет имени академика Е. А. Букетова
lyazzh@mail.ru

Результаты многочисленных исследований последних десятилетий, посвященных получению новых форм лекарственных препаратов, конструируемых на микро- и нано- уровне, свидетельствуют о преимуществе использования таких систем по сравнению с традиционными. Наносомальные формы лекарственных препаратов, синтезированные на основе биосовместимых и биodeградируемых полимеров, открыли новые возможности в целенаправленной доставке лекарств. Известен ряд конъюгатов полимер-лекарство в виде липосом и дендримеров, наночастиц и нанокапсул на полимерной основе, которые уже прошли клинические испытания и применяются в терапии раковых заболеваний и туберкулеза. В связи с этим, на протяжении последних десяти лет учеными Карагандинского государственного университета имени академика Е. А. Букетова проводятся исследования, направленные на получение новых лекарственных форм в виде полимерных наночастиц и нанокапсул. В результате исследований синтезированы наночастицы некоторых противотуберкулезных препаратов на основе природных и синтетических полимеров, в качестве которых испытаны сывороточный альбумин, полимолочная кислота, и полиалкилцианоакрилаты. Выбор полимерных матриц обусловлен их уникальными свойствами в качестве носителей лекарственных препаратов. Последующие исследования посвящены синтезу полимерных наночастиц, иммобилизованных противоопухолевыми препаратами и изучению их физико-химических характеристик. С этой целью нами получены пустые наночастицы полимолочной кислоты с удовлетворительными физико-химическими характеристиками; выявлены оптимальные условия синтеза полимерных наночастиц на основе полимолочной кислоты методом наноосаждения. Использование ацетона в качестве растворителя позволило получить пустые наночастицы полимолочной кислоты со средним размером частиц 290,1 нм и полидисперсностью 0,316. Выход наночастиц составил 76,6 %. Поверхностный заряд частиц, характеризующийся величиной дзета-потенциала, является одной из важнейших характеристик полимерных наночастиц, так как он не только определяет стабильность системы во времени, но и отвечает за распределение наночастиц в организме. Значение дзета-потенциала наночастиц полимолочной кислоты, определенное методом фотонной корреляционной спектроскопии, равнялось -35 мВ, что указывает на стабильность коллоидной системы.

В продолжение исследований нами получены пустые наночастицы альбумина методом десольвации. Результаты измерений, проведенных на наносайзере, показали, что средний диаметр наночастиц составил 151,2 нм, а значение полидисперсности свидетельствует об узком распределении частиц по размерам ($PDI = 0,094$), что отвечает требованиям полимерных носителей лекарственных препаратов. В этом случае определение значения поверхностного заряда частиц (-31 мВ), показало, что величина дзета-потенциала системы очень низкая и система стабильна во времени.

Таким образом, в результате проведенных исследований найдены оптимальные условия синтеза (рН среды, температура, растворитель; концентрации мономера, стабилизатора, десольватирующего агента и др.) полимерных наночастиц полимолочной кислоты и сывороточного альбумина, что дает возможность иммобилизации их противоопухолевыми препаратами.

**ФЕНОЛ-СЕЧОВИНО-ФОРМАЛЬДЕГІДНІ ОЛІГОМЕРИ
З АЗОТВМІСНИМИ ГЕТЕРОЦИКЛАМИ**

Золотаренко М. С., Варлан К. Є.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара
konstvarlan@meta.ua

Фенол-сечовино-формальдегідні олігомери (ФСФ) мають практичне значення. Зокрема, їх використовують у якості основи адгезивів, інгредієнтів захисних покриттів та композиційних матеріалів, зв'язувального сумішей для виготовлення ливарних форм тощо. Переважно для виробництва ФСФ використовують фенол, карбамід або його метилольні похідні. Разом з тим, хімічна промисловість випускає низку продуктів-похідних карбаміду, які за своєю будовою можуть розглядатися як вихідні мономерні для синтезу ФСФ з комплексом цінних властивостей. До таких сполук належать продукти конденсації карбаміду і гліюксалу. Наприклад, конденсацією цих реагентів у співвідношенні 2 до 1 відповідно у кислому середовищі отримують біциклічну сполуку – 2,4,6,8-тетраазабіцикло[3,3,0]октан-3,7-діон (гліюксальуреїд, гліюлурил), який є продуктом багатоцільового застосування. Гліюлурил та його похідні використовують у лакофарбовій промисловості та виробництві полімерних композиційних матеріалів у якості зшиваючих агентів, антипіренів, фото- і термостабілізаторів. Окремі галузі застосування гліюлурилу пов'язані з його біологічною активністю. Серед інших напрямів використання гліюлурилу можна відзначити рослинництво, газову хроматографію, відбілювання тканин, водоочищення, виробництво вибухових речовин. Разом з тим, у науковій і патентній літературі не знайдені дані про використання продукту конденсації карбаміду з гліюксалем та його похідних у виробництві смол на кшталт аміноальдегідних або ФСФ.

Виходячи з доступності та наявних цінних властивостей гетероциклічних сполук-продуктів карбамідо-гліюксальної конденсації, слід вважати доцільними дослідження, спрямовані на з'ясування можливості та умов синтезу олігомерів на основі фенолів і вказаних циклічних продуктів, а також визначення властивостей таких олігомерів. З огляду на вкрай низьку розчинність гліюлурилу, у якості об'єкта дослідження був вибраний більш перспективний, на наш погляд, продукт карбамідо-гліюксальної конденсації – 4,5-дигідрокси-імідазолідин-2-он. Його синтез проходив без будь-яких ускладнень за незначного надлишку карбаміду і рН 4,2–6,8. Але через технологічні складнощі стосовно виділення цільового продукту із реакційної суміші була розглянута можливість подальшого використання вищезначеного циклічного продукту *in situ*. Після проведення карбамідо-гліюксальної конденсації за вищенаведених умов, у реакційну масу додавали подвійний надлишок формальдегіду і каталітичну кількість луку до рН 8. За цих умов утворювався водний розчин 4,5-дигідрокси-1,3-біс(гідрокиметил)імідазолідин-2-ону. Показано, що отримана гетероциклічна сполука здатна за певних умов до конденсації з фенолом, резорцином та *n*-трет-бутилфенолом за рахунок хімічно активних метилольних груп. За попередніми дослідженнями отриманих конденсатів, вони мають ознаки новолачних або резольних фенольних смол та можуть знайти застосування у полімерних композиційних матеріалах спеціального призначення.

ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КОМПОНЕНТОВ В СИСТЕМЕ ХИТОЗАН-КАНАМИЦИН

*Зидиханова Л. Ф.*Башкирский государственный университет
zidihanovaliliya@mail.ru

Современные исследователи уделяют большое внимание изучению полимерных лекарственных соединений. Это связано с тем, что фармакологические препараты, связанные с полимерной матрицей, имеют пролонгированный терапевтический эффект и менее выраженную токсичность. В качестве матрицы для иммобилизации лекарственных препаратов перспективным представляется использование природного полисахарида – хитозана. В литературе имеются сведения о возможном медицинском применении хитозана. Однако сведения о комплексообразовании хитозана с лекарственными соединениями практически отсутствуют.

Целью данной работы является изучение комплексообразования хитозана с антибиотиком аминогликозидного ряда – канамицином (КМ). Продукты взаимодействия получали смешением растворов КМ и ХТЗ. В качестве растворителя для ХТЗ использовали уксусную кислоту различной концентрации (1, 10, 70 %). Концентрация ХТЗ в растворе составила 2 % масс. Константу равновесия комплексных соединений определяли, используя метод мольных отношений. Количество КМ, комплексносвязанного с ХТЗ определяли по данным элементного анализа.

Электронный спектр КМ при его концентрации 10^{-2} моль/л в 1 % уксусной кислоте характеризуются наличием одного максимума поглощения при 286 нм.

Данные ИК-спектра продукта реакции также свидетельствуют об образовании комплекса. Более того, анализ ИК спектров позволяет сделать вывод о том, что взаимодействие между ХТЗ и КМ происходит в большей степени при получении продукта реакции в 1 % уксусной кислоте, поскольку уменьшение интенсивности полос поглощения в спектрах продукта реакции, полученного из 70 % кислоте существенно меньше, нежели полученного из 1 % уксусной кислоты. Прямое определение количества КМ, комплексносвязанного с хитозановой матрицей, подтверждает данные ИК спектроскопии (табл.).

Таблица. Некоторые характеристики комплексов хитозан-канамицин

Концентрация уксусной кислоты в исходном растворе, г/дл	Содержание КМ в комплексе, % масс.	$K_{\text{равновесия}}$, л/моль	Степень протонирования ХТЗ, α
1	59,8	4098	0,61
10	42,8	779	0,52
70	39,6	348	0,09

О меньшем образовании водородных связей между ХТЗ и КМ при увеличении кислотности среды косвенно свидетельствует и изменение растворимости продукта взаимодействия. Изменение кислотности среды находит свое отражение и на константе равновесия.

Обнаруженное влияние концентрации уксусной кислоты на устойчивость и количество образуемого комплекса ХТЗ-КМ могут быть объяснены с учетом конформационных перестроек в макромолекулярном клубке хитозана.

Таким образом, исследование взаимодействия канамицина с хитозаном позволяет говорить о комплексообразовании между молекулой полимера и антибиотика за счет образования водородных связей, прочность и количество которых зависит от концентрации уксусной кислоты, используемой в качестве растворителя. Возможная причина влияния уксусной кислоты на прочность и количество комплекса – конформационные перестройки хитозана, обусловленные существенно различной степенью протонирования.

МОДИФІКОВАНІ ФЕНОЛЬНІ СМОЛИ ДЛЯ ПЛІВКОУТВОРЮВАЛЬНИХ ЗАХИСНИХ КОМПОЗИЦІЙ

Зубенко А. Е., Варлан К. Є., Северенчук І. М.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара
konstvarlan@meta.ua

Корозія металевих конструкцій, обладнання та споруд є великою проблемою: втрати від корозії становлять до 12 % річної виплавки металу. Беручи до уваги ці фактори, стає очевидним, що антикорозійний захист має величезне значення. Одним з найперспективніших антикорозійних композицій є засіб софеїзації R-101 на основі епокси-фенолформальдегідної смоли. Його висока плинність забезпечує виключно високу порозаповненість, завдяки чому він проникає в пори шару оксиду (іржі) і досягає незащепленого корозією металу, видаляючи при цьому кисень і вологу. Основний компонент засобу смола SMD 31144 є імпоротною сировиною, до того ж обсяги її світового виробництва скорочуються через посилення екологічного законодавства. Тому постає питання пошуку шляхів заміни імпоротної сировини, а разом з тим підвищення екологічності виробництва фенольних смол (ФС). З цією метою були проведені дослідження синтезу *пара-трет*-бутилфенолформальдегідної смоли (ТБФС) за спрощеною та екологічно прийнятною технологією. Раніше повідомлялося про можливість заміни імпоротної смоли на ТБФС в складі засобу софеїзації R-101. Для з'ясування особливостей і відмінностей будови ФС, синтезованих за різних умов, проведені спектральні дослідження. ЯМР H^1 спектри виявили відмінності у будові смол синтезованих за різних умов:

Водень	Лужне середовище		Кисле середовище	
	δ , ppm	q	δ , ppm	q
H-Ar (meta)	7.26–7.16 m 6.99 d	0.77 1.10	7.31–7.09 m 7.02–6.91 m	1.10 1.01
H-Ar (orto)	6.66 d	0.14	6.67 dd	0.93
-O-CH ₂ -Ar	3.80 s	1.09	3.77 d	0.94
Ar-CH ₂ -Ar	3.33 s	1.93	3.41 s 3.32 s	0.89 0.91
-C(CH ₃) ₃	1.34–1.01 m	9	1,33–1,06 m	9

* Значення інтенсивностей протонів нормовані до їх середньої кількості, що припадає на 1 фенольний складову ланку олігомерів.

На підставі порівняння інтенсивностей q хімічних зсувів ФС були зроблені висновки щодо будови смол: у кислому середовищі утворюються продукти (ТБФС-К), що складаються з ланцюгових молекул, які практично не мають кінцевих гідроксиметиленових ланок, а значна доля зв'язувальних містків між фенольними циклами є диметиленетерними структурами. У лужному середовищі утворюються продукти (ТБФС-Л) з олігомерними молекулами, що у якості кінцевих ланок мають переважно гідроксиметиленові групи, а фенольні цикли в молекулярних ланцюгах зв'язані переважно метиленовими містками.

Висунуті припущення щодо будови синтезованих ФС збігаються з даними ІЧ-спектроскопії: у ТБФС-К, на відміну від ТБФС-Л, спостерігається смуга $\delta_{\text{ор}}(\text{Ar-H}) = 829,1 \text{ cm}^{-1}$, що відповідає 1, 2, 4-заміщеним ароматичним структурам, а оптичні густини інших смуг, характерних для коливань зв'язків атомів Гідрогену з ароматичним ядром – 874,4 і 729,1 cm^{-1} суттєво зменшуються.

СМОЛИ НА ОСНОВІ МЕЛЕЙНОВАНИХ ФЕНОЛІВ ДЛЯ ЗАХИСНИХ КОМПОЗИЦІЙ*Зубенко А. Е., Варлан К. Є., Северенчук І. М.*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара
konstvarlan@meta.ua

Останнім часом спостерігається збільшення наукових публікацій, присвячених дослідженням процесів отримання, будови, властивостей та застосування фенольних смол. Це обумовлено поєднанням таких факторів як доступність сировини, простота технології виготовлення смол та переробки їх у вироби, здатність утворювати термодинамічно стабільні суміші з багатьма олігомерами і полімерами, високі експлуатаційні характеристики матеріалів на основі фенольних смол, придатність до модифікації. Через це фенольні смоли мають провідні позиції у сировинному асортименті для синтетичних матеріалів, які застосовують в багатьох галузях виробництва.

Важливою галуззю застосування фенольних смол залишається лакофарбова промисловість. Покриття, що у якості плівкоутворювальних компонентів містять фенольні смоли, поєднують підвищенні фізико-механічні, теплофізичні характеристики та хімічну стійкість. Серед захисних композицій, що містять фенольні смоли, відомі такі, що мають багатоцільове призначення. Їх однаково успішно використовують для захисту поверхонь машин і механізмів, конструкцій, технологічного обладнання, емностей для рідких середовищ, у тому числі питної води, алкогольних і безалкогольних напоїв. Але індивідуальні фенольні смоли не мають необхідних для створення якісних покриттів плівкоутворювальних властивостей. Через це в лакофарбових матеріалах використовують хімічно модифіковані фенольні смоли, або у комбінації з іншими плівкоутворювальними сполуками: епоксидами, алкідами тощо. Тому здаються доцільними дослідження, спрямовані на синтез нових модифікованих фенольних смол, які б поєднували власні корисні властивості з властивостями інших відомих плівкоутворювальних матеріалів, зокрема поліестерів та алкідних смол.

Виходячи з наведеного, були проведені комплексні дослідження, які полягали у синтезі похідних фенолу як мономерів для модифікованих фенолформальдегідних смол, оптимізації умов синтезу смол, придатних для використання у лакофарбових композиціях, та визначення перспективності використання останніх для отримання якісних покриттів. Похідні фенолу отримували шляхом моноестерифікації двохатомних фенолів малеїновим ангідридом. За результатами аналізу, отримували сполуки з 1 вільною карбоксильною групою. Конденсацію отриманих ацильованих фенолів проводили з формальдегідом (у вигляді формаліну) та параформом за різних співвідношень реагентів, в водному та органічному середовищах. Були з'ясовані суттєві технологічні особливості проведення окремих стадій процесу. Досліджені характеристики синтезованих олігомерів та вплив умов синтезу на властивості кінцевих продуктів: молекулярну масу, температуру краплепадіння, розчинність, сумісність з оліями та продуктами їх хімічної модифікації. Отримані дані використані для виготовлення дослідних зразків покриттів на основі композицій синтезованих модифікованих фенольних смол та продуктів хімічної модифікації соєвої олії. Покриття були прозорими з незначним забарвленням, мали глянцеvu поверхню, прийнятну адгезію до сталюї поверхні та показали стійкість до морської води.

**ПОЛІМЕРНІ МАТЕРІАЛИ НА ОСНОВІ МАЛЕЇНОВОГО АНГІДРИДУ
І ПОХІДНИХ КИСЛОТ РОСЛИННОГО ПОХОДЖЕННЯ***Зубенко А. Е., Варлан К. Є., Северенчук І. М.*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара
konstvarlan@meta.ua

Науково-технічний прогрес нерозривно пов'язаний з полімерним виробництвом. Виникнення та розвиток багатьох сучасних промислових галузей було б неможливим без полімерів і полімерних композиційних матеріалів. Однією з галузей, у якій полімери визначають рівень продукції, є сучасна лакофарбова промисловість. Основу плівкоутворювальних систем переважної більшості лакофарбових матеріалів (ЛФМ) складають синтетичні й штучні смоли та олігомерні сполуки. Вони, як власне і інші інгредієнти ЛФМ, є продуктами на основі синтетичної сировини, отримуваної з викопних вуглеводнів, запаси яких обмежені й невідновні. До того ж, виробництво плівкоутворювальних сполук та інших видів сировини для лакофарбової промисловості, а також виготовлення і застосування ЛФМ на їх основі, стикається з певними регуляторними обмеженнями, спрямованими на захист довкілля і здоров'я людини. Такий стан речей потребує комплексного підходу до вирішення задач із створення нових видів полімерних сполук для ЛФМ, який, зокрема, полягає у використанні відновлюваної сировини та застосування маловідходних технологій її переробки (тобто дотримання принципів «зеленої хімії»). Одним з провідних напрямків наукових досліджень в лакофарбовій галузі є розробка матеріалів на основі сировини рослинного походження.

З метою пошуку нових плівкоутворювальних полімерних матеріалів на основі відновлюваної сировини проведені дослідження процесу конденсації малеїнового ангідриду (МА) з похідними кислот рослинних олій, що містять дві гідроксиалкільні групи (КРГ). Технологія виготовлення КРГ розроблена на кафедрі ХТВМС ВНЗ «УДХТУ» під керівництвом проф. Червакова О.В. і може бути реалізована в умовах вітчизняного виробництва. Конденсацію МА з КРГ здійснювали за різних умов: температури, присутності або відсутності розчинника та кислотного каталізатора. З'ясовані найбільш прийнятні умови синтезу для одержання здатних для подальшої переробки олігомерів. Досліджені кінетичні закономірності процесу та вплив його особливостей на властивості отримуваних продуктів (консистенцію, кислотне число, молекулярну масу). У суміші з епоксидованою соєвою олією продукти конденсації МА з КРГ мають прийнятні плівкоутворювальні властивості, а захисне покриття, отримане нанесенням цієї суміші на поверхню вуглецевої сталі, показало стійкість до сольового розчину, органічних розчинників, та високу адгезію. Також виявлена особиста здатність синтезованих конденсатів до структурування у тонкому шарі під дією кисню повітря. Отримані результати вказують на можливість створення на основі конденсатів МА-КРГ лакофарбових матеріалів з високим вмістом сухого залишку, а також безрозчинних систем.

ДОСЛІДЖЕННЯ БАНДАЖНИХ ПОЛІМЕРНИХ КОМПАУНДІВ ВІДПОВІДНО ДО УМОВ МОНТАЖНИХ РОБІТ

Карандашов О. Г., Дегтярь В. В., Авраменко В. Л., Підгорна Л. П.

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»
nokturnok@gmail.com

При використанні склопластикових труб для транспортування різних хімічних середовищ під тиском та підвищеній температурі постає проблема їх з'єднання.

При монтажах епоксидних склопластикових труб у трубопроводі використовуються декілька типів з'єднання. Найменш дослідженим є бандажне з'єднання. Однією з особливостей такого типу з'єднання є неможливість використання універсального компаунду при різних умовах монтажних робіт. Мета даної роботи одержання компаундів, які придатні до застосування у різних умовах монтажних робіт.

Для дослідження обрано епоксидні олігомери BE-188, Етал45TZ₂ та Етал247 та твердники ПЕПА, Етал45TZ₂ та ЕТАЛ12 з яких отримано компаунди (див. таблицю).

Таблиця. Склад та рецептура компаундів

№ компаунду	Епоксидний олігомер		Твердник	
	Найменування	Кількість, м.ч.	Найменування	Кількість, м.ч.
1	BE-188	100	ПЕПА	10
2	ЕТАЛ 45TZ ₂	100	ЕТАЛ 45TZ ₂	50
3	ЕТАЛ 247	100	ЕТАЛ 12	28,5
4	BE-188	100	ЕТАЛ 45TZ ₂	48
5	BE-188	100	ЕТАЛ 12	26
6	ЕТАЛ 45TZ ₂	100	ПЕПА	10
7	ЕТАЛ 45TZ ₂	100	ЕТАЛ 12	28
8	ЕТАЛ 247	100	ПЕПА	9
9	ЕТАЛ 247	100	ЕТАЛ 45TZ ₂	45

Умови монтажних робіт були поділені на три типи: «Зима» з температурою оточуючого середовища 0–5 °С; «Осінь/Весна» – з температурою оточуючого середовища 10–15 °С; «Літо» з температурою оточуючого середовища 25–30 °С. Встановлені в'язкість та життєздатність кожного компаунду, температура та час тверднення, ступінь тверднення та вплив високої вологості повітря на неї. На підставі отриманих даних зроблені наступні висновки:

- у монтажних умовах «Зима» доцільно використовувати компаунд №3, тому що дана композиція має найнижчу в'язкість при 0–5 °С, а твердник ЕТАЛ-12 забезпечує процес тверднення без додаткового підігріву з високим ступенем тверднення;

- у монтажних умовах «Осінь/Весна» доцільно використовувати компаунди № 3, 5 через достатню для проведення робіт в'язкість, життєздатність і час тверднення;

- для монтажних умов «Літо» доцільно використовувати полімерні компаунди №2, 4 через те, що, на відміну від компаундів з твердником ЕТАЛ 12, ці компаунди мають життєздатність при 25–30 °С більш 30 хвилин, однак для отримання виробів з високим ступенем тверднення необхідний додатковий процес термообробки.

Не доцільно використовувати жодного полімерного компаунду з твердником ПЕПА у зв'язку з тим, що він є чутливим до вологості навколишнього середовища, у наслідок чого полімерна композиція стає мутною та має невисокий ступінь тверднення.

Додатково досліджено фізико-механічні властивості затверднених компаундів, а саме руйнівну напругу на вигін та ударну в'язкість, на підставі яких рекомендовано використовувати компаунд №5 для монтажних умов «Весна/Осінь», а компаунд №4 для монтажних умов «Літо», оскільки вони мають оптимальний комплекс властивостей в наведених вище умовах монтажних робіт.

СТВОРЕННЯ СИСТЕМИ ТВЕРДНЕННЯ З СУМІШІ ТВЕРДНИКІВ З ЗАДАНОЮ ЖИТТЄЗДАТНІСТЮ ТА ЧАСОМ ТВЕРДНЕННЯ ПОЛІЕФІРНИХ КОМПАУНДІВ

Карандашов О. Г., Василенко О. М., Авраменко В. Л., Підгорна Л. П.
Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»
nokturnok@gmail.com

Для транспортування різних хімічних середовищ під високим тиском та підвищеній температурі набувають широке використання склопластикові труби, одержані з епоксидних компаундів методом косошарого поздовжньо поперечного намотування. Для розширення видів агресивних середовищ, які можуть транспортуватися за допомогою склопластикових труб, доцільно використовувати поліефірні та вінілефірні полімерні компаунди. Однак технологічні вимоги до полімерного компаунду, які пов'язані з особливостями методу переробки, висувають потребу у розробці системи тверднення таких компаундів

До технологічних вимог належить: в'язкість при 25 °C у межах 10–16 Па·с; життєздатність при 25 °C – більше 6 годин; температура тверднення – 100–120 °C; час тверднення – не більше 5 хвилин.

На базі проведеного аналітичного огляду для дослідження обрано ортофталевий поліефірний олігомер марки CRYSTIC 474, ізофталевий поліефірний олігомер Agorol K-530 та новолачний вінілефірний олігомер Atlas 590. Ортофталевий та ізофталевий поліефірні олігомери є прискореними. Для новолачного вінілефірного олігомера як прискорювач обрано нафтенат кобальту. Як твердник було обрано третбутилпероксид бензоїлу (ТВРВ) та метилізобутилкетонпероксид (Сигох І-300). Твердники додавались до олігомерів у співвідношенні 1,5 м.ч. на 100 м.ч. відповідно.

Досліджено життєздатність та час тверднення при 110 °C кожного олігомеру з кожним твердником окремо. Встановлено, що використання ТВРВ дозволяє придати полімерним композиціям незалежно від типу олігомера життєздатність при 25 °C понад 24 години, однак процес тверднення при 110 °C перевищує допустимі 5 хвилин. А при використанні твердника Сигох І-300 процес тверднення відбувається за 2–3 хвилини, але їх життєздатність дорівнює 3–4 годинам.

Наступним кроком досліджень було створення системи тверднення з суміші Сигох І-300 та ТВРВ загальною кількістю 1,5 м.ч. отриманої суміші на 100 м.ч. олігомеру при різних співвідношеннях твердників (кроком зменшення одного твердника та збільшення іншого на 0,15 м.ч.).

Встановлено, що для забезпечення технологічних вимог, а саме життєздатності при 25 °C понад 6 годин, та часу тверднення при 110 °C не більше 5 хвилин, необхідно використовувати систему тверднення, яка складається з 60–50 % Сигох І-300 та 40–50 % ТВРВ. Встановлено, що в залежності від типу олігомера змінюються показники життєздатності та часу тверднення. Так для новолачного вінілефірного олігомеру з 0,1 м.ч 6 %-го розчину нафтенату кобальту необхідно збільшувати кількість твердника Сигох І-300, щоб забезпечити необхідний час тверднення, а для поліефірних олігомерів зменшити кількість Сигох І-300 для забезпечення життєздатності понад 6 годин.

Проведені фізико-механічні випробування затверднених компаундів, а саме визначення руйнівної напруги при вигині та ударної в'язкості, на підставі яких встановлено, що найбільшу міцність мають композиції з новолачного вінілефірного олігомеру, а найменшу з ортофталевого поліефірного олігомеру. Проведені дослідження сорбційно-дифузійних процесів в затверднених полімерних компаундах при дії розчинів азотної та сірчаної кислоти.

ХІМІЧНА СТІЙКІСТЬ ПОЛІЕСТЕР-ПОЛІВІНІЛХЛОРИДНИХ МАТЕРІАЛІВ

Катрук Д. С., Гуменецький Т. В., Левицький В. Є.

Кафедра хімічної переробки пластмас,
Національний університет «Львівська політехніка»,
вул. С.Бандери 12, 79013, Львів, Україна
SamoiliukD@gmail.com

Сьогодні розвиток промисловості потребує створення нових полімерних матеріалів з заданим комплексом фізико-механічних та техніко-експлуатаційних параметрів. Особливу увагу привертають композиційні матеріали на основі ненасичених поліестерних смол, оскільки вони відзначаються підвищеними хімічною стійкістю і антикорозійними властивостями, що дозволяє використовувати дані матеріали в складних умовах експлуатації, де механічні та термічні навантаження суміщаються з дією агресивних середовищ.

Для досліджень використовували ненасичену поліестерну смолу марки Estromal A023, як полімерний модифікатор – полівінілхлорид (ПВХ) марки Lacovyl PB1156. Як дрібнодисперсні неорганічні наповнювачі використовували кальцію карбонат (CaCO_3) та алюмінію оксид (Al_2O_3). Додатково в композицію вводили дибутилфталат (ДБФ), який добре суміщається з поліестерною смолою та ПВХ.

Водопоглинання поліестерних композитів визначали згідно ISO 62:2008. Хімічну стійкість композитів на основі ненасичених поліестерних смол визначали згідно ISO 2812-1:2007. Оцінювання захисних властивостей покриттів у 3 % розчині NaCl та синтетичному кислому дощі здійснювали за допомогою дослідження складових імпедансу системи метал – покриття на мості змінного струму Р-5083.

Встановлено, що водопоглинання немодифікованого поліестерного матеріалу становить близько 1,5 %. Введення ПВХ в поліестерну матрицю призводить до значного зростання водопоглинання (до 3,5 %). Однак, модифіковані поліестерні матеріали з діестерфталатним пластифікатором ДБФ, незалежно від природи неорганічного дрібнодисперсного наповнювача, відзначаються найбільшою стійкістю до дії води (водопоглинання матеріалів з CaCO_3 та Al_2O_3 становить 1,1 % та 1,0 % відповідно). Це, очевидно, спричинено більш рівноважною надмолекулярною структурою, формування якої зумовлено присутністю ДБФ, що виступає як розчинником, так і пластифікатором для поліестерної смоли та полівінілхлориду.

Для модифікованих поліестерних композитів з CaCO_3 коефіцієнт набрякання (K) зразків після 14 діб експозиції в 3 %-их розчинах NaOH та H_2SO_4 становить 1,3–1,6 % у лужному середовищі та 1,0 % у кислому, а для композитів з Al_2O_3 – не перевищує 1,3–1,5 % у лужному середовищі. Введення ДБФ в композити, що не містять ПВХ, призводить до зниження хімічної стійкості у лужному середовищі ($K = 2,3\text{--}3,9\%$). Однак, у кислому середовищі спостерігається дещо інша закономірність – введення ДБФ в модифіковані та немодифіковані поліестерні композити, що містять CaCO_3 , призводить до зростання хімічної стійкості.

Виявлено, що введення неорганічних дрібнодисперсних наповнювачів, зокрема CaCO_3 та Al_2O_3 , в модифіковану поліестерну матрицю призводить до підвищення антикорозійних властивостей матеріалу. Поряд з цим, модифіковані поліестерні матеріали з Al_2O_3 в середовищі синтетичного кислого дощу відзначаються найбільшою захисною дією, про що свідчать найвищі значення опору ($3,6 \cdot 10^6\text{--}3,9 \cdot 10^6$ Ом), а найтриваліший захист металу в 3 % розчині NaCl забезпечують модифіковані покриття, до складу якого входить полівінілхлорид у кількості 20 мас.ч. (значення опору становить $16,6 \cdot 10^6\text{--}17,4 \cdot 10^6$ Ом).

**МОДИФІКУВАННЯ ПОЛІТЕРСУЛЬФОНОВИХ МЕМБРАН
ПОЛІЕЛЕКТРОЛІТНИМИ КОМПЛЕКСАМИ, ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНИМИ
НАНОЧАСТИНКАМИ SnO₂**

Колесник І. С., Джоджик О. Я., Коновалова В. В., Бурбан А. Ф.

Національний університет «Києво-Могилянська академія»

i.kolesnyk@ukma.edu.ua

Мембрани з фотокаталітичними властивостями набувають поширення у процесах очищення стічних вод, так як вони дозволяють не тільки концентрувати, а і розкласти токсичні речовини. Також іммобілізація фотокаталітиків на поверхні мембран пригнічує явище концентраційної поляризації у процесах ультра- і нанофільтрації за рахунок фотодеструкції речовин у примембранному шарі. Основним недоліком таких процесів є використання УФ-опромінення, яке не завжди можливо застосувати при використанні полімерних мембран. Тому важливо розробити системи, які проявляють фотоактивність у видимому діапазоні світла.

Нами запропоновано іммобілізацію наночастинок оксиду стануму на поліетерсульфонові мембрани, вкриті поліелектролітними комплексами (ПЕК). Такі системи проявляють активність у розкладанні білків, жирів і полісахаридів при денному освітленні. Встановлено, що найвища активність досягається при застосуванні комплексів слабких поліелектролітів, таких як поліетиленімін-карбоксиметилцелюлоза та поліетиленімін-альгінат.

Для модифікування використовували поліетерсульфонові мембрани з cut-off 20 кДа (Microdyn Nadir, Germany). Поліелектролітні шари наносили методом почергової адсорбції протилежно заряджених поліелектролітів. Наночастинки SnO₂ адсорбували як останній шар. Їхню наявність на поверхні мембрани підтверджували методами СЕМ та АСМ (Рис.).

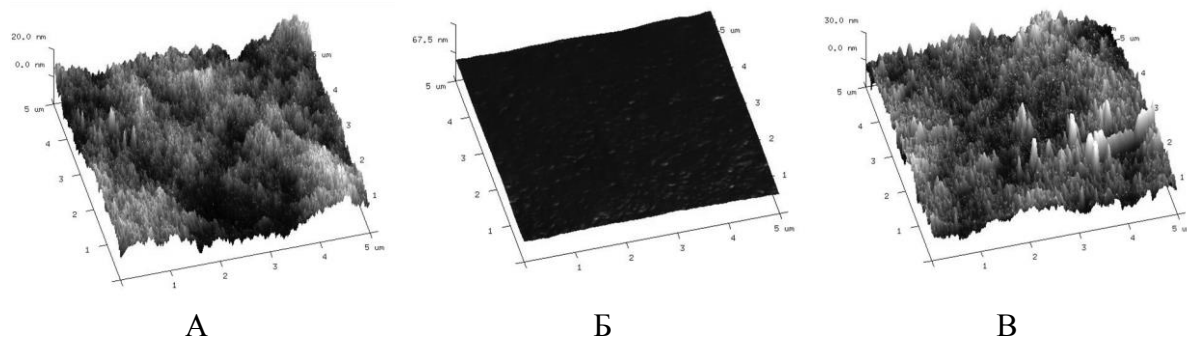


Рис. АСМ-зображення поверхні мембран: А – немодифікована мембрана; Б – мембрана, модифікована лише ПЕК; В – мембрана з адсорбованими ПЕК і наночастинками SnO₂

Встановлено, що при адсорбції наночастинок SnO₂ шорсткість поверхні збільшується вдвічі. Так, фактор шорсткості поверхні немодифікованої мембрани становить 6 нм, а модифікованої – 12 нм.

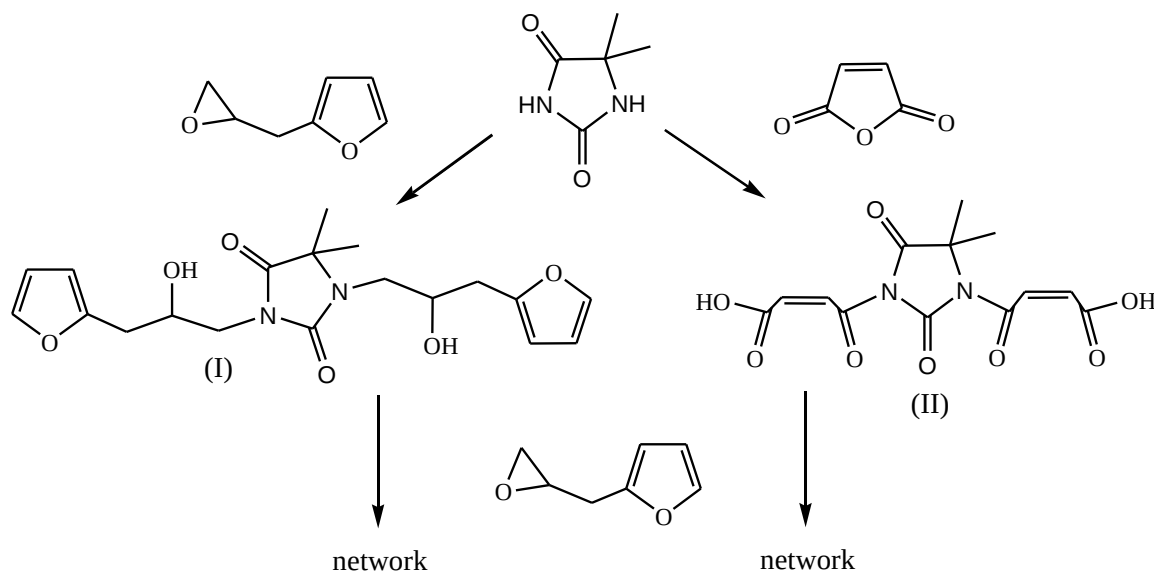
Дослідження фотокаталітичних властивостей мембран проводили у процесі фільтрації молока, якість концентрування якого оцінювали за такими параметрами як загальний вміст лактози, білків, казеїну, сухий залишок та час коагуляції у концентраті. Показано, що іммобілізація наночастинок SnO₂ дозволяє пригнічувати явище концентраційної поляризації та отримувати концентрати молока з покращеною здатністю до сиротворення.

**ДОСЛІДЖЕННЯ НАЯВНОСТІ МОЖЛИВИХ РЕАКЦІЙ В СИСТЕМІ
ФУРФУРИЛГЛІЦИДНИЙ ЕТЕР – 5,5-ДИМЕТИЛГІДАНТОЇН***Коломіна М. С., Корягін А. Г.*Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»
kafedratpkm@gmail.com

Відомо, що оксирановий цикл в епоксидних сполуках добре взаємодіє зі сполуками, які містять рухомий атом гідрогену – це функціональні групи спиртів, карбонових кислот, амінів, амідів, поліамідів, поліспиртів, тощо.

Фурфурилгліцидний етер як багатофункціональний мономер і, водночас як реакційноздатний розчинник, взаємодіє з 5,5-диметилгідантоїном за температури 150 °С, що приводить до утворення біс-фурфурил похідного 5,5-диметилгідантоїну (I). Утворення сполуки (I) контролювалось за ступенем конверсії епоксидних груп (епоксидне число). Сполука (I) являє собою в'язку рідину, яка розчиняється в усіх відомих розчинниках.

Синтез сполуки (II) проходить при топленні 5,5-диметилгідантоїну з двома молекулами малеїнового ангідриду з утворенням біс-малеїната 5,5-диметилгідантоїна (II). Після перекристалізації із толуолу, сполука (II) має температуру топлення 103 °С, кислотне число – 335,5 мг КОН/г, розчинна в усіх відомих розчинниках.



При розчиненні сполуки (I) та (II) у фурфурилгліцидному етері, як активному розчиннику, і нагріванні до 120 °С у присутності каталізатора $(C_2H_5)_3PhCH_2N \cdot FeCl_4$ з масовою часткою 1 %, утворюються чорні, тверді покриття за рахунок полімеризації подвійних зв'язків фуранових циклів.

Подальші дослідження спрямовані на створення «неізоціанатних» полігідроксіуретанов (ПГУ). Основний мономер для синтезу даних сполук – біс-циклокарбонат 5,5-диметилгідантоїн, який одержується за реакцією між ДМГ та епіхлоргідринном з подальшою карбонізацією двоокисем вуглецю під атмосферним тиском за температури 100 °С у присутності четвертинних амонієвих або фосфонієвих солей.

**ПОЛІМЕР/ПОЛІМЕРНІ КОМПОЗИТИ НА ОСНОВІ
МЕТИЛГІДРОКСІЕТИЛЦЕЛЮЛОЗИ ТА ПОЛІАНІЛІНУ***Лавриць А. З., Верещагін О. М., Яцишин М. М., Решетняк О. В.*

Львівський національний університет імені Івана Франка,

вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

annalavrus@gmail.com

Створення полімер/полімерних композитних матеріалів на основі неелектропровідних (НЕПП) та електропровідних полімерів (ЕПП), як от поліанілін (ПАН), є одним із актуальних завдань хімічної науки на сьогоднішньому шляху її розвитку. Серед НЕПП особливої уваги заслуговують штучні полімери, тобто природні полімери, які були піддані хімічній обробці як наприклад целюлоза, яку шляхом хімічної обробки модифікували в діацетилцелюлозу, карбоксиметилцелюлозу чи метилгідроксietилцелюлозу (МГЕЦ), тощо. Такі полімери можуть слугувати матрицею носієм, або бути основним чи допоміжним компонентом гібридного композитного матеріалу з ПАН. Целюлоза є найбільш поширеним і поновлюваним природним полімером, який є невичерпним ресурсом для будь якої хімічної галузі. Поліанілін є найважливішим представником ЕПП, який володіє надзвичайно високою електропровідністю, хімічною стійкістю та екологічністю. Поєднання властивостей обох цих полімерів целюлози та поліаніліну дозволить отримувати матеріали які можуть бути використані як антистатичні матеріали, матеріали для екранування від електромагнітних випромінювань та матеріали для високоселективних мембран для розділення газів. Питома електропровідність для антистатичних додатків повинна бути в межах 10^{-6} – 10^{-5} См/см, а для електромагнітного екранування в межах 10^{-3} – 10^{-1} См/см.

Функціоналізацію мікрОВОЛОКОН МГЕЦ поліаніліном для отримання нанокомпозитів МГЕЦ/ПАН проводили механохімічним (твердофазовим) методом. Наважку анілін сульфату (АнСт) перетирали в фарфоровій ступці з наважкою МГЕЦ впродовж відповідного часу і додавали наважку амоній пероксодисульфату (АПС) і знову перетирали впродовж відповідного часу. Після чого залишали зразки на 24 год в ексікаторі заповненому аргоном. Після витримання зразків їх промивали 500 мл киплячої дистильованої води, сушили на повітрі три дні, а потім у вакуумі 24 год. Отримані композитні мікрОВОЛОКНА Цл/ПАН, допований H_2SO_4 , мали темно-зелене чи зелено-чорне забарвлення (див. рис.).

Для аналізу структури отриманих зразків використовували: рентгенівський (Дрон-4) та інфрачервоний з Фурє перетворення (Nicolet IS10) аналізи.

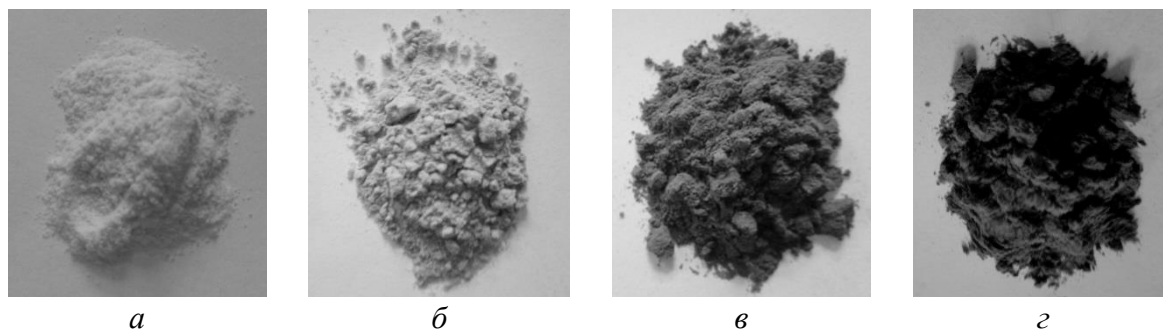


Рис. Зміна забарвлення суміші під час механохімічного синтезу композитів МГЕЦ/ПАН через: *a* – початок синтезу; *б* – 8 хв.; *в* – 30 хв.; *г* – 24 год.

Встановлено, що аморфно-кристалічний стан МГЕЦ після механохімічної функціоналізації ПАН практично не змінюється, а натомість до характерних для МГЕЦ дифракційних піків додаються гострі дифракційні піки властиві для кристалічних доменів ПАН в матриці МГЕЦ, зокрема при $2\theta \sim 21,5$ та $2\theta \sim 26$ град. Між компонентами композитів наявна сильна міжфазова взаємодія.

**ДОСЛІДЖЕННЯ КИСЛОТНО-ОСНОВНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ
ДЛЯ ПОЛІМЕРНИХ КОМПОЗИТІВ***Лебедев В. В.¹, Карев А. І., Данченко Ю. М., Яворська Д. Г.²*¹Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»²Харківський національний університет будівництва і архітектури
vladimirlebedev@bk.ru

У даний час широке розповсюдження на світовому ринку отримали деревно-полімерні композити (ДПК), основу яких складають термопластичні полімери та органічні целюлозовмістні наповнювачі рослинного походження (деревне борошно та ін.).

У полі термопластичного зв'язуючого використовуються полімери поліолефінового ряду – полівінілхлорид (ПВХ), поліетилен (ПЕ), поліпропілен (ПП), полістирол (ПС) та ін. Термопластичні полімери мають унікальні властивості, завдяки яким можуть застосовуватись у різних областях. Для зменшення вартості ДПК і поліпшення властивостей широко використовуються відходи від переробки рослин та сільськогосподарської продукції, а також вторинні полімери. При цьому вирішуються завдання раціонального використання деяких твердих відходів.

Органічні і неорганічні наповнювачі у виробництві ДПК, як правило, використовуються у дисперсному вигляді. До числа найважливіших вимог, що пред'являються до дисперсних наповнювачів при виробництві ДПК, відносяться здатність поєднуватись з полімером, диспергуватись та достатньо змочуватись розплавом полімеру. Враховуючи вищезазначені фактори, необхідно забезпечувати хімічні та фізико-хімічні взаємодії на поверхні поділу фаз, які відбуваються за участі функціональних кислотно-основних груп поверхні наповнювачів.

Виникає необхідність дослідження поверхневих кислотно-основних властивостей органічних наповнювачів не деревного походження, які можуть використовуватись у полімерних композитах.

У даній роботі були досліджені органічні наповнювачі: деревне борошно (ДБ), борошно хвої (БХ). Вибір обґрунтовується тим, що, добавки целюлози і хвої широко застосовуються для розробки ДПК на основі термопластичних полімерів. Результати випробувань можуть бути співставлені та порівняні з результатами існуючих досліджень. В ході дослідження було визначено, що на поверхні лушпиння гречки існують два типи активних центрів: слабо-кислотні ($pK_a \approx 5,53-5,83$) і практично нейтральні ($pK_a \approx 6,16-6,30$).

Поверхня лушпиння гречки вівса має характер близький до нейтрального з кислотною силою активних центрів $pK_a \approx 6,15-6,32$.

Проаналізувавши отримані результати хімічного складу та потенціометричних досліджень кислотно-основних властивостей поверхні наповнювачів, можна стверджувати, що загальна кислотність поверхні наповнювачів рослинного походження у більшій мірі залежить від сумарного вмісту основних компонентів. Встановлено, що при збільшенні суми основних компонентів целюлози і лігніну, поверхнева кислотність частинок наповнювачів зростає.

**ПЕРСПЕКТИВИ ВИКОРИСТАННЯ ІНТЕРМЕТАЛІДІВ І КОМПОЗИТІВ
У АВІА- ТА РАКЕТОБУДУВАННІ***Левківський І. С.*Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
ivan.levkivskyi@gmail.com

У авіа- та ракетобудуванні традиційними є титанові, алюмінієві та нікелеві сплави. Вага ракет-носіїв та літаків є важливим параметром, тому виробники прагнуть використовувати якомога легші матеріали. Лише в останнє десятиріччя збільшилося використання композитних матеріалів з полімерною матрицею (наприклад, вуглепластик) та на основі сплавів і металів (алюміній, нікель та інші матеріали у якості матриці).

Метою цієї праці є дослідження характеристик матеріалів для використання у ракетобудуванні та авіації з метою знайти найбільш вигідні та придатні. Для розрахунків була обрана конкретна частина конструкції - головний обтікач, оскільки саме ця частина зазнає найбільш інтенсивних навантажень, що діють на апарат. Найбільший аеродинамічний нагрів конструкції припадає на головні обтікачі. Особливо це важливо для ракет, адже вони зіштовхуються з молекулами повітря (внаслідок чого й відбувається аеродинамічний нагрів) на великих швидкостях. Також для ракет важливою є радіаційна стійкість, тому що обтікачі захищають корисне навантаження від певної кількості радіації, а космічні кораблі – екіпаж. Виходячи з цього, були виділені основні вимоги до матеріалів. Вони повинні володіти високими міцностними і термічними характеристиками, а також мати хороші теплоізоляційні властивості для забезпечення робочої температури середовища в носовому відсіку апарату, радіаційну та корозійну стійкість.

У результаті розрахунків у програмному пакеті SolidWorks були обрані наступні матеріали. Найперспективнішими для використання є інтерметаліди та композити з інтерметалідною матрицею на основі титану: $TiAl$, Ti_3Al та $TiAl_3$. Інтерметалід $TiAl$ може стати гарною заміною алюмінієво-літєвим сплавам, які, наприклад, використовує SpaceX для паливного баку та обтікача Falcon 9. Алюмінієво-літєві сплави дуже легкі (питома маса 2,6–2,8 г/см³), проте їх мінусом є дуже низька стійкість до корозії, що може стати критичним, беручи до уваги тенденцію до багаторазового використання усіх частин ракет. $TiAl$ має густину 4,0 г/см³, але натомість має відмінні механічні властивості і корозійну стійкість при температурах більше 600°. Прості титанові сплави є більш важкими (густина 5,5–6,5 г/см³), а з підвищенням температури їх корозійна стійкість значно зменшується.

**ТЕРМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ЕПОКСИДНО-ПОЛІСИЛОКСАНОВИХ
НАНОКОМПОЗИТІВ КАТІОННОЇ ПОЛІМЕРИЗАЦІЇ***Леонова Н. Г., Жильцова С. В.*Донецький національний університет імені Василя Стуса, хімічний факультет,
кафедра біохімії та фізичної хімії

21021, Україна, Вінницька обл., м. Вінниця, вул. 600-річчя, 21

n.leonova@donnu.edu.ua

Розвиток науки і техніки потребує не тільки розширення областей використання композитних матеріалів, але й створення нових систем, які є термостабільними, мають високі оптичні характеристики, хімічну стійкість та механічну міцність. Саме комбінування властивостей органічної полімерної матриці та неорганічного наповнювача дає широкі можливості для синтезу матеріалів з унікальним поєднанням властивостей. Одним із перспективних з препаративної точки зору методів отримання таких матеріалів є золь-гель технологія.

Метою даної роботи було дослідження термічних властивостей композитних матеріалів катіонної полімеризації на основі епоксидної смоли та тетраетоксисилану при формуванні їх тонким шаром з використанням золь-гель підходу.

Немодифіковані полімерні зразки отримували змішуванням епоксидного олігомеру дигліцидилового етеру дициклогексильолпропану (епоксидна смола EPONEX 1510) і каталізатора катіонної полімеризації – 15 %-го розчину трифториду бору в діетиленгліколі в кількості 5 мас% відносно маси смоли. Композити формували на основі золю полісилоксанових частинок (ПСЧ), одержаних золь-гель методом з тетраетоксисилану за відсутності епоксидної смоли. Для проведення гідролізу алкоксисилану використовували 0,1 н водний розчин нітратної кислоти. Як розчинник для проведення золь-гель процесу використовували ацетон. Епоксидну смолу EPONEX 1510 додавали до реакційної суміші через 1 добу. Вміст ПСЧ у перерахунку на SiO_2 в системі варіювали від 0,5 до 3 мас%. Покриття завтовшки 10 мкм формували на скляній та алюмінієвій поверхнях за кімнатної температури.

Для досліджуваних матеріалів проведено термогравіметричні дослідження. Встановлено, що процес деструкції полімерів протікає в декілька стадій. На кривій *DTG* немодифікованого епоксидного полімеру виділяються два основних піки з температурами максимумів (T_{max}) 380 і 530 °С. Перший пік на кривій *DTG* можна віднести до випаровування низькомолекулярних сполук (золь-фракції) з полімерної матриці. У композитах збільшення кількості ПСЧ приводить до зростання площі під кривою основного максимуму термодеструкції. При цьому на основному максимумі з'являються додаткові піки і він зсувається в бік більш високих температур. В інтервалі температур 420–650 °С відбувається остання стадія деструкції, яка відповідає «вигорянню» коксового залишку та йде з невеликою і практично постійною швидкістю втрати маси. Введення 0,5–3 мас% полісилоксанової складової призводить до зсуву температури 10 %-вої втрати маси на 10–30 °С у бік нижчих температур. На глибоких стадіях термоокисної деструкції одержаних композитів вплив полісилоксанового наповнювача є незначним, тому величини T_{max} досліджуваних полімерів знаходяться приблизно в одному температурному інтервалі, оскільки ця стадія характеризує деградацію полімерної сітки.

Досліджувані композити у вигляді покриттів, нанесених на скло, піддавали довготривалому (100 год.) ізотермічному старінню при 160 °С у середовищі кисню повітря. Проведені дослідження показали, що найшвидше втрачає масу епоксидний полімер. Максимальна швидкість втрати маси композитних покриттів в ізотермічних умовах в 1,5 рази менша, ніж у немодифікованого полімера.

ПЕРКОЛЯЦІЙНА ПОВЕДІНКА ЕЛЕКТРОПРОВІДНОСТІ В НАНОКОМПОЗИТАХ НА ОСНОВІ ОЛІГОЕТЕРІВ ТА ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБОК

Лисенков Е. А.¹, Клепко В. В.²

¹Миколаївський національний університет ім. В. О. Сухомлинського

²Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України
ealysenkov@ukr.net

Електропровідні полімерні наноккомпозити привертають значну увагу через свої унікальні фізичні властивості. При досягненні деякої критичної концентрації нанонаповнювача відбувається різка зміна електропровідності та діелектричної проникності, при цьому вміст наповнювача складає до 1 %. Полімерні наноккомпозити, наповнені ВНТ, характеризують різкою зміною електричних та діелектричних характеристик, яка відбувається при певній критичній концентрації (порог перколяції). Метою даної роботи було вивчення явища перколяції у нанонаповнених системах з фундаментальної точки зору, використовуючи теорію перколяції та скейлінговий підхід.

На рис. зображені залежності електропровідності при постійному струмі від вмісту наповнювача для досліджуваних систем олігоетер–ВНТ. Стрибкоподібна зміна електропровідності, пов'язана з явищем перколяції, для всіх досліджуваних наноккомпозитів спостерігається у концентраційному діапазоні 0,3–0,7 %. При вмісті ВНТ менше 0,3 %, у системі не вистачає наповнювача для утворення перколяційної сітки, тому матеріал поводить себе як діелектрик. Зі збільшенням вмісту ВНТ у матеріалі формується провідна сітка, а електропровідність системи різко зростає. При вмісті 0,7 % ВНТ електропровідність досліджуваних матеріалів на один-два порядки вища за електропровідність до порогу перколяції.

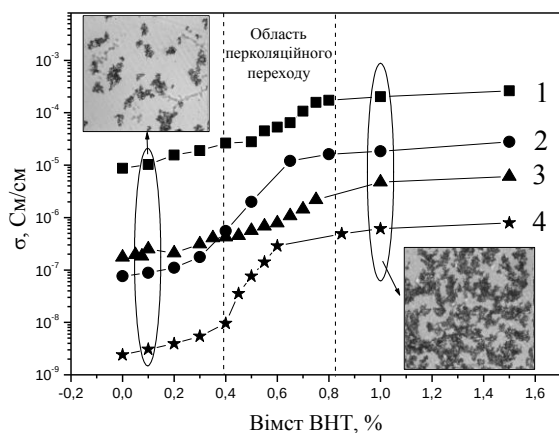


Рис. Залежності електропровідності від вмісту ВНТ для систем на основі поліетерів: 1 – ПЕГ-400; 2 – ПЕО-10000; 3 – ППГ-400; 4 – ПТМГ-1000

У результаті проведеної роботи було виявлено, що для досліджуваних наноккомпозитів на основі різних поліетерних матриць, перколяційний перехід спостерігався в області концентрацій ВНТ від 0,4 % до 0,8 %. Визначено значення порогу перколяції для систем на основі поліетерів, які становили від 0,35 % до 0,5 %. Показано, що значення порогу перколяції залежить від кристалічності полімерної матриці. Використовуючи скейлінговий підхід були визначені критичні індекси електропровідності t та s , значення яких значно відрізняються від універсальних. Таке відхилення критичних індексів від універсальних значень пояснюється потужними

процесами агрегації ВНТ після приготування даних систем, наявністю великої кількості „мертвих кінців”, великої анізотрії форми електропровідного наповнювача, а також високим (у порівнянні з іншими полімерами) рівнем власної провідності поліетерних матриць.

**ВПЛИВ НАПОВНЮВАЧА НА ФУНКЦІОНАЛЬНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ
КОМПОЗИТНИХ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ ВТОРИННОГО
ПОЛІЕТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТУ**

Лінчаковський С. М.¹, Лісовий Р. А.², Лисенков Е. А.²

¹Міська станція юних техніків м. Миколаєва

²Миколаївський національний університет ім. В. О. Сухомлинського
ealysenkov@ukr.net

Однією з основних тенденцій, яка сформувалася в останні роки в області створення нових типів полімерних матеріалів є розробка так званих полімерних композитів. Використання полімерних композитів є важливим для тих областей застосування, де потрібні високі питомі значення теплофізичних та механічних характеристик матеріалів. Питання створення полімерних композитів на основі вторинних полімерів, зокрема поліетилентерефталату, є надзвичайно актуальним через існуючу проблему утилізації останнього.

Метою дослідження було розробка та дослідження функціональних властивостей композитів на основі вторинного поліетилентерефталату та неорганічних наповнювачів (технічного вуглецю та алюмінію).

Для вирішення поставленої мети було проведено теоретичний (літературний) аналіз властивостей ряду полімерів для визначення об'єктів для проведення експерименту, виготовлено полімерні композити з різною концентрацією наповнювача методом екструдювання, досліджено функціональні (теплофізичні, механічні, міцнісні тощо) характеристики отриманих композитів, виявлено вплив типу на вмісту наповнювачів різної природи на досліджувані експлуатаційні характеристики даних матеріалів.

У результаті проведеної роботи було досліджено вплив наповнювачів різної природи на функціональні властивості полімерних композитів на основі вторинного поліетилентерефталату. Показано, що використання вторинного поліетилентерефталату, при певних умовах переробки, суттєво не впливає на кінцеві властивості таких матеріалів. Показано, що введення наповнювачів приводить до зниження ступеня кристалічності та підвищення температур плавлення та деструкції систем на основі вторинного поліетилентерефталату, що є наслідком утворення у полімерному матеріалі армуючої сітки із частинок наповнювача. Встановлено, що використання частинок алюмінію та технічного вуглецю як наповнювачів для полімерних матриць приводить до значного впливу на їх властивості при відносно невисоких концентраціях (~ 1 %). Виявлено, що введення наповнювачів приводить до значного зростання теплопровідності, звукопровідності та механічної жорсткості досліджуваних матеріалів, що можуть використовуватися як конструкційні матеріали. Встановлено, що використання частинок алюмінію, які мають вищі власні значення коефіцієнта теплопровідності, швидкості звуку та механічної міцності приводять до більшого зростання функціональних характеристик матеріалів на основі ВПЕТ, у порівнянні із використанням частинок технічного вуглецю. Виявлено, що введення 5 % наповнювачів приводить до значного зростання теплопровідності (у 10 разів), звукопровідності (у 2 рази) та механічної жорсткості (у 3 рази) досліджуваних матеріалів, що можуть використовуватися як конструкційні матеріали. Розроблені матеріали є дешевими та мають покращені функціональні характеристики у порівнянні із не модифікованим поліетилентерефталатом.

СИНТЕЗ ПОЛІУРЕТАНІВ З ВИКОРИСТАННЯМ ТРИІЗОЦІАНАТІВ. ФІЗИКО-МЕХАНІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ОТРИМАНИХ МАТЕРІАЛІВ

Лукашевич С. А., Рожнова Р. А., Галатенко Н. А., Козлова Г. А.

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України

lsa2000new@gmail.com

На основі олігооксипропіленгліколю (ООПГ), ТДІ (2,4-;2,6-толуїдендіізоціанату), ізоціанурату HDT-90 (2,4,6-триізоціанат (трисгексаметилен)ізоціанурату) синтезовано нові полімерні поліуретанові матеріали.

Вивчено вплив ізоціануратної складової на фізико-механічні властивості отриманих поліуретанів та встановлено залежність від співвідношень вихідних компонентів.

Поліуретанові матеріали синтезували на основі олігооксипропіленгліколю (ООПГ, ММ = 1002), та ізоціанатів – толуїдендіізоціанату (ТДІ 80/20) та 2,4,6-триізоціанат (трисгексаметилен)ізоціанурата HDT-90.

Синтез ПУ- матриці проводили в 3 стадії. На першій стадії отримували ізоціанатний форполімер на основі ООПГ та ізоціанатів — толуїдендіізоціанату (ТДІ 80/20) та 2,4,6-триізоціанат (трисгексаметилен)ізоціанурату (HDT-90) за різного мольного співвідношення ТДІ/ HDT-90 (табл.). Синтез проводили в хлороформі за температури 50 ± 5 °С протягом 4 год. Вміст вільних NCO-груп визначали титриметричним методом.

Згідно даних фізико-механічних досліджень було встановлено, що при збільшення кількості HDT-90 міцність при розриві синтезованих полімерних матеріалів зростає (табл.).

Таблиця. Фізико-механічні показники ПУ матеріалів

№ з/п	ТДІ/ HDT-90	Міцність при розриві, МПа	Відносне подовження, %
1	1,75/0,25	$2,05 \pm 0,03$	$250 \pm 0,6$
2	1,5/0,5	$2,15 \pm 0,02$	$210 \pm 0,4$
3	1,25/0,75	$2,55 \pm 0,03$	$175 \pm 0,4$
4	0,75/1,25	$3,48 \pm 0,04$	$130 \pm 0,3$

Встановлено, що залежність міцності при розриві і відносного подовження в ПУ розгалуженої будови залежить від співвідношення ТДІ/ HDT-90 та носить лінійний характер. Найбільше значення міцності при розриві спостерігається у зразках синтезованих за мольного співвідношення ТДІ/ HDT-90 – 0,75/1,25.

Отже, в ряду синтезованих матеріалів, мольне співвідношення ТДІ/ HDT-90 як 0,75/1,25, є найбільш оптимальним з точки зору створення нових ПУ матеріалів медичного призначення, зокрема імплантатів м'якої тканини. Отриманий ефект може бути пов'язаний зі зростанням розгалуженості полімеру, збільшення кількості зв'язаних та зменшення кількості вільних водневих зв'язків, що в свою чергу приводить до додаткового структурування полімерної матриці.

Згідно фізико-механічних властивостей досліджуваних матеріалів, які містять в своєму складі ізоціануратні фрагменти можуть бути використані для створення нових імплантатів у медичних цілях.

ВПЛИВ ВМІСТУ ГЛАУКОНІТУ НА ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КОМПОЗИТІВ ПАн/Гл, СИНТЕЗОВАНИХ У РОЗЧИНАХ РІЗНИХ КИСЛОТ

Макогон В. М., Нестерівська С. П., Яцишин М. М., Решетняк О. В.

Львівський національний університет імені Івана Франка

viktorymakogon@gmail.com

Поліанілін (ПАН) – поліаміноарен є одним із найбільш досліджуваних та технологічно важливих електропровідних полімерів. В останні роки поєднанням властивостей ПАН і різних речовин мікро- та нанорозмірного масштабу створюють гібридні композитні матеріали. Окремою групою яких є композити на основі ПАН і природних мінералів (ПМ), наприклад, монтморилоніту, каолініту, цеоліту, глауконіту, тощо. Гібридні композитні матеріали можуть бути використані в електронній промисловості як магнітне електропровідне покриття, наповнювач до захисних екранів від електромагнітного випромінювання, пігмент-додаток до антикорозійних покриттів металів і сплавів, чутливий елемент хемосенсорів, біосенсорів, сенсорів вологи, компонент реологічних рідин, тощо.

Глауконіт (Гл) – природний мінерал, який володіє магнітними властивостями і може надавати композитам поліанілін/глауконіт (ПАН/Гл) дуже цінних властивостей роблячи такі композити незамінним матеріалом сучасної електронної та хімічної галузі. Вибір глауконіту як ПМ, для синтезу композитів, зумовлений його екологічністю, доступністю, а особливо наявністю у його складі FeO і Fe₂O₃, які надають йому парамагнітних властивостей.

Синтезовані композити на основі ПАН та Гл володіють електропровідністю та магнітною сприйнятливістю. Встановлено, що найвищою електропровідністю володіють зразки ПАН та композитів Гл/ПАН, синтезовані в середовищах хлоридної та цитратної кислот за низьких вмістів Гл в композиті. Для практично співмірних кількостей ПАН і Гл в композитах значення питомої електропровідності за наявності різних кислот-допантів, а саме HCl, H₂SO₄, яблучної (ЯК), оксалатної (ОК) та цитратної (ЦК) наведено в таблиці.

Таблиця. Питома електропровідність композитів Гл/ПАН, синтезованих в розчинах різних кислот. Співвідношення Гл : ПАН 1 : 1. $T = 293 \pm 1$ К

Зразок	$\chi \pm 5 \cdot 10^3, \text{См} \cdot \text{см}^{-1}$				
	HCl	H ₂ SO ₄	ЯК	ОК	ЦК
ПАН	0,263	0,110	0,048	0,05	0,122
Гл/ПАН (1:1)	0,041	0,020	0,0092	0,0024	0,029
Гл	$6 \cdot 10^{-6}$				

Найвищою електропровідністю володіють зразки ПАН та композитів Гл/ПАН, синтезовані в середовищах хлоридної та цитратної кислот. Зі збільшенням вмісту Гл електропровідність цих композитів зменшується.

Синтезовано серію композитів на основі ПАН і Гл у водних розчинах різних кислот-допантів. Досліджено структурні, термічні властивості, а також електропровідні та намагнічувальні властивості синтезованих композитів і порівняно ці властивості з чистим ПАН. Встановлено, що властивості композитів зумовлені міжфазовою поліанілін – глауконіт взаємодією, які залежать від співвідношення компонентів анілін : глауконіт та природи кислоти-допанта, взятих для проведення синтезу.

**ВПЛИВ МЕТАЛОВМІСНОГО ПОЛІМЕР-СИЛІКАТНОГО НАПОВНЮВАЧА
НА РЕОЛОГІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ПОЛІКАПРОАМІДУ***Масюк А. С., Ващук К. І., Левицький В. Є.*

Національний університет «Львівська політехніка»

masyukas@gmail.com

Здатність полімерів і композитів на їхній основі до перероблення у в'язкотекучому стані, вибір раціональних методів та технологічних параметрів процесів перероблення в значній мірі визначаються їхніми технологічними властивостями, зокрема реологічними.

У даній роботі досліджені реологічні властивості термопластичних композитів на основі полікапроаміду (ПА-6) з Ni-вмісним силікатним наповнювачем, що модифікований полівініловим спиртом (ПВС) або полівінілпіролідом (ПВП). Модифікований наповнювач одержували сумісним осадженням полівінілового спирту або полівінілпіролідону і натрієвого рідкого скла з водних розчинів під дією нікель хлориду.

Встановлено, що показник текучості розплаву (ПТР) ПА-6 (19,05 г/10 хв) найбільш відчутно змінюється під час введення немодифікованого наповнювача (ПТР в цьому випадку характеризується найменшим значенням – 14,51 г/10 хв). Використання модифікованих наповнювачів збільшує значення ПТР порівняно з немодифікованим, що, очевидно, пов'язано з перерозподілом міжмолекулярних взаємодій в системі ПА-6 – наповнювач під впливом макромолекул модифікатора ПВП або ПВС і становить 17,88 і 18,71 г/10 хв відповідно.

Виявлено, що розтопи полікапроамідних матеріалів з немодифікованим наповнювачем проявляють під час течії вищу чутливість до напружень зсуву (τ), про що свідчить більший вплив значень τ на ефективну в'язкість. Наповнювачі, які модифіковані ПВП та ПВС, підвищують в'язкість ПА-6, але при цьому характер залежності в'язкості від τ порівняно з ненаповненим ПА-6 не змінюється. Різний нахил кривих залежностей в'язкості розтопу від напруження зсуву полікапроамідних матеріалів з модифікованими наповнювачами, порівняно з немодифікованими, свідчить про присутність додаткових взаємодій між модифікатором наповнювача та полікапроамідними макромолекулами.

За збільшення температури ефективна в'язкість розтопу наповненого ПА-6 закономірно зменшується, а вплив на неї напружень зсуву є більш відчутним. Встановлено, що для систем ПА-6 – модифікований наповнювач індекс течії розтопу в ньютонівській області не залежить від природи модифікатора та температури і близький до 1. У цей же час, для неньютонівської області вплив наповнювача на індекс течії є більш виражений особливо за нижчих температур.

На підставі отриманих залежностей розраховано константи реологічного рівняння, значення уявної енергії активації в'язкої течії та індекс течії розтопу композитів на основі ПА-6. Зокрема, найнижче значення уявної енергії активації в'язкої течії 52,3 кДж/моль спостерігається для композитів з наповнювачем, який модифікований ПВП. У цей же час, незалежно від природи наповнювача зменшується значення індексу течії розтопів ПА-6 на 15–20 %, при цьому найменше значення характерне для композиту з немодифікованим наповнювачем.

На підставі проведених досліджень виявлено, що полікапроамідні композити з модифікованими силікатними наповнювачами відзначаються в умовах переробки литтям під тиском підвищеною технологічною сумісністю між компонентами системи внаслідок міжмолекулярних взаємодій за участю функційних груп модифікатора та амідних груп ПА-6.

**CHARACTERISTICS OF COMPOSITES BASED ON ALIPHATIC
AND AROMATIC OLIGOMERS AND LITHIUM SALT***Matkovska L. K., Iurzhenko M. V.*

Institute of Macromolecular Chemistry of National Academy of Sciences of Ukraine,
48 Kharkivske shosse, Kyiv 02160, Ukraine
lovemk@ukr.net

Polymer blending technique is a quick and economic alternative, which has been widely used for obtaining materials with optimized properties and potentially can offer an easy control of physical properties by compositional change for a wide variety of application prospects. Epoxy resins are important thermoset materials owing to their excellent chemical and electrical properties, thermomechanical, barrier, low shrinkage upon cure and outstanding adhesion to various substrates. Copolymers, which have similar functional epoxy groups, enable formation a cross-linked network because of the similar reaction with an amine curing agent.

In our case, different content of aliphatic diglycidyl ether of polyethylene glycol DEG-1, aromatic diene-epoxy resin DER-331 and salt of lithium perchlorate LiClO_4 were used for synthesis of epoxy polymer composites. Polyethylene polyamine was used as a curing agent.

The structural organization of the composites were investigated by wide-angle X-ray scattering (WAXS) using the X-ray diffractometer DRON-4.07. The WAXS showed that the polymer composite with LiClO_4 are amorphous in contrast to the pure salt. Amorphous state of the salt in the composite is achieved by interactions between LiClO_4 and the polymer matrix.

Thermogravimetric analysis (TGA) was performed using TA Instruments TGA Q50 in the temperature range from +25 to +700 °C with the linear heating rate of 20 °C/min in nitrogen atmosphere. According to TGA increasing the aromatic component leads to an increased thermal stability of the composites, but adding more lithium perchlorate salt makes them less thermostable.

The thermal characteristics were studied by differential scanning calorimetry (DSC) in the temperature range from -70 °C to +200 °C with the heating rate of 10 °C/min. DSC results show that the introduction of more LiClO_4 content into the composites leads to a significant increase of their glass transition temperature. This can be a result of the electrostatic interactions between lithium cations Li^+ and ClO_4^- anions and the polymer matrix with forming of coordinative complexes. At the same time, the increasing amount of the aliphatic component in the system leads to the decrease of glass transition temperature indicating the plasticizing effect of DEG-1.

The dielectric characteristics of the composites were investigated by the broadband dielectric analyzer 'Novocontrol Alpha' with Novocontrol Quatro Cryosystem in the frequency range from 10^{-1} to 10^7 Hz and the temperature range from -60 °C to +200 °C. The increasing values of the real part of the conductivity and the complex permittivity with increasing amount of the aliphatic component, lithium perchlorate salt and temperature of measurements were found.

According to the study, the synthesized composites based on aliphatic diglycidyl ether of polyethylene glycol, aromatic diene-epoxy resin, polyethylene polyamine and lithium perchlorate salt are amorphous. Increasing the aromatic component in the system leads to the increased thermal stability and glass transition temperature of the composite. Introduction of salt leads to decrease of thermal stability and increase of glass transition temperature, conductivity and permittivity.

**РЕГУЛЮВАННЯ ТЕМПЕРАТУРИ ПРОЯВУ ЕФЕКТУ ПАМ'ЯТІ ФОРМИ
ЕПОКСИУРЕТАНОВИХ ПОЛІМЕРНИХ СИСТЕМ***Матковська О. К., Мамуня Є. П.*Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України, Харківське шосе 48, Київ
omatkovska@ukr.net

Полімери з ефектом пам'яті форми (ЕПФ) викликають все більшу зацікавленість як академічних так і промислових установ. Полімери з ЕПФ є полімерами, що можуть тримати тимчасову форму протягом тривалого часу і відновитися до їх первісної, постійної форми при накладенні стимулів, таких як тепло, світло, вологість, рН, хімічне, електричне або магнітне поле. При цьому теплова активація є найбільш широко використовуваною.

Багатьма дослідженнями доведено хороші властивості пам'яті форми епоксидних матеріалів. Епоксидний полімер як один із термореактивних полімерів з ЕПФ, має високі механічні характеристики та є стабільним в різних середовищах, успішно застосовується в аерокосмічній галузі, медицині, автомобільній галузі, для саморегульованих полімерних матеріалів, мембран та ін.

У цій роботі запропоновано підхід, що полягає в модифікації основної епоксидної смоли (епоксиуретанової), що має високе значення T_c (114 °C), додаванням дигліцидилового ефіру поліетиленгліколю з низьким значенням T_c (-10 °C) у різних співвідношеннях, тоді як вміст зшиваючого агенту був однаковий у всіх композитах.

Об'єктом дослідження були полімерні матеріали, синтезовані з реакційних сумішей двох епоксидних олігомерів, ароматичного та аліфатичного: епоксиуретанової смоли (ЕПУ), взятої за основу, та дигліцидилового ефіру поліетиленгліколю (марки ДЕГ-1), що слугував модифікатором. Як твердник (10 % реакційної суміші) було використано поліетиленполіамін (ПЕПА). Співвідношення ЕПУ/ДЕГ-1 в реакційній суміші знаходилось в межах 100/0–70/30.

Температура склування T_c епоксидних полімерів, що мають ефект пам'яті форми, визначена методами ДСК та ТМА. Значення T_c зменшуються (починаючи зі 114 °C) зі збільшенням вмісту ДЕГ-1 у реакційній суміші. Поведінка T_c для системи з повністю змішуваними компонентами може бути описана рівнянням Фокса:

$$\frac{1}{T_c} = \frac{w}{T_{c1}} + \frac{1-w}{T_{c2}},$$

де T_{c1} і T_{c2} – температури склування для низько- і високотемпературного компонентів, відповідно; w – масова частка низькотемпературної компоненти. Крива, розрахована за рівнянням Фокса, є далекою від експериментальних точок. Це може свідчити про часткову змішуваність епоксидних олігомерів ЕПУ та ДЕГ-1. В такому випадку можна використати рівняння Тейлора-Гордона:

$$T_c = \frac{wT_{c1} + k(1-w)T_{c2}}{w + k(1-w)},$$

де k – регулюючий коефіцієнт. Якщо рівняння Фокса є симетричним і передбачає однаковий внесок обох компонентів, то останнє рівняння є асиметричним, а коефіцієнт k визначає співвідношення внеску низько- та високотемпературних компонентів у значення T_c епоксидного полімеру. При $k = 0,34$ рівняння Тейлора-Гордона точно описує експериментальні результати.

Отже, модифікація ароматичного епоксидного олігомера ЕПУ аліфатичним епоксидним олігомером ДЕГ-1 забезпечує зміну T_c у широкому діапазоні температур. Оскільки значення T_c асоціюється з температурою перемикання T_n , такий підхід дозволяє контролювати поведінку ефекту пам'яті форми в епоксидному полімері.

СТРУКТУРА ПОЛІМЕРНОГО КОМПОЗИТУ НА ОСНОВІ АМОРФНОГО ТА НАПІВКРИСТАЛІЧНОГО ПОЛІМЕРІВ І СОЛІ ЛІТІЮ

Матковська Л. К., Юрженко М. В., Штомпель В. І.

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України

Україна, 02160, Київ-160, Харківське шосе, 48

lovemk@ukr.net

Значні зусилля дослідників в області полімерів спрямовані на отримання багатофункціональних матеріалів із зменшеною вартістю, підвищеною продуктивністю та тривалістю терміну експлуатації. Технологія змішування полімерів є економічною альтернативою, яка широко використовується для отримання матеріалів з оптимізованими властивостями. Особливості структури композиту дигліцидилового етеру поліетиленгліколю отвердженого поліетиленполіаміном із введеними *in situ* лінійного олігомера поліетиленоксида (ПЕО) та солі перхлорату літію LiClO_4 досліджували методом ширококутового розсіяння рентгенівських променів із використанням дифрактометра ДРОН-4-07, рентгенооптична схема якого виконана за методом Дебая-Шеррера – на проходження первинного пучка рентгенівських променів крізь товщину зразка полімеру. При проведенні аналізу ширококутової рентгенівської дифрактограми епоксидного полімеру сітчастої будови (рис.) виявлено, що цей композит має аморфно-кристалічну структуру. На це вказує прояв на фоні уявного дифракційного максимума дифузного типу (аморфного гало), кутове положення ($2\theta_m$) якого становить близько $20,2^\circ$, двох основних по інтенсивності дифракційних максимумів дискретного типу ($2\theta_m=19,4^\circ$ і $22,7^\circ$), що характеризують кристалічну структуру ПЕО-складової.

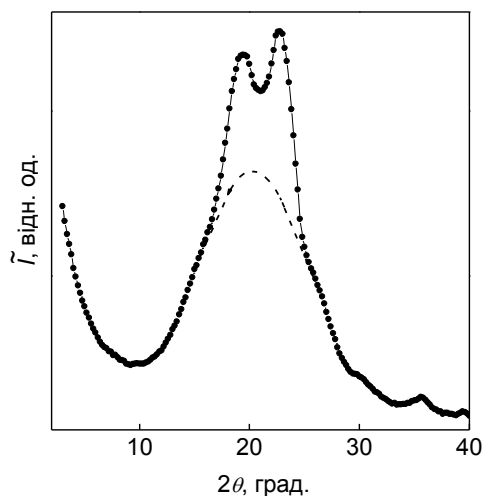


Рис. Ширококутова рентгенівська дифрактограма композиту (пунктирною лінією показано слід аморфного гало)

Оцінка середньої величини розміру кристалітів (L) ПЕО (у напрямку $2\theta_m=19,4^\circ$ і $22,7^\circ$), проведена за методом Шеррера:

$$L = \frac{K\lambda}{\beta \cdot \cos \theta_m},$$

де K – постійна, при невідомій формі кристалітів $K = 0,89$, λ – довжина хвилі характеристичного рентгенівського випромінювання ($\lambda = 0,154$ нм), β – кутова напівширина синглетних дифракційних максимумів дискретного типу, показала, що $L = 4,0$ нм.

ПРЕПАРАТИ ЕСЕНЦІАЛЬНИХ МІКРОЕЛЕМЕНТІВ НА ОСНОВІ N-ПОЛІОКСИЕТИЛЬОВАНИХ ПОХІДНИХ ГЛУТАМІНОВОЇ КИСЛОТИ

Олекса В. В., Нагорняк М. І., Василюшин Т. М., Стасюк А. В., Чех Б. О., Носова Н. Г.

Національний університет «Львівська політехніка»

viktorilaichyk@gmail.com

Серед речовин, які відіграють важливу роль у харчуванні тварин, значне місце займають мікроелементи, дефіцит яких призводить до порушень функції кровотворення, ендокринних залоз, захисних реакцій організму, обміну речовин та цілу низку інших дуже важливих функцій організму. Використання сучасних препаратів есенціальних мікроелементів, в яких йон мікроелементу знаходиться в формі хелатного комплексу з органічним лігандом є одним із шляхів збільшення ефективності виробництва продукції тваринництва, поряд зі зниженням вартості кормів.

В межах даної роботи розроблено і оптимізовано метод одержання препаратів мікроелементів на основі N-заміщеної глютамінової кислоти з приєднаними, за аміногрупою, фрагментами поліоксиетиленгліколів різної молекулярної маси. Синтез N-похідної глютамінової кислоти – ліганду, проводили шляхом алкілування аміногрупи глютамінової кислоти похідними поліоксиетиленовими естерами монохлороцтової кислоти. Перебіг реакції протікав з наступним одержанням суміші моно- (mPEGGlu) та ди- (dPEGGlu) замінених поліоксиетиленових похідних глютамінової кислоти (Рис. 1), співвідношення яких залежить від умов проведення реакції та молекулярної маси поліоксиетиленових фрагментів. Процес оптимізувався на максимальний вихід обох похідних, з наступним їх розділенням.



Рис. 1. Структурні формули mPEGGlu (а)
та dPEGGlu похідних глютамінової кислоти (б)

На основі одержаних лігандів розроблена методика одержання препаратів заліза (ІІ), марганцю, міді та цинку. Проведенні УФ-дослідження підтвердили, що солі металів на основі mPEGGlu проявляють яскраво виражену природу комплексних солей.

В Інституті біології тварин НААН, на препараті N-похідної глютамінової кислоти з йоном металу проводили ряд токсикологічних та цитологічних досліджень. В ході них встановили, що препарати есенціальних мікроелементів забезпечують ефективне функціонування організму при дозах в кормах, що практично на порядок менші за дози в яких використовуються промислові препарати, та при тому не мають жодного токсичного впливу.

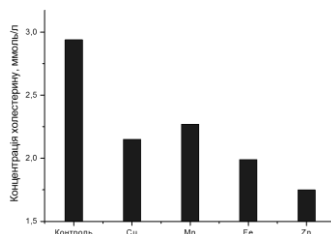


Рис. 2. Зменшення вмісту холестерину в шурів при згодовуванні їм корму насиченого мікроелементами

Проводили дослідження фізіологічної активності комплексів металів на щурах. При дослідженні піддослідних щурів було виявлено загальне покращення стану організму в порівнянні з контрольною групою. Для прикладу, на рисунку 2, приведено діаграму із зменшенням вмісту холестерину в крові у порівнянні із гризунами, яким згодовувався звичайний корм.

ОСОБЛИВОСТІ ФОРМУВАННЯ ПОВЕРХНІ МЕТАЛОНАПОВНЕНИХ ГІДРОГЕЛЕВИХ ПЛІВОК, ОДЕРЖАНИХ ВІДЦЕНТРОВИМ ФОРМУВАННЯМ

Похмурська А. В., Бедльовська Х. М., Гриценко О. М., Баран Н. М.

Національний університет «Львівська політехніка»

a.gaiduk92@gmail.com

Гідрогелеві матеріали, зокрема металонаповнені, у багатьох випадках під час експлуатації використовуються у вигляді плівок. Водночас на сьогоднішній день відсутні високопродуктивні технології формування плівкових та листових виробів на основі полімерних гідрогелів. Висока реакційна здатність та технологічність композицій на основі полівінілпіролідону (ПВП) та 2-гідроксіетилметакрилату (ГЕМА) створює передумови для одержання плівкових виробів на їх основі методом відцентрового формування. Відцентрове формування є одним із методів виготовлення виробів з пластмас у вигляді тіл обертання заливкою матеріалу, що знаходиться у в'язкотекучому стані, у форму, яка обертається в одній площині.

Кополімеризацію ГЕМА з ПВП здійснювали у присутності сульфату феруму (II), що дало можливість отримувати плівки з високою швидкістю за кімнатної температури, в присутності кисню повітря, без додаткового вакуумування. З метою суміщення стадій синтезу кополімеру і подальшого його набрякання, кополімеризацію ГЕМА і ПВП здійснювали у воді. Залежно від складу вихідної композиції та вмісту розчинника тривалість формування становить від 20 до 60 хв. Як наповнювачі використовували дрібнодисперсні порошки металів різної природи – Fe, Co, Ni, Pb, Zn, сплавів SmCo₅, FeCo.

Впровадження нового методу одержання плівкових матеріалів вимагає встановлення впливу технологічних умов формування на характеристики плівкових виробів, особливо, якості поверхонь. Якість композиційних плівок оцінювали візуально на основі отриманих фото їх поверхонь та перерізів, а також за шорсткістю зовнішньої (контактує з поверхнею циліндричної форми) та хвилястістю внутрішньої (направлена у порожнину форми) поверхонь. Виявлено, що у кожному випадку якість зовнішньої поверхні переважає над внутрішньою. Досліджено вплив складу вихідної композиції (співвідношення ГЕМА:ПВП, вмісту розчинника, вмісту та природи порошку металу-наповнювача), геометричних (діаметр відцентрової форми) та кінетичних (частота обертів форми) параметрів на формування поверхні гідрогелевих плівок. Встановлено, що різниця у якості поверхонь є наслідком розшарування наповнювача, яке зменшується із підвищенням в'язкості композиції та зменшення частоти обертів форми. В'язкість полімер-мономерної композиції зростає із збільшенням вмісту ПВП і зменшенням вмісту розчинника. Характер розподілу металевого наповнювача за товщиною плівки та якість її поверхонь в значній мірі залежить від реакційної здатності формувальної композиції та швидкості зміни її в'язкісних характеристик. Склад полімер-мономерної суміші також визначає тривалість таких технологічних параметрів, як час життєздатності (час, протягом якого композиція зберігає текучість) та час формування.

На основі експериментальних досліджень обґрунтовані способи відцентрового формування, які забезпечують найкращу якість поверхні металонаповнених плівок – введення до технологічного режиму стадії форполімеризації та поетапне підвищення частоти обертання циліндричної форми. Розроблена технологія дає можливість одержувати якісні плівкові вироби із заданою товщиною, з малою різнотовщинністю, яка не перевищує 1 %, на основі композицій з різною в'язкістю, багатшарових, армованих підкладками різної природи.

ВПЛИВ ЕЛЕКТРИЧНОГО ПОЛЯ НА СОРБЦІЮ ФЕНОЛФТАЛЕЇНУ МАГНІТОКЕРОВАНИМИ β -ЦИКЛОДЕКСТРИНВІСНИМИ ПОЛІМЕРАМИ

Радченко О. А., Сінельников С. І., Рябов С. В., Демченко В. Л.

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України

radchenkolenka777@gmail.com

В останні десятиліття використання магнітних наночастинок було поширене на багато видів застосувань і областей, таких як традиційні електричні, оптичні і магнітні області, і розширилося до декількох нових застосувань, включаючи магнітокеровані біосепарацію і біокаталіз, також сорбцію токсичних аніонів та катіонів, напр., As (V), Cr (VI) і U (VI). Основною екологічною проблемою, у зв'язку з промисловим використанням барвників, є забруднення стічних вод. Як природні сорбенти на даний час досить перспективними є полімери на основі β -циклодекстину (β -ЦД), за рахунок їх унікальної здатності формувати комплекси-включення з різноманітними органічними речовинами. Отримання магнітокерованих полімерів на основі β -ЦД має забезпечити швидке та достатньо просте відділення та видалення забруднюючих речовин із забрудненого середовища шляхом дії зовнішнього магнітного поля без додаткового центрифугування або фільтрації.

Таким чином, було синтезовано серію магнітокерованих β -ЦД-вмісних кополімерів (MPol) шляхом привиття їх на поверхню Fe_3O_4 , а також досліджено вплив постійного електричного поля (ПЕП, напруженість поля $E = 1 \times 10^6$ В/м) на процес сорбції фенолфталейну (ФФ). В таблиці приведені дані сорбційних властивостей синтезованих зразків.

Таблиця. Сорбційні властивості магнітокерованих β -ЦД-вмісних кополімерів

Зразок	Сорбція ФФ, %			
	Статичні умови		Дія ПЕП	
	1 год	4 год	1 год	4 год
Fe_3O_4	10	10	10	12
MPol-1	27	55	29	70
MPol-2	28	37	28	52
MPol-3	34	72	41	88

Отримані результати показали, що зразки магнітокерованих β -ЦД-вмісних кополімерів сприяють сорбції ФФ, також слід відмітити, що ефективніше цей процес проходить при дії ПЕП. Зразки MPol-1 та MPol-3 показали найкращі властивості, концентрація ФФ в присутності цих полімерів знижується до 12–30 % порівняно з використанням Fe_3O_4 (до 90 %) через 4 години.

Всі синтезовані кополімери можуть мати перспективу для застосування в якості компонентів фільтрів для очищення води від органічних забруднювачів.

**АНАЛИЗ МЕТОДОВ И НАПРАВЛЕНИЙ МОДИФИКАЦИИ ОТХОДОВ
ОБУВНЫХ ПОЛИУРЕТАНОВ***Радюк А. Н.*Витебский государственный технологический университет
ana.r.13@mail.ru

В настоящее время одним из самых перспективных материалов для подошв является полиуретан (ПУ), высокие показатели физико-механических свойств которого обеспечивают соответствие базовым эксплуатационным и технологическим требованиям, предъявляемым к обувным подошвам.

Полиуретановые подошвы обладают рядом преимуществ. При относительно низкой плотности материала и малой массе подошвы имеют высокие прочностные характеристики, сопротивление истиранию, устойчивость к многократному изгибу и растяжению, обладают хорошей теплоизоляцией, отличаются своей легкостью и эластичностью. Однако возможности их повторного использования в обувном производстве сильно ограничены. Это связано с процессами деструкции, окисления и вторичной сшивки, происходящими в полимере с течением времени и стимулируемыми любыми видами воздействия на материал. Накопление перерабатываемых крупнотоннажных отходов ПУ создает производственные, экономические и экологические проблемы. Одним из направлений решения данных проблем является модификация свойств полимерных композиций, варьирование их рецептуры и использование для этих целей отходов полиуретанов. Это позволяет сократить постоянно растущий объем отходов, обеспечить экономические выгоды за счет увеличения масштабов производства при неизменном размере сырьевой базы.

Среди многочисленных методов модифицирования одно из важных мест занимает физическое модифицирование свойств путем введения в них различных добавок – как низкомолекулярных, так и высокомолекулярных соединений. Недостатком данного метода является отсутствие возможности получать стабильные во времени композиции, добавки не являются доминирующими в определении свойств полученных измененных ПУ, главным остается химическая природа цепи, при смешивании ПУ с другими высокомолекулярными соединениями в системе возможны расслоения.

Наиболее перспективным является химическое модифицирование полимеров, обеспечивающее возможность направленного изменения свойств (позволяет существенно изменить свойства ПУ) и стабильность ПУ во времени.

Основными направлениями модификации полиуретановых композиций являются:

- модификация отходами ПВХ, ИК и ППУ в количестве от 15 до 40 % от общего объема ингредиентов, также можно добавлять дробленые технологические отходы соответствующей композиции в количестве 5–10 % исходного материала;
- модификация ППУ, при которой имеется возможность совместить процесс литья подошвы со вставкой вкладыша в ее каблучную часть и частичное заполнение пресс-формы гранулированными отходами ПУ (до 20 %);
- модификация отходами обувных картонов посредством введения в композицию наполнителя из отходов стелечного картона в количестве 3–30 %.

Таким образом, использование методов модифицирования в рамках основных направлений модификации позволяет придать ПУ требуемые эксплуатационные и физико-механические свойства, способствует восстановлению регулярности структуры, способствует удешевлению полиуретановых композиций, упрощает технологию изготовления из них изделий, обеспечивает возможность повторного использования ПУ, расширяет ассортимент материалов для обувной промышленности, способствует получения материалов и деталей для низа обуви различного назначения.

**ЗАХИСНІ МАТЕРІАЛИ ДЛЯ РЕМОНТНИХ РОБІТ
ГАЗОПРОМИСЛОВОГО ОБЛАДНАННЯ***Рассоха О. М., Черкашина Г. М., Тараненко І. А.*Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»
rassan2000@ukr.net

Розробка антикорозійних матеріалів з полімерних композитів, які характеризуються комплексом нових технологічних та експлуатаційних властивостей – перспективне завдання полімерного матеріалознавства в нафтогазовій промисловості. Серед матеріалів у сучасному матеріалознавстві виділяються фурано-епоксидні композити.

Фурано-епоксидні матеріали (ФАЕД) – це продукт термомеханічного суміщення фурфуролацетонowego мономеру ФАМ або ФА і епоксидних олігомерів (ЕД-16, ЕД-20 та ін.) і поєднують характеристики фуранового (низька в'язкість, висока здатність до змочування поверхні об'єкту захисту, підвищена стійкість до термічних, агресивних факторів експлуатації) та епоксидного інгредієнтів (високі механічна міцність, адгезія до субстратів). Для підвищення стійкості покриття до дії ударних навантажень при транспортуванні та монтажу труб з захисним покриттям, розроблені трикомпонентні сполучники на основі модифікованих фурано-епоксидних реакційноздатних олігомерів.

Тужавлювачі ФАЕД-амінні та аміноалкілфенольні агенти (поліетиленполіамін-ПЕПА, ціанетильований амін УП-0633М, Агідол АФ-2, та інші), що дозволяють при нормальних умовах тужавлення забезпечити високу ступінь структурування ФАЕД. Процес структурування регулюється використанням бінарних тужавлювачів (ПЕПА+УП-0633М, ПЕПА+мета-фенілендіамін та ін.) для формування захисного покриття з мінімумом структурних дефектів в об'ємі матеріалу та на межі поділу «метал – покриття». При цьому значно знижуються залишкові внутрішні напруження, в результаті чого зростає довготривалість при експлуатації в умовах сталого впливу фізичних та хімічних агресивних середовищ, факторів світлопогоди. При створенні фурано-епоксидних захисних композиційних систем доводиться вирішувати складне завдання з вибору оптимального співвідношення фуранового та епоксидного компонентів. При цьому головна мета оптимізації полягає в максимальному зниженні вмісту епоксидного полімеру в захисному покритті. Введення до складу антикорозійного матеріалу кам'яновугільної смоли сприяє підвищенню ефекта пластифікації, що призводить до зниження залишкових внутрішніх напружень в покритті, в результаті зростає ударна в'язкість, підвищуються експлуатаційні властивості та надійність функціонування захисної системи в цілому. Для підвищення експлуатаційної надійності захисної системи рекомендується використовувати адгезійні прошарки, що забезпечують формування міцного адгезійного контакту на межі поділу фаз «покриття – метал». Запропоновано формувати адгезійні прошарки на основі-поліацеталів: полівінілбутиралу, полівінілбутиральфурфуралу. Використання адгезійного прошарку завдяки взаємодифузії основних компонентів ФАЕД (моно- та діфурфуріліденацетонів) і поліацеталів значно підвищує адгезію покриття на поверхні газопромислового обладнання та його стабільну роботу під час експлуатації.

Розроблені матеріали рекомендується використовувати як захисні системи для газопромислового обладнання, а також для ділянок трубопроводів з підвищеною корозійною агресивністю ґрунтів та значними температурними і циклічними навантаженнями (на шлейфах свердловин, повітряних переходах, на компресорних станціях, після компресорних станцій тощо).

ФУРАНО-ЕПОКСИДНІ АНТИКОРОЗІЙНІ ПОКРИТТЯ ГРАДІЄНТНОЇ СТРУКТУРИ НА ПОВЕРХНІ БУДІВЕЛЬНИХ ЗАЛІЗОБЕТОННИХ ВИРОБІВ

Рассоха О. М., Черкашина Г. М., Корнева І. С.

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»
rassan2000@ukr.net

Конструкції з традиційних будівельних матеріалів (бетону, залізобетону) під впливом різних агресивних факторів під час експлуатації передчасно руйнуються. З метою підвищення експлуатаційної довготривалості та надійності на поверхню будівельних виробів та конструкцій наносять захисні покриття із полімерних композитів, стійких до дії хімічних, фізичних середовищ та експлуатаційних факторів. Бар'єрні захисні властивості покриттів з полімерних композитів залежать від складу полімерної матриці, його структурної однорідності, проникності, стійкості до дії факторів експлуатації (середовище, температура, сонячна радіація, знакозмінне навантаження тощо), адгезії до субстрату (бетону, залізобетону). Цей комплекс властивостей визначає довготривалість та ефективність застосування захисних покриттів в конкретних умовах експлуатації.

В якості полімерної матриці рекомендується використовувати фурано-епоксидні полімери, що характеризуються комплексом високих деформаційно-міцностних, технологічних та експлуатаційних властивостей. Основою матриці був обраний фурано-епоксидний реакційноздатний олігомер типу ФАЕД (суміш фурфуролацетонowego мономеру ФАМ і епоксидіанового олігомеру ЕД-16). Вміст епоксидного компонента у ФАЕД змінювався в інтервалі 20–80 мас. %, що забезпечує формування градієнтної структури антикорозійного покриття на поверхні будівельних виробів та конструкцій.

Тужавлювачем обрана суміш амінофенольного агента АФ-2 з *m*-фенілендіаміном в масовому співвідношенні 1:0,15–0,3. Доцільність використання бінарного тужавлювача обумовлена необхідністю ефективного регулювання швидкості структурування ФАЕД та зниження залишкових внутрішніх напружень в покритті на поверхні будівельних виробів.

Градієнтні фурано-епоксидні захисні антикорозійні покриття характеризуються комплексом високих технологічних, міцностних та експлуатаційних показників. Застосування бінарного тужавлювача при структуруванні ФАЕД призводить до суттєвого зростання якості градієнтного антикорозійного покриття. Встановлено, що залишкові внутрішні напруження, які обумовлені усадковими явищами в фурано-епоксидних покриттях, знаходяться на рівні 3–5 МПа, тобто нижче міцності цих матеріалів на розрив (20–35 МПа). В процесі експлуатації порушення суцільності покриття (наявність пір, тріщин, каверн, каналів тощо) не відбувається. Причому найбільш небезпечними періодами тріщиноутворення в градієнтних фурано-епоксидних покриттях є тривалі терміни структурування реакційноздатного олігомеру ФАЕД. (30 діб та більше), тому що полімерна матриця в цей період знаходиться у склоподібному стані і захисний матеріал має чітко виражену крихкість. Деформації усадки в період формування захисного антикорозійного покриття на поверхні будівельних виробів та конструкцій практично повністю обумовлюють утворення внутрішніх напружень в полімерній матриці. При цьому можуть виникнути структурні дефекти (переважно система тріщин). Напруження в прошарку градієнтного покриття виникають за рахунок сил адгезії до жорсткого субстрату (бетону, залізобетону), що перешкоджають вільним усадковим деформаціям.

Таким чином, розроблені та досліджені антикорозійні градієнтні фурано-епоксидні матеріали забезпечують формування ефективних покриттів на поверхні будівельних виробів та конструкцій з бетону та залізобетону.

ДОСЛІДЖЕННЯ БІОДЕГРАДАЦІЇ ПОЛІМЕРНИХ МАТЕРІАЛІВ З ТІАМУЛІН ФУМАРАТОМ НА ОСНОВІ ПОЛІУРЕТАНСЕЧОВИНИ З ФРАГМЕНТАМИ КОПОЛІМЕРУ N-ВІНІЛПІРОЛІДОНУ З ВІНІЛАЦЕТАТОМ ТА ВІНІЛОВИМ СПИРТОМ У ЇХ СТРУКТУРІ

Руденчик Т. В., Рожнова Р. А., Галатенко Н. А.

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України

rudenchyk@gmail.com

Однією з найважливіших характеристик полімерів медичного призначення є їх здатність до біодеградації в умовах, які імітують середовище організму, оскільки цей процес може впливати на кількість вивільненої лікарської речовини в умовах *in vivo*. Тому мета роботи полягає у дослідженні біодеградації поліуретансечовин (ПУС) з фрагментами кополімеру N-вінілпіролідону з вінілацетатом та вініловим спиртом (ВП-ВС) і 1,6-гексаметилендіаміну (ГМДА), синтезованих за різного відсоткового співвідношення ГМДА до кополімеру (40:60; 50:50; 60:40; 70:30) та композиційних матеріалів з тіаmulін фумаратом (у кількості 1 мас. %), отриманих на їх основі методом ІЧ-спектроскопії та за зміною їх фізико-механічних показників до та після їх інкубації у біологічному середовищі 199 (БС 199) протягом 1, 3 та 6 місяців.

За результатами фізико-механічних випробувань, ПУС із фрагментами кополімеру ВП-ВС під дією БС 199 залишаються стабільними, про що свідчить підвищення міцносних характеристик, тоді як полімерні матеріали з тіаmulін фумаратом на основі ПУС із фрагментами кополімеру ВП-ВС у структурі здатні до біодеградації, що підтверджується зниженням значень міцності та відносного подовження при розриві всіх досліджуваних зразків (табл.).

Таблиця. Фізико-механічні властивості ПУС після інкубації у БС 199

Зразки ПУС	ГМДА/ ВП-ВС	Міцність при розриві, σ , МПа				Відносне подовження при розриві, ϵ , %			
		контроль	1 міс.	3 міс.	6 міс.	контроль	1 міс.	3 міс.	6 міс.
ДФП+ГМДА +ВП-ВС	40:60	1,9	2,1	2,1	1,5	38	43	29	22
	50:50	1,6	2,3	2,3	2,1	27	39	34	22
	60:40	2,0	2,5	2,8	2,7	37	42	32	29
	70:30	2,8	3,7	4,0	4,1	46	80	73	81
ДФП+ГМДА + ВП-ВС+ тіаmulін фумарат	40:60	5,7	2,3	1,7	2,4	72	56	45	52
	50:50	3,0	1,5	2,5	1,9	43	29	31	28
	60:40	4,1	2,1	3,0	3,2	61	41	40	45
	70:30	7,3	3,6	4,4	4,3	100	72	76	55

Результати ІЧ-спектроскопії підтверджують біодеградацію досліджуваних матеріалів у БС 199 за зниженням інтенсивності смуги поглинання $\nu_{C=O}$ вінілпіролідонного кільця 1660 см^{-1} з одночасним перерозподілом міжмолекулярних водневих зв'язків $\nu_{NH-вільн.}$ (3506 см^{-1}) та деформаційних коливань NH-груп (1632 см^{-1}), що пов'язано зі структуруванням полімерних матеріалів у молекулах поверхневого шару.

Таким чином, за результатами фізико-механічних та ІЧ-спектроскопічних досліджень введення тіаmulін фумарату до складу ПУС сприяє їх біодеградації у модельному БС 199, що ймовірно відбувається за рахунок вивільнення лікарської речовини з полімерної матриці.

SOL-GEL SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF PROTON CONDUCTIVE MEMBRANES

Rymsha Kh. V., Zhyhailo M. M., Demchyna O. I., Yevchuk I. Yu.

Department of Physico-chemistry of Fossil Fuels L.M. Lytvynenko Institute of Physico-organic Chemistry and Coal Chemistry, NAS of Ukraine
demchynaoksana@ukr.net

Nowadays many types of hybrid organic-inorganic materials are developed because of their wide application, in particular as proton conductive membranes in fuel cells. The objective of our study was to prepare organic-inorganic materials with proton conductive properties using sol-gel method of synthesis. Acrylic monomers: acrylonitrile (AN), acrylamide (AAM) and 3-sulpho-propylacrylate potassium salt (SPAK) were chosen to create polymer matrix in the process of UV-curing. Inorganic counterpart was formed as a result of sol-gel process of TEOS-based sol-gel system (SGS) during photo-initiated polymerization *in situ*. The ratio between monomers was SPAK:AAM:AN = 25,3:58,5:16,2 (wt. %); SG content in feed composition was varied from 10 till 40 wt. %.

The composition and chemical structure of synthesized films were investigated by ATR-FTIR spectroscopy.

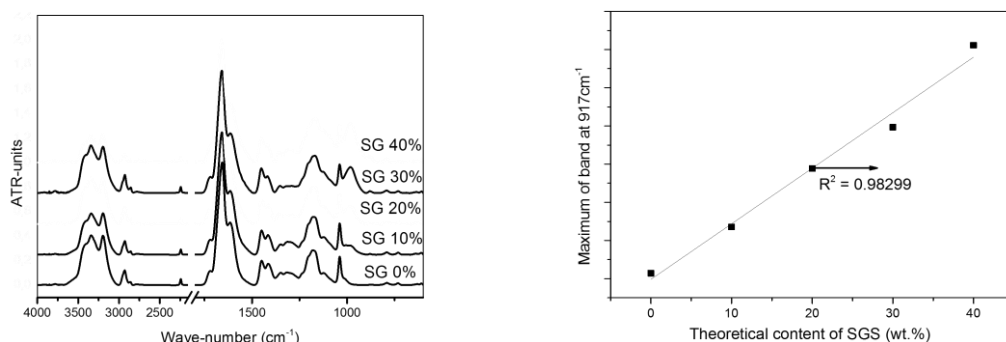


Fig. 1. FTIR spectra of membranes with different content of SGS

FTIR spectra reveal the presence of inorganic ingredient in the samples: Si-O bonds of siloxane network give the absorption peak at 980 cm⁻¹ (stretching vibration of $\nu(\text{Si-O})$). In addition, the relative intensity of the bands rises with increasing amounts of SGS in polymer matrix. The existence of Si-O-Si peak (the band at 917 cm⁻¹) proves the occurrence of hydrolysis and condensation reactions of TEOS and suggest the formation of crosslinked silica network structure in the membranes. Thus, the cross-linked hybrid organic-inorganic membranes were fabricated as desired.

Proton conductivity of synthesized membranes (due to the presence of sulpho groups) was measured by impedance spectroscopy. Nyquist plot for the sample of organic-inorganic membrane with 20 wt. % of SGS, added into feed composition, is presented in Fig. 2. Proton conductivity of obtained membranes, calculated from the data of impedance spectroscopy, was 10^{-3} – 10^{-4} Sm/cm.

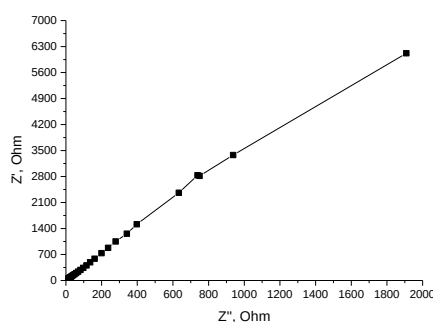


Fig. 2. Nyquist plot for the sample PMSG20

Acknowledgement. The authors are grateful to DAAD program for financial support (Research Grants for Doctoral Candidates and Young Academics and Scientists 2015/16, program ID 57130104) and Dr. Mikhail Malanin for assistance.

**МІКРОСТРУКТУРА ПОЛІМЕРНИХ НАНОКОМПОЗИТІВ, НАПОВНЕНИХ
ВУГЛЕЦЕВИМИ НАНОТРУБКАМИ***Рябченко В. В., Лисенков Е. А.*Миколаївський національний університет ім. В. О. Сухомлинського
ealysenkov@ukr.net

Головною задачею у дослідженні полімерних наноккомпозитів є вивчення властивостей таких систем при переході структурної організації наповнювача від нано- до мікророзмірів. Тому, морфологічна характеристика відіграє фундаментальну роль у розумінні зв'язку між структурою та властивостями полімерних наноккомпозитів. Для встановлення факторів, які покращують або погіршують функціональні характеристики полімерних наноккомпозитів, сприяють оптимізації виготовлення таких матеріалів, важливо розвивати методи, методології та інструменти, щоб характеризувати утворені наповнювачем структури та морфологію наноккомпозитів.

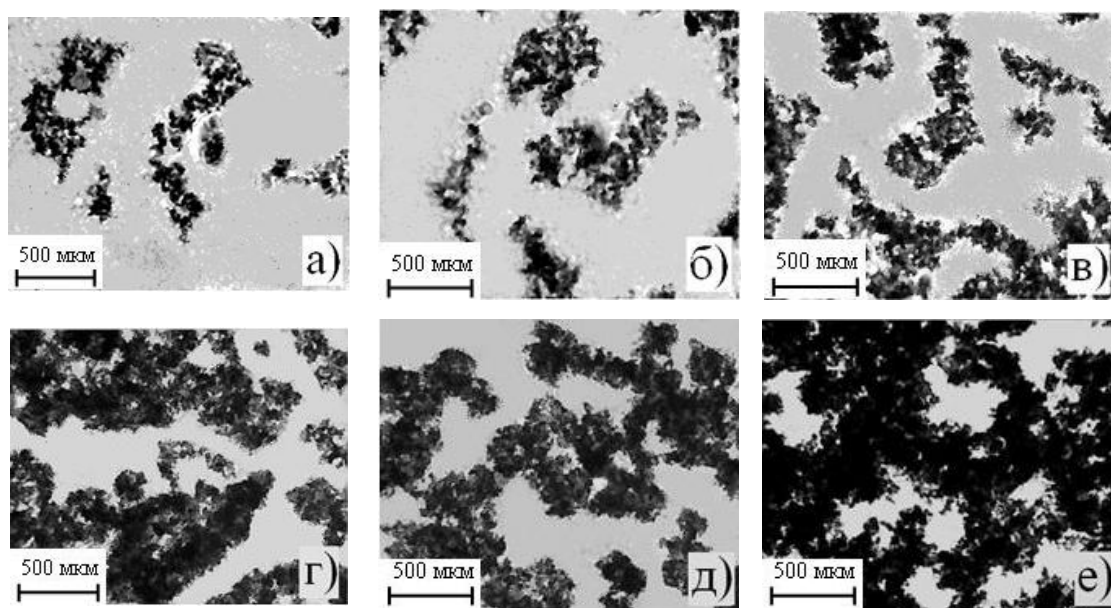


Рис. Мікрофотографії системи на основі ППГ та ВНТ при збільшенні $\times 20$.
Вміст нанотрубок: а) 0,075 %; б) 0,1 %; в) 0,3 %; г) 0,4 %; д) 0,5 %; е) 0,75 %

У результаті проведеної роботи були вивчені особливості мікроструктури модельних систем на основі поліетерів та ВНТ, а також вплив різних факторів на структурну організацію ВНТ у поліетерній матриці. Встановлено, що у досліджуваних системах, при деякій пороговій концентрації ВНТ (0,45 %) спостерігається типовий перколяційний перехід, при цьому ВНТ, або їх агрегати, утворюють сітку, яка пронизує весь об'єм досліджуваного матеріалу (рис.). Показано, що для систем на основі поліетерів та ВНТ, величина ступеню макродисперсності нелінійно спадає зі зростанням вмісту нанотрубок. Така поведінка макродисперсності вказує на високу ступінь агрегації ВНТ у поліетерних матрицях. Виявлено, що для всіх досліджуваних поліетерних матриць, які є різними за своєю природою, ступінь макродисперсності є майже однаковим і змінюється лише у межах похибки. Цей факт свідчить про подібні процеси агрегації, які протікають у даних системах. Встановлено, що максимальний розмір агрегатів змінюється стрибкоподібно в області концентрацій ВНТ від 0,3 % до 0,5 %. Такий ефект пов'язаний із перколяційним переходом і утворенням «неперервного» кластеру у цій області концентрацій ВНТ. Структурі систем поліетер–ВНТ притаманна масштабна інваріантність, а її властивості можна описати у рамках фрактального або скейлінгового підходу.

NANOPOROSITY FORMATION OF BROWN COAL ADSORBENTS DURING HEAT-SHOCK ALKALI ACTIVATION

Saberova V. O., Tamarkina Ju. V.

L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic and Coal Chemistry, Kyiv
Tamarkina@nas.gov.ua

Alkaline activation is a well-known method for the porous structure development of adsorbents from any kind of carbonaceous solids: polymers, biomass, coke, pitch, graphene, different rank coals. A significant development of the specific surface area ($S \geq 2000 \text{ m}^2/\text{g}$) is observed when using large alkali/coal ratios ($R \geq 2 \text{ g/g}$) under ordinary activation conditions, comprising two stages: 1) thermoprogrammed heating (4–10 deg/min) to 800°C and 2) isothermal exposure ($\geq 1 \text{ h}$). Carrying out stage 1 as a heat shock (HS) - the rapid introducing of samples into a reactor zone pre-heated up to 800°C makes it possible to develop a surface up to $S = 1500\text{--}2000 \text{ m}^2/\text{g}$ at low ratios $R = 0.5\text{--}1.0 \text{ g/g}$.

The aim of this work is to study the nanoporous structure of brown coal adsorbents prepared by alkaline activation varying temperature of heat shock t_{HS} .

A t_{HS} increase in the range from 400 to 800°C causes a decrease in the activated solid yield from 67% to 25% and an increase in the specific surface to $S \sim 2000 \text{ m}^2/\text{g}$ (Table). The main development of the surface occurs due to formation of pores with a diameter $\leq 5 \text{ nm}$ and only at $t_{\text{HS}} = 400^\circ\text{C}$ the pores with $D \leq 4 \text{ nm}$ are not formed. The micropores surface S_{mi} ($D \leq 2 \text{ nm}$) and subnanopores surface $S_{1\text{nm}}$ ($D \leq 1 \text{ nm}$) develops predominantly at $t_{\text{HS}} \geq 400^\circ\text{C}$. Their portions (S_{mi}/S and $S_{1\text{nm}}/S$) sharply increase to 600°C and then (from 600°C to 800°C) change slightly while the specific surface of these pores monotonically increases with increasing heat shock temperature.

Table. Yields and pore structure characteristics of brown coal adsorbents ($R = 1.0 \text{ g/g}$)

Parameter	Heat shock temperature $t_{\text{HS}}, ^\circ\text{C}$						
	400	500	600	650	700	750	800
Yield, %	67	51	46	42	35	29	25
$S, \text{ m}^2/\text{g}$	14.7	317	515	664	993	1481	1947
$S_{\text{mi}}, \text{ m}^2/\text{g}$	0	252	478	601	930	1380	1869
$S_{1\text{nm}}, \text{ m}^2/\text{g}$	0	166	444	581	917	1365	1840
$S_{\text{mi}} / S_{\Sigma}$	0	0.795	0.928	0.905	0.937	0.932	0.960
$S_{1\text{nm}} / S_{\Sigma}$	0	0.524	0.862	0.875	0.923	0.922	0.945
$dS_1, \text{ m}^2/\text{g}\cdot\text{nm}$	0	538	1260	1850	2930	4230	7340
$dS_2, \text{ m}^2/\text{g}\cdot\text{nm}$	0	169	49	38	21.6	9.2	69
$dS_3, \text{ m}^2/\text{g}\cdot\text{nm}$	2.3	13.4	18.8	30.9	34.3	63.1	45.8
$V_{\Sigma}, \text{ cm}^3/\text{g}$	0.124	0.355	0.322	0.471	0.568	0.867	0.892
$V_{\text{mi}}, \text{ cm}^3/\text{g}$	0	0.051	0.142	0.180	0.283	0.426	0.526
$V_{1\text{nm}}, \text{ cm}^3/\text{g}$	0	0.126	0.169	0.197	0.293	0.433	0.547

The specific surface distribution, defined as $(dS/dD)\text{-}D$ relationship, is characterized by maxima dS_1 , dS_2 , dS_3 in the pore diameter ranges $D \leq 1 \text{ nm}$, micropores with $D = 1\text{--}2 \text{ nm}$, mesopores with $D > 2 \text{ nm}$, respectively. The dS_1 maximum value increases with temperature according to the Arrhenius equation ($r^2 = 0.983$). The effective activation energy (E_{S1}) for a process of the subnanopores surface area increment $E_{S1} = 56.7 \text{ kJ/mol}$, where mole is the quantity of surface atoms that must be removed to form a 1 m^2 specific surface. Pore size distribution as $dV/dD\text{-}D$ relationship changes with t_{HS} in the same manner; the value of $E_{V1} = 56.7 \text{ kJ/mol}$ ($r^2 = 0.989$) is equal to the E_{S1} value.

Thus, the heat shock is a powerful method to develop the nanoporous structure of the brown coal adsorbent during alkaline activation.

ВЛАСТИВОСТІ ГІДРОФІЛЬНИХ ПОЛІУРЕТАНСЕЧОВИН З ЛІЗОЦИМОМ, ЯКІ МІСТЯТЬ У СТРУКТУРІ ФРАГМЕНТИ КОПОЛІМЕРУ N-ВІНІЛПІРОЛІДОНУ ВІНІЛАЦЕТАТУ З ВІНІЛОВИМ СПИРТОМ

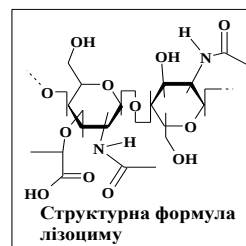
Сташенко К. В., Руденчик Т. В., Рожнова Р. А., Кісельова Т. О.

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України

katuwka2014@gmail.com

Для надання полімерним матеріалам медичного призначення спорідненості до тканин організму доцільним є введення до структури поліуретансечовин (ПУС) гідрофільних ланцюгів кополімеру N-вінілпіролідону вінілацетату та вінілового спирту (ВП-ВС), який широко використовують в медицині.

На сьогодні існує проблема створення біологічно активних гідрофільних композиційних матеріалів з пролонгованою гідролічною активністю, які можна використовувати як покриття для лікування ран та опіків. З цієї точки зору заслуговує уваги лізоцим, який є сполукою біологічно активною, дія якої може бути направлена на розчинення некротичних мас. Відомо використання лізоциму при лікуванні опіків, гнійних процесів, відмороження, ерозії роговиці ока та інших захворюваннях.



Тому було отримано ряд гідрофільних полімерних матеріалів з лізоцимом (1 мас. %) на основі поліуретансечовин, які містять у своїй структурі фрагменти кополімеру ВП-ВС та діамінів (ДА), як подовжувачів макроланцюга 1,6-гексаметилендіамін (ГМДА) та 4,4'-діамінодифенілметан (ДАДФ) синтезованих за різного співвідношення ДА:ВП-ВС та дослідження їх властивостей.

За результатами досліджень фізико-механічні властивості ПУС залежить від складу та співвідношення компонентів при синтезі (табл.). Встановлено, що із зменшенням кількості кополімеру ВП-ВС у структурі ПУС з ГМДА та з ДАДФ спостерігається збільшення міцності та відносного подовження при розриві.

Таблиця. Фізико-механічні властивості ПУС та ПУС наповнених лізоцимом

Зразки ПУС	ДА/ВП-ВС, %	σ , МПа	ϵ , %	T_c , °C	ΔC_p , Дж/(г°C)
ДФП+ГМДА+ВП-ВС	70:30	8,5	302	-47,8	0,2523
	50:50	4,7	274	-43,5	0,2964
	30:70	3,6	183	-50,5	0,2111
ДФП+ГМДА+ВП-ВС+лізоцим	70:30	23,7	217	-39,4	0,2787
	50:50	9,1	268	-40,8	0,2264
	30:70	5,3	176	-33,5	0,3104
ДФП+ДАДФ+ВП-ВС	70:30	6,4	98	-41,8	0,2665
	50:50	4,9	94	-42,6	0,2297
	30:70	3,9	92	-43,9	0,2309
ДФП+ДАДФ+ВП-ВС+лізоцим	70:30	11,5	76	-31,5	0,2772
	50:50	8,5	59	-32,7	0,2183
	30:70	7,7	55	-32,1	0,2127

Введення до складу отриманих ПУС лізоциму приводить до підвищення міцності при розриві в порівнянні з контрольними зразками ПУС з ГМДА від 47 % до 179 % та для ПУС з ДАДФ від 43 % до 97 %.

В ряду ПУС з фрагментами кополімеру ВП-ВС, синтезованих з подовжувачем макроланцюга ГМДА при збільшенні концентрації ВП-ВС у структурі ПУС при другому прогріві спостерігається незначне підвищення значень температури силювання (T_c) та стрибка теплоємності (ΔC_p), тоді як з подовжувачем макроланцюга ДАДФ – незначне зниження, що може бути пов'язано зі зміною сегментальної рухливості макромолекул.

СЕНСОРНІ ВЛАСТИВОСТІ ПЛІВОК ПОЛІАНЛІНУ НА ПОЛІЕТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТНІЙ ПІДКЛАДЦІ

Стеців Ю. А., Стасевич С. М., Яцишин М. М., Решетняк О. В.

Львівський національний університет імені Івана Франка

yulya_hnisdyuch@ukr.net

Електропровідні полімери, і ПАн зокрема, є перспективними матеріалами для конструювання різноманітних сенсорів завдяки простоті синтезу; низькій вартості реагентів; стабільності в агресивних середовищах; інертності по відношенню до більшості органічних розчинників; залежності оптичних властивостей полімеру від зміни його хімічної структури. Однак, недоліком ПАн є погані механічні властивості, які обмежують можливості його використання. Для вирішення цієї проблеми ПАн наносять на різні полімерні субстрати, які забезпечують відповідні механічні характеристики.

Чутливий елемент сенсора – плівку ПАн, отримували на поверхні поліетилентерефталатного (ПЕТ) субстрату методом самоорганізації в процесі хімічної полімеризації 0,05 М розчину аніліну *in situ* 0,08 М амоній пероксодисульфатом (АПС) у водних (0,5; 1 і 2 М) розчинах цитратної кислоти (ЦК). Для дослідження оптичних властивостей плівки ПАн на ПЕТ субстраті, зразки обробляли парами NH_3 різних концентрацій (25–2 000 ppm) впродовж 15 с. Оптичні спектри фіксували за допомогою спектрофотометра Cadas 100.

Зокрема, ми виявили, що в допованому стані ПАн, осаджений на ПЕТ, дає швидкі і відтворювані оптичні відклики в діапазоні концентрацій амоніаку від 20 до ~2 000 ppm.

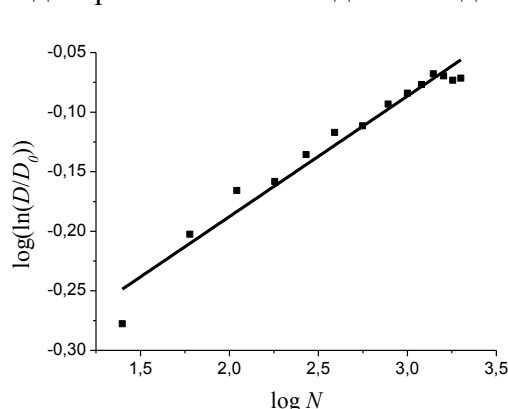


Рис. Калібрувальна крива плівки ПАн/ПЕТ від концентрації амоніаку, при $\lambda = 830$ нм та концентрації ЦК 0,5 М

Оскільки поглинання ПАн контролюється дифузією амоніаку в плівці ПАн, то взаємозв'язок між абсорбцією та концентрацією амоніаку можна виразити наступним рівнянням:

$$D = D_0 \exp[(\alpha N^\gamma)], \quad (1)$$

де D_0 – початкова абсорбція; D – абсорбція за концентрації N амоніаку; α , γ – константи.

Відповідно до рівняння (1), $\log(\ln(D/D_0))$ є пропорційним до $\log N$. Типову калібрувальну криву, отриману за рівнянням (1), показано на рис. Як видно з рис., для отриманих залежностей характерний лінійний діапазон у всьому досліджуваному інтервалі концентрацій амоніаку (25–2 000 ppm).

Збільшення концентрації ЦК в реакційному середовищі сприяє кращій лінійності одержаних калібрувальних кривих (табл.), а отже і кращій точності. За нахилом калібрувальних графіків розраховано чутливість плівок ПАн до парів амоніаку (табл.).

Таблиця. Значення чутливості плівок ПАн на пари амоніаку

Концентрація ЦК	R^2	Чутливість/ppm
0,5	0,95889	0,101
1	0,97618	0,157
2	0,9871	0,274

З отриманих результатів видно, що вища концентрація ЦК в реакційному середовищі покращує чутливість отриманих плівок ПАн до аналіту.

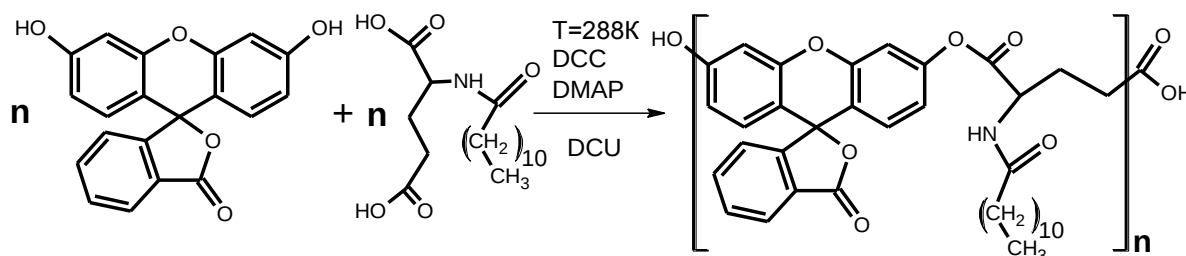
ОСОБЛИВОСТІ КОПОЛІКОНДЕНСАЦІЇ ФЛУОРЕСЦЕЇНУ В УМОВАХ РЕАКЦІЇ СТЕГЛІХА

Ференс М. В., Варваренко С. М., Фігурка Н. В., Майкович О. В.

Національний університет «Львівська політехніка»

ferensmariia@gmail.com

Використання молекулярних флуоресцентних зондів є поширеним прийомом в оптичній біомедичній діагностиці. Такі сполуки можуть бути використані для оцінки життєздатності клітин, для вимірювання ферментативної активності, як флуорогенні маркери для отримання біомолекулярних зображень та індикації присутності певних іонів або як складова частина складних конструкцій для доставки ліків – тераностики. Цілий ряд субстратів здатних до вивільнення флуорофору під дією ферментів побудовано на відомому флуоресцентному барвнику ксантенового ряду – флуоресцеїні. У зв'язку з цим актуальним завданням є синтез нових естерних похідних флуоресцеїну, як перспективних флуорогенів, властивості яких визначаються використанням замісників з регульованим біорозподілом, а також більш складних амфіфільних сполук естерного типу в яких флуоресцеїн може бути включений в структуру молекули.



DCC - дициклогексилкарбодіімід DMAP - диметиламінопіридин DCU - дициклогексилсечовина

Рис. Схема реакції конденсації флуоресцеїну з 2-(додеканаміно)пентандіоною кислотою за реакцією Стегліха

Синтез нових естерів здійснювали через реакцію активованої естерифікації (за Стегліхом) при загальній концентрації флуоресцеїну та 2-(додеканаміно)пентандіонової кислоти 0.16 моль/см³ за їх різних співвідношень у метиленхлориді, бензені та його сумішах з диметилформамідом (рис.). Перебіг реакції контролювали за кількістю виділеної дициклогексилсечовини (DCU). Структуру отриманих продуктів підтверджували ПМР-та ІЧ-спектроскопією, молекулярну масу – гель-проникною хроматографією.

Встановлено, що проведення процесу в традиційних для реакції Стегліха розчинниках (метиленхлорид, бензен) є неефективним через недостатню розчинність флуоресцеїну. Синтез за умови надлишку (10 % мольних) карбоксильних груп в початковій реакційній суміші супроводжується низькими виходами (менше 45 %) через перегрупування значної частини активованої дициклогексилкарбодіімідом карбоксильної групи кислоти. Використання в суміші розчинників диметилформаміду (до 15 %), та проведення синтезу за умови незначного надлишку флуоресцеїну (5 % мольних) дозволило отримати олігоестери флуоресцеїну і 2-(додеканаміно)пентандіонової кислоти з практичними виходами понад 80 % та ступенем поліконденсації 5–8 (ММ = 2500).

Синтезовані олігоестери флуоресцеїну, в літературі не описані і можуть бути цікавим продовженням лінійки латентних похідних флуоресцеїну з точки зору дослідження їх фармакокінетики для створення методик біохімічних аналізів.

**МЕТАЛЛ-ПОЛИМЕРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ НА ОСНОВЕ СОПОЛИМЕРОВ
ПОЛЭТИЛЕНПРОПИЛЕНГЛИКОЛЬМАЛЕИНАТОВ С АКРИЛОВОЙ
КИСЛОТОЙ**

Хамитова Т. О., Буркеев М. Ж., Тажбаев Е. М., Жапарова Л. Ж.
Карагандинский государственный университет имени Е. А. Букетова,
Караганда, Казахстан
khamitova.t@inbox.ru

В мировой практике появилась тенденция получения и использования новых типов катализаторов на основе ультрамелких частиц металлов, помещенных в пористые материалы. Данные каталитические системы получили название – металлополимерные нанокompозиты. Синтез новых нанокатализаторов типа «металл-полимерная матрица», в сочетании с синтезом каталитически активных переходных металлов, внесенных на полимерные носители, открывает огромную область их применения. Поэтому на сегодняшний день поиск новых каталитических систем, в частности нанокатализаторов, обладающих высокой активностью, является актуальной задачей.

Новые металлополимерные нанокompозиты были получены методом иммобилизации ультрамелких частиц металлов, в частности никеля и кобальта в полимерные подложки сополимеров полиэтилен-(пропилен)-гликольмалеината с ненасыщенными карбоновыми кислотами.

Содержание и морфологические данные металлов в катализаторе определены на атомно-абсорбционном спектрометре Varian AA-140 (Австрия), сканирующем атомно-силовом JSPM – 5400 (фирма «JEOL Ltd.»).

Из проведенных физико-химических методов исследования было выявлено, что в синтезированных нами металлополимерных нанокатализаторах размер иммобилизованных наночастиц металлов составляет 130 нм и они равномерно распределены, и составили 3 масс. %.

DESCRIPTION OF THE KINETICS OF RELEASE OF AMIKACIN FROM THE POLYMER MATRIX

Shurshina A. S.

Bashkir State University, Ufa, Russia
anzhela_murzagil@mail.ru

At present the attention of researchers is devoted to the study of polymer systems for controlled release of medicinal substance (MS). For the description of kinetics of release of MS from polymeric systems there is a set of models. Among them it is possible to note the equation of Ritger and Peppas which can be used for the characteristic of release of medicine both from swelling up, and from not swelling up polymeric matrixes. Analysis of the kinetics release of MS from the chitosan films in the conditions of interface of processes of diffusion and dissolution of a polymeric matrix became the purpose of this work.

We used the sample of a chitosan (ChT) of production of Bioprogress (Russia) received by an alkaline deacetylation of crab chitin (deacetylation degree ~ 84 %) with $M_{sd}=113000$ (ChT1) and 334000 (ChT2). As the medicinal substance (MS) an antibiotic amikacin (AM) was used. Film samples were prepared similarly. The content of MS in a film was 0.1 mol/mol of ChT. The kinetics of release of MS was described, using Ritger – Peppas's equation: $G_s/G_\infty = Kt^m$, where G_s is quantity of MS released from a polymeric matrix by the time of t ; G_∞ is equilibrium quantity of the released MS; K is the kinetic constant characterizing the rate of release of MS from a polymeric matrix; m is the exponential parameter connected with the mechanism of release of MS.

The films received from a high-molecular sample of ChT2 were dissolved in water rather slowly and during the experiment they changed the initial weight no more than to 3–5 %. At immersion in water chitosan films formed from samples of ChT1, they lose weight quickly enough, owing to dissolution. Distinction in solubility of films of different samples of ChT finds the reflection in kinetics of release of MS from films. In the case of insoluble matrix, it is possible to speak about the prolonged release of MS from a film, in the case of soluble, - no, as all MS completely releases during the time comparable to time of dissolution of a film. According to it, application by the equation of Ritger – Peppas for the description of kinetic regularities of release of AM in case of an insoluble and soluble polymeric matrix give various results (table).

Time of annealing, min	K, min ⁻¹		Coefficient of correlation	
	ChT1	ChT2	ChT1	ChT2
0	0.021	0.045	0.93	0.98
30	0.062	0.041	0.93	0.98
60	0.028	0.040	0.94	0.99
120	0.070	0.039	0.95	0.99

From data of the table it is visible that the correlation coefficient in case of use of the dissolved ChT1 is less, than when using ChT2, almost not dissolved during the experiment. But it's not in numerical values of coefficient of correlation, and in that Ritger-Peppas's equation accurately reflects the regularities which are observed in experimental conditions only for ChT2. In this case the values of kinetic constants K determined by the equation for the films subjected to isothermal annealing accurately reflect the regularities observed in the experiment, namely – the increase in the time of isothermal annealing which is followed by the decrease of solubility of a polymeric matrix in water leads to the decrease of the rate of release of MS. When using ChT1 Ritger-Peppas's equation practically doesn't work. Thus, the equation of Ritger-Peppas works correctly only in the case of the insoluble matrix.

СТРУКТУРА КОМПОЗИТІВ ПОЛІАНІЛІН/КАОЛІНІТ

Ціко У. В., Сидорко М. С., Яцишин М. М.

Львівський національний університет імені Івана Франка,

вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

ulyana.ziko@gmail.com

Поліанілін (ПАН) є важливим представником електропровідних полімерів і одним із найбільш досліджуваних та технологічно важливих спряжених полімерів. Поєднанням властивостей ПАН і речовин різної природи, особливо природних мінералів (ПМ), створюють гібридні композити (ГК), які поєднують в собі властивості ПАН та ПМ проявляючи при цьому ряд унікальних властивостей. Серед використовуваних ПМ найбільш поширеними є філосілікати три-, та двошарової структури, як от монтморилоніт та каолініт (Кт) [1]. Україна багата різноманітними ПМ, які, однак, мало досліджують вітчизняні науковці-хіміки для створення ГК з ПАН. Мета нашої роботи полягала в синтезі композитних матеріалів на основі поліаніліну та каолініту (ПАН/Кт) окисненням анілін сульфату (АнСт) амонійпероксодисульфатом (АПС) *in situ* у водних розчинах H_2SO_4 за наявності колоїдних дисперсій Кт та дослідження їхньої структури. Для синтезу ПАН/Кт використовували різні кількості Ан, окисника – АПС та Кт, а готові зразки досліджували за допомогою рентгенівського (Дрон-4) та інфрачервоного з Фуре перетворення Nicolet IS10 аналізів.

Таблиця. Співвідношення компонентів при синтезі зразків композитів

Зразок	$m(\text{АнСт}), \text{г}$	$n(\text{Ан}), \text{моль}$	$m(\text{АПС}), \text{г}$	$n(\text{АПС}), \text{моль}$	$m(\text{Кт}), \text{г}$
Кт/ПАН (1)	2,863	0,02016	4,563	0,02016	0,125
Кт/ПАН (2)	2,672	0,01881	4,291	0,01881	0,250
Кт/ПАН (3)	2,290	0,01613	3,677	0,01613	0,500
Кт/ПАН (4)	1,909	0,01344	3,065	0,01344	0,750
Кт/ПАН (5)	1,526	0,01074	2,452	0,01074	1,000

Дифрактограми та ІЧ-ФП спектри синтезованих зразків, а також Кт зображені на рисунку.

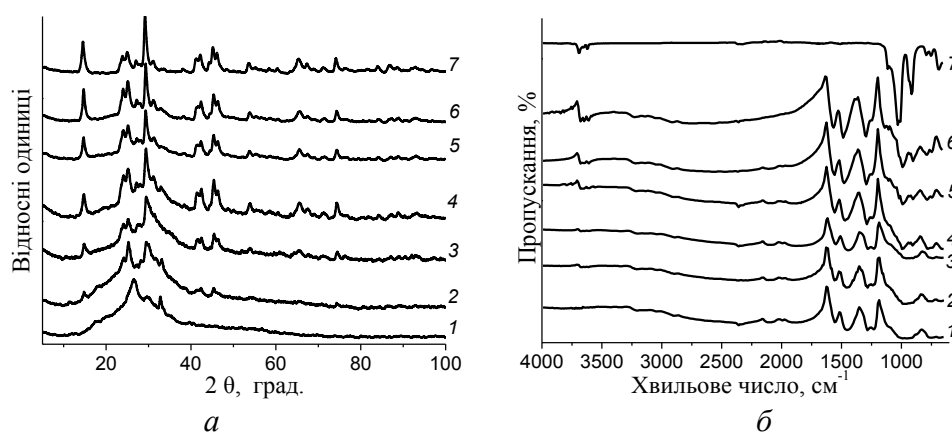


Рис. Дифрактограми – а та ІЧ-ФП спектри – б зразків: ПАН – 1, Кт/ПАН(1) – 2, Кт/ПАН(2) – 3, Кт/ПАН(3) – 4, Кт/ПАН(4) – 5, Кт/ПАН(5) – 6 і Кт – 7

Хімічним синтезом отримано композити на основі поліаніліну та каоліту. За допомогою рентгенофазового та ІЧ-ФП аналізів показано, утворені композити є гібридними матеріалами які складаються із поліаніліну та каолініту. Зі збільшенням вмісту Кт в зразках композитів, вміст кристалічної фази зростає, що зумовлено полікристалічною структурою каолініту.

[1] Макогон В., Яцишин М., Решетняк О. Природні мінерали – компоненти композитних матеріалів на основі поліаніліну // Праці НТШ. Хім. науки. 2017. Т. XLVIII. С. 17–31.

**ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ КЛІМАТИЧНИХ ФАКТОРІВ НА ВЛАСТИВОСТІ
КОМПОЗИЦІЙ З ВТОРИННИХ ПОЛІОЛЕФІНІВ***Черкашина Г. М., Рассоха О. М.*Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»
annikcherkashina@gmail.com

Композиційні матеріали на основі поліпропілену характеризуються незворотними змінами своїх властивостей, внаслідок старіння під впливом кліматичних чинників. До недоліків поліпропілену слід віднести знижену стійкість до ударних навантажень, особливо при знижених температурах і низьку морозостійкість. Також одним з факторів, що лімітують експлуатацію композиційних матеріалів на основі поліпропілену є також низька стійкість до дії УФ випромінювання, яке призводить до деструкції ланцюгів поліпропілену по радикальному механізму і, як наслідок, підвищенню його крихкості

В процесі експлуатації в поліпропілені накопичуються кисневмісні групи, змінюється його молекулярна маса, з'являються зшиті фрагменти, тому вторинний поліпропілен можна розглядати як новий матеріал і знаходити для нього інші сфери застосування або використовувати як сировину для отримання полімерних композицій.

Для досліджень вибрані композиції з вторинного поліпропілену. Введення в полімерну композицію модифікуючих добавок дозволяє збільшити показники до 40–50 %. Довго-вічність виробів з вторинного поліпропілену (при експлуатації в тяжких кліматичних умовах) складає всього 0,6–0,75 від довговічності виробів з первинного полімеру. Ефективніший шлях – створення високонаповнених вторинних полімерних матеріалів, а також модифікація вторинних полімерів.

З цією метою до складу композицій на основі вторинного поліпропілену вводили регранулят поліетилену (в кількості від 5 % до 40 %) та модифікуючу добавку – антиокислювальний і тепловий стабілізатор – стабітокс (в кількості 1,5 %), а також для фарбування вводили чорний фарбник.

Проведені дослідження впливу мінусових температур на зразки з композиційних матеріалів на основі вторинних поліолефінів. Морозостійкість визначали в такий спосіб: витримували зразки при температурі мінус 25 °С протягом 2-х годин і потім витримували їх при +25 °С протягом 2-х годин, що складає 1 цикл. Кількість циклів – 4. Результати дослідження фізико-механічних властивостей після впливу мінусових температур показали, що ударна в'язкість композиції з вмістом вторинного поліетилену 20 % збільшилась на 22 % в порівнянні з композицією на основі тільки вторинного поліпропілену, руйнівне напруження при вигині знизилось на 9,5 % в порівнянні з композицією на основі тільки вторинного поліпропілену.

Також було досліджено вплив УФ опромінювання на зразки з вторинних поліолефінів. Опромінювання зразків проводили за таким режимом: протягом 30 хв. проводили опромінювання зразків, а наступні 30 хв. – темновий режим, що складає 1 цикл. Кількість циклів – 24. Результати УФ опромінювання зразків з вторинних поліолефінів після УФ опромінювання показали, що ударна в'язкість композиції з вмістом вторинного поліетилену 5 % збільшилась на 4,7 % в порівнянні з композицією на основі тільки вторинного поліпропілену, руйнівне напруження при вигині знизилось на 17 % в порівнянні з композицією на основі тільки вторинного поліпропілену.

**STUDYING OF INFLUENCE OF SOME ANTIBIOTICS
OF A CEPHALOSPORIN SERIES ON THE PROCESS OF ENZYME HYDROLYSIS
OF CHITOZAN IN THE SOLUTION OF ACETIC ACID**

Chernova V. V.

Bashkir State University, Ufa, Russia

my_life82@mail.ru

Nowadays one of the perspective directions of the use of chitosan (ChT) is the creation of the film materials on its basis including drugs for the treatment of surgical, burnt and sore wounds. In the conditions of medical application of chitosan materials their biodestruction is carried out under the influence of nonspecific enzymes of a human body (for example, hyaluronidase) and defines covering service life on a wound surface. In the works of previous years we defined some kinetic characteristics of the activity of enzyme hyaluronidase for the reaction of enzyme hydrolysis of ChT in the solution of 1 % acetic acid, and also in the presence of antibiotics of an aminoglycoside series - amikacin and gentamycin. This work is undertaken with the purpose of the expansion of some medical substances (MS) immobilized in a polymeric matrix.

The following objects were used in our research: they were ChT ("Bioprogress", Russia) with a molecular mass of $M_{\text{sn}} = 113000$, antibiotics of cephalosporin series – sodium salt of cefazolin (CFZ) and cefatoksīm (CFT) ("Sintez", Russia), an enzyme preparation hyaluronidase (a trade name of the preparation is "Liraz") ("Mikrogen", Russia). Concentration of enzyme preparation was 0.1 g/l. 1 % acetic acid was used as some solvent for ChT. Concentration of ChT in the solution for carrying out the process of enzyme hydrolysis varied from 0.1 to 5 g/dl. Molar ratios of ChT:MS was equal to 1:0.01 and 1:0.1.

The conducted researches showed that the observed dependences of an initial rate of enzyme hydrolysis of ChT in the presence of CFZ and CFT from concentration of a substratum (ChT) can be described within the scheme of Mikhaelisa-Menten, as well as in case of enzyme hydrolysis of ChT with the lack of drugs. The results of Mikhaelis constant, the maximum rate determined by a graphic method of Laynuivera-Burke are presented in table.

Table. The value of kinetic parameters of the process of enzyme hydrolysis in Mikhaelisa-Menten equation for the system of chitosan-drug in 1 % acetic acid

Used MS	Molar ratio of components ChT: MS	K_m , g/dl	$V_{\text{max}} \cdot 10^6$, g/(dl·min)	$V_{\text{max}}/K_m \cdot 10^6$, min ⁻¹
CFZ	1:0.01	3.82	0.47	0.12
	1:0.10	3.91	0.40	0.10
CFT	1:0.01	3.79	0.48	0.13
	1:0.10	3.95	0.41	0.10

The received values of K_m for the systems of ChT:CFZ and ChT:CFT testify that the affinity of ChT to enzyme in the presence of antibiotics worsens. Besides the reduction values of V_{max}/K_m in the systems of ChT-MS in comparison with an individual ChT says that drugs systems are more steady to biodegradation processes.

Thus, according to the influence of CFZ and CFT on the process of enzyme hydrolysis of ChT, antibiotics of a cephalosporin series, practically don't differ from the antibiotics of an aminoglycosideseries which had been researched earlier. It is obviously connected with the fact that all of them represent low-molecular electrolytes.

ВИВЧЕННЯ ВПЛИВУ КОМПЛЕКСНОГО СТАБІЛІЗАТОРА ІРГАНОКС-МЕЛАМІН НА ТЕРМІЧНУ ДЕГРАДАЦІЮ ПЕКОПОЛІМЕРНОЇ МАТРИЦІ*Явір К. Б., Крутько І. Г., Каулін В. Ю.*Донецький національний технічний університет
ekaterinayavir@ukr.net

Пекокомпозит – новий клас композиційних матеріалів, який складається з пекополімерної матриці та наповнювача. При отриманні матеріал найбільше піддається впливу температури та кисню, що призводить, в основному, до термічної та термоокислювальної деградації. В пекокомпозиті саме пекополімерна матриця визначає властивості, а також є найбільш уразливою до дії температури. Пекополімерна матриця є продуктом низькотемпературної модифікації (до 170 °С) кам'яновугільного пеку полівінілхлоридом (3 % по масі). Відомо, що термічна деструкція компонентів матриці розвивається за закономірностями радикального процесу, тому для уповільнення цих реакцій на стадії отримання матеріалу, необхідно вводити стабілізатори – антиоксиданти. Найбільш перспективним є застосування комплексних стабілізуючих систем, що містять різні стабілізатори. Дана робота присвячена вивченню процесів впливу комплексного стабілізатора ірганокс-меламін (стабілізатор ІМ) на термічну деградацію пекополімерної матриці пекокомпозита. Термічні процеси досліджувалися термогравіметричним методом на обладнанні NETZSCH TG 209 F3 Tarsus у відповідності до вимог стандартів ISO 11358 (середовище – азот N₂, швидкість нагрівання – 10 °С/хв, нагрівання до 800 °С).

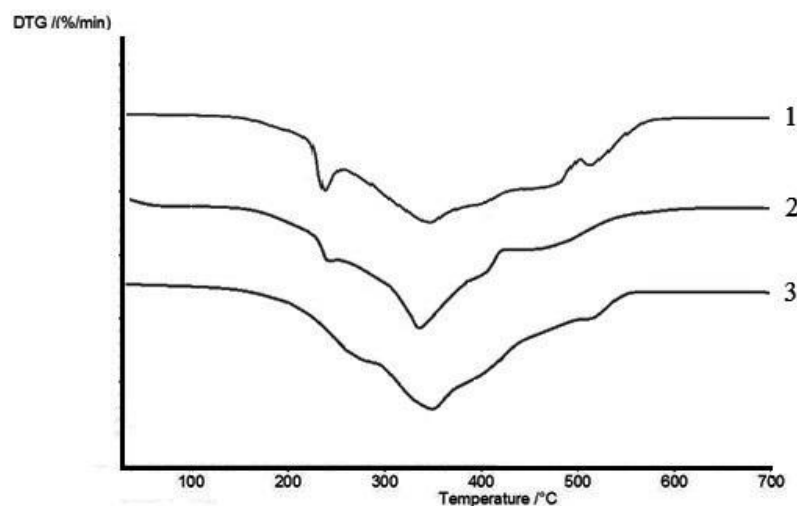


Рис. Криві ДТГ пекополімерної матриці та пекополімерної матриці з комплексним стабілізатором: 1 – пек + ПВХ 3 % (ППМ), 2 – ППМ + ірганокс 2 % + меламін 2 %, 3 – ППМ + ірганокс 4 % + меламін 4 %

Аналіз термограм (рис.), де в якості стабілізатору використано суміш ірганоксу та меламіну показав, що пік в інтервалі 235–250 °С, характерний для пекополімерної матриці без стабілізаторів (крива 1) зменшується (крива 2) або взагалі відсутній (крива 3). Зменшення інтенсивності або повна відсутність цього піку свідчить про те, що суміш антиоксидантів меламіну та ірганоксу може зменшувати або повністю блокувати утворення низькомолекулярних летких речовин у результаті деструктивних процесів, ініційованих радикалами, що утворюються при розкладанні ПВХ у пекополімерній матриці. Застосування суміші ірганокс - меламін збільшує температуру втрати 5 % маси на 4–6 градусів. Таким чином, можна зробити висновок, що комплексний стабілізатор ІМ може уповільнювати процеси деструкції, що призводять до утворення низькомолекулярних летких речовин.

**AUTHOR INDEX /
АВТОРСЬКИЙ ПОКАЖЧИК**

Azizova A. N.	86
Bača L.	271
Balińska A.	111
Bardadym Y.	293
Barsova Z.	87
Baublys V.	48
Bazunova A. A.	292
Belkina N. V.	54, 55
Boguslavskiy V. B.	8
Bohdan K. I.	127
Borysenko M. V.	119
Brovarets V. S.	71
Bugaets D. V.	56
Burakov N. I.	128
Buranshina A. A.	129, 130
Chernova V. V.	341
Demchyna O. I.	331
Dmytriv G. S.	111
Dotsenko M. O.	67
Dubey I. Ya.	151, 152
Dubrovsky D. I.	18, 21, 22, 37, 39, 84
Dziazko M. O.	188
Fayzullina Yu. G.	82
Fazliev S. A.	290
Fedko A. M.	122
Fedorchuk A. A.	121
Galimhanova R. V.	8
Ganieva L. R.	22, 77
Gasanov K. I.	86
Gasimov Sh. G.	86
Gavrilenko K. S.	199
Goreshnik E. A.	115
Habletdinova A. I.	18, 22, 34, 70
Hordiichuk O. R.	89
Iurzenko M. V.	321
Janek M.	119, 271
Jendrzewska I.	87
Kabirova L. R.	18, 22, 34, 35, 37, 39, 70, 77, 84
Kachaeva M. V.	71
Kanibolotsky A. L.	128
Khabletdinova A. I.	31, 40, 82, 83, 84
Kityk I. V.	121
Kolotilov S. V.	199
Konysheva K. M.	197
Kordan V. M.	95, 96
Kornienko A. M.	71
Kowalczyk G.	111
Kravchenko O. V.	196
Krzyczmonik M.	111
Kurmach M. M.	197
Kuziv Ia. B.	151, 152
Labidi J.	48

Latypova E. R.	54, 55
Lytvynenko A. S.	199
Maistrenko V. N.	21, 84
Makara I. A.	101
Maksyutova E. I.	8
Mariichak O. Yu.	28
Matkovska L. K.	321
Mirgaleev D. S.	156, 157, 158
Mishura A. M.	199
Murzina K. A.	31, 83
Mys'kiv M. G.	89, 121
Myskiv M. G.	115
Mys'kiv M. G.	122
Nytka V. V.	95
Oberemko A.	48
Orlov M. A.	74, 162, 163
Pálková H.	119
Pasko P. A.	57, 58, 59, 129, 130
Pavlyuk N. V.	111
Pavlyuk V. V.	95, 96, 111
Pershina K. D.	196
Pilyo G. S.	71
Potapenko O. V.	196
Prokopenko V. M.	71
Provorova Yu. R.	21, 22, 34, 35, 40, 70, 77
Radio S. V.	28
Roik N. V.	188
Rozantsev G. M.	28
Rudenko N. O.	114
Rymsha Kh. V.	331
Saberova V. O.	333
Salaberria A. M.	48
Semenova O. M.	127
Sharipov D. R.	37
Shirokova E. E.	39
Shurshina A. S.	338
Shvets O. V.	197
Sidelnikov A. V.	8
Slyvka Yu. I.	89, 115, 121, 122
Smirnova O. L.	114
Sporyagin E.	293
Sulym I. Ya.	119
Tagiyev D. B.	86
Talipov R. F.	156, 157, 158
Talipova G. R.	59
Talipova G. R.	54, 55, 57, 58, 129, 130, 156, 157, 158
Tamarkina Ju. V.	333
Tarasiuk I. I.	95
Tomanová K.	119
Trusova E.	271
Tselik M. S.	36
Vakulin I. V.	54, 55, 56, 57, 58, 59, 129, 130, 156, 157, 158

Vakulina A. I.....	54, 55, 57, 58, 59, 129, 130, 156, 157, 158
Veteška P.	119, 271
Yaremov P. S.	197
Yarkaeva Yu. A.	21, 40, 83, 84
Yermolenko I. G.	127
Yevchuk I. Yu.	331
Zaytunova G. G.....	57, 58, 59
Zelinska O. Ya.	95, 96
Zhak O. V.....	101
Zhelavskaya Yu. A.....	114
Zhirnov V. V.....	71
Zhyhailo M. M.	331
Zhyshkovych O. R.	96
Zil'berg R. A.	56
Zilberg R. A. ...	18, 21, 31, 34, 35, 40, 70, 77, 82, 84
Абакумов О. О.....	174
Абдурахманова Е. Р.	135
Абишева А. К.	126
Авдієнко Т. М.....	242, 252
Авина С. И.	232, 262
Авраменко В. Л.	298, 307, 308
Адамчук А. В.....	233
Амірханов В. М.....	98, 109
Андрієвська О. Р.	193
Андрущенко О. О.....	234
Аніщенко В. М.	175
Антонова П. В.	280
Арсеній Т. Г.	76
Арыстанова Ж. Т.....	301
Атаманенко Н. С.	244
Бабіч О. В.....	270
Базіло К. В.	66
Бакибаев А. А.	143
Бараков Р. Ю.....	176
Баран Н. М.	325
Баранник К. В.....	235
Бахалова Є. А.....	154
Баюрка С. В.	81
Бедльовська Х. М.....	325
Безик А. О.	214
Безуглий Ю. В.	150
Белугин Д. С.	236
Бердник М. И.....	177
Беспалько Ю. М.	69
Белянська О. Р.	237
Биков О. І.	193
Бичко І. Б.....	174
Біленко Т. Є.	237
Білов В. В.....	164
Білосорочка Е. О.	294
Білоус Т. А.	238
Богдан Е. О.	236
Богза С. Л.....	69
Богуславский В. Б.	13
Бойко Ю. В.....	281
Бойчишин Л. М.	187, 225
Бойчук О. В.....	239
Боледзюк В. Б.	178

Бондар Д. К.....	9
Бондаренко М. А.	10
Бондаренко М. В.	179
Бондаренко С. П.	140
Бондарчук Т. В.	42
Борисова К. В.	93, 124, 286
Боштан Ю. В.....	203, 219
Бубісь М. Р.....	295
Бугаєва Л. М.	276
Букриньов О. С.....	108
Бураков І. М.....	180
Бураков Н. И.....	149, 190
Бурбан А. Ф.	310
Буркеев М. Ж.....	337
Бурмистров К. С.....	169
Буря А. И.....	296
Бусыгина М. В.	132
Бутенко А. Н.....	262
Бухал К. А.	11
Бучковська О. С.	133
Бушуєв А. С.....	134
Вазієв Я. Г.....	88
Варваренко С. М.	336
Варениченко С. А.....	132, 147
Варлан К. Є.....	302, 304, 305, 306
Варфоломеева Ю. А.....	181
Василенко О. М.....	308
Василишин Т. М.....	324
Васильєва А. В.	182
Васюк С. О.....	15
Вашкевич Е. Ю.....	20
Ващук К. І.	320
Ведь М. В.....	258
Великанова И. А.....	206
Велігіна Є. С.....	135
Верєга Б. Б.	136
Веремейченко Н. А.	296
Верещагін О. М.	217, 295, 312
Верещак В. Г.	242
Винницька С. І.....	137
Вітушкіна С. В.....	108
Влад Х. І.....	183
Вовк М. В.....	142
Волкова А. Є.....	263
Волкова Л. К.....	61, 202
Волнянська О. В.....	11, 26
Волобой А. О.	12
Волошин М. Д.	235, 257
Воронов Г. К.....	265
Гаврилик О. П.....	142
Гайдукевич В. А.	138
Галатенко Н. А.	318, 330
Галимханова Р. В.	13
Гарбуз А. С.....	273, 297
Гарькавый Д. Ю.	298
Гембарук В. В.....	153
Германович С. Б.	137
Гіюк В. М.....	161
Глабай М. С.	184
Гладишевський Р. Є.....	90, 103
Гладков Є. С.....	160, 161

Глоба Н. И.	213
Голеус В. І.	240, 266
Головатюк В. М.	150
Голубчик К. О.	118
Горбик П. П.	78
Гордеев Ю. С.	240
Гордеева І. О.	43, 45, 47, 50
Горешнік Е. А.	110
Горскій А. В.	91
Горайнова Ю. А.	282
Грибова Н. Ю.	14
Григоренко О. О.	144
Григорів Г. В.	139
Гринда Ю. М.	185, 223
Гриценко О. М.	325
Губко С. В.	206
Гулай Л. Д.	105
Гуменецький Т. В.	309
Гусенікова Є. С.	186
Гуцалюк М. Ю.	283
Данило І. І.	299
Данильченко В. Є.	140
Даниляк М.-О. М.	187, 225
Данченко Ю. М.	313
Даценко В. В.	241, 288
Дегтярь В. В.	307
Деленко Т. О.	90
Дем'янюк В. В.	141
Демидов О. О.	161
Демченко В. Л.	326
Дерун Ю. А.	14
Дженюк А. В.	267
Джоджик О. Я.	310
Дикун А. М.	189
Диманов Б. В.	241
Дистанов В. Б.	159
Дистанов В. В.	159
Діденко В. В.	24
Добрівська О. О.	244
Довбій Я. М.	91
Должиков С. С.	252
Донченко А. О.	15
Дорошенко Р. Є.	16
Дремлюга А. В.	124
Дробот В. Є.	17
Дронь І. А.	137
Дубенко А. В.	242
Дудчик Г. П.	206
Дутка В. С.	294
Дятлова Е. М.	253
Дяченко А. В.	177
Егорова Л. М.	181, 284
Елагіна Н. В.	300
Ерошина Е. В.	102
Ефимова І. В.	215
Євсейчик Я. О.	68
Євсєєва М. В.	112
Єфименко В. В.	233
Єфіменко О. В.	243
Єфтенєєва Р. І.	76, 133, 136, 142

Жак О. В.	19
Жак Т. В.	19
Жаксыбаева А. Г.	143
Жапарова Л. Ж.	301, 337
Жерш С. А.	144
Жильцова С. В.	315
Жильцова С. В.	198, 200, 207
Жумагалиева Т. С.	301
Журавель І. О.	145
Журавецька І. М.	295
Завада О. О.	145
Завидовський О. І.	146
Загорулько С. П.	147
Загребельная А. Ю.	20
Заєва А. С.	29
Заїка В. М.	66
Залізна К. В.	166
Залыгина О. С.	247, 277
Заруба С. В.	274
Збиковський О. І.	245, 254
Зидиханова Л. Ф.	303
Зінченко Г. М.	148
Золотаренко М. С.	302
Зосенко О. О.	44, 45, 47
Зубенко А. Е.	304, 305, 306
Иванов В. В.	177
Іванов В. В.	182
Іванова І. О.	244
Іванова Т. Д.	49
Іванцова Е. С.	92
Івасик Ю. В.	69
Ількевич Н. С.	283
Ільков О. О.	137
Калінський О. М.	146, 154
Кальмбах С. С.	78
Капитанов И. В.	149, 190
Капустян Л. М.	42
Карандашов О. Г.	307, 308
Каранкевич Е. Г.	218
Кардаш М. О.	245
Карєв А. І.	313
Карпенко Ю. В.	23
Карпичев Е. А.	149, 190
Карпушина С. А.	81
Каряка Н. С.	109
Касянчук М. Г.	63, 212
Катрук Д. С.	309
Каулін В. Ю.	229, 259, 342
Качаєва М. В.	135
Кашковський В. І.	150, 165
Кашуба А. І.	93
Каюн І. Г.	191
Киосе Т. А.	107, 118
Кісельова Т. О.	334
Клепко В. В.	316
Книжников В. А.	138
Кобижча Н. І.	150
Ковальський Я. П.	294
Ковалюк М. З.	178

Козирева Т. І.	266
Козлова Г. А.	318
Козлова Ю. В.	192
Козловська О. Р.	217
Колесник І. С.	310
Коломієць О. В.	94, 97
Коломіна М. С.	311
Кольцова Я. І.	261
Команяк В. А.	246
Компанець М. О.	43, 44, 185, 223
Кондратенко К. О.	45
Конкіна Я. С.	46
Коновалова В. В.	310
Копач А. І.	247
Корж Р. В.	220
Корнева І. С.	329
Корнієнко О. А.	193
Коробко С. В.	91
Коровін О. Ю.	222
Королянчук Д. Г.	97, 194
Корягін А. Г.	311
Костенков А. В.	299
Костів В. Т.	183
Костюк К. К.	51
Котляр К. О.	24
Кочерга Є. В.	285
Кошова Я. І.	133
Кравченко М. В.	195
Кравченко О. В.	260
Кравченко Т. В.	255
Кравчук А. В.	153
Кравчук Ю. В.	92
Кривуш М. С.	264
Кроніковський О. І.	24
Кротенко В. В.	14
Крупич С. М.	136
Крупская Т. В.	300
Крутько І. Г.	229, 299, 342
Крюковська О. А.	248
Кулішова Ю. О.	25
Кусяк А. П.	78
Кусяк Н. В.	78
Куцевол А. Є.	26
Куценко Н. В.	198
Кучер Т. В.	72
Кучерук М. А.	244
Кучменко А. Р.	23
Кушнір О. В.	141, 155
Куш О. В.	43, 44, 45, 47, 185
Кущербаева В. Р.	143
Лаврись А. З.	312
Ларин В. І.	181
Ларичева Л. П.	263
Лаховець К. М.	289
Лебедєв В. В.	313
Левицький В. Є.	309, 320
Левківський І. С.	314
Лега Д. О.	139
Лема А. О.	225
Леонова Н. Г.	315
Лесишина Ю. О.	46, 180, 186, 283, 289
Летченя А. В.	249

Лисенков Е. А.	316, 317, 332
Лінчаковський С. М.	317
Лісовий Р. А.	317
Ліціс О. О.	98
Лобойко А. Я.	262
Ложко Д. М.	42
Ломницька Я.	117
Лопатик Д. В.	73
Лопачак М. М.	225
Лук'янов М. Ю.	110
Лукашевич С. А.	318
Лускань К. В.	99
Лучка С. П.	141
Люшніченко М. П.	250
Лявинець О. С.	76, 133, 136, 142
Ляпощенко О. О.	250
Лясковська М. Р.	100
Ляшук О. С.	47
Майко Г. С.	51
Майкович О. В.	336
Макарова Л. О.	200
Макарчук М. С.	233
Маковійчук Т. В.	49
Макогон В. М.	319
Максютова Э. И.	13, 27
Малахова К. В.	251
Мамуня Є. П.	322
Манвелян А. А.	161
Манич Т. В.	155
Манчик Е. А.	73
Марек І. О.	201
Маренок В. М.	250
Марійчак А. Ю.	102
Марискевич Д. Т.	103
Марійчак О. Ю.	104
Марков В. И.	132
Марков В. І.	147, 166
Марценюк Н. С.	153
Марчук Л. С.	154
Марчук О. В.	105, 116
Масюк А. С.	320
Матковська Л. К.	323
Матковська О. К.	322
Маховський В. О.	248
Медведєва Д. Д.	29
Медяна Д. В.	30
Мельничук Н. П.	155
Мерззликина М. А.	202
Мерзлікін С. І.	72
Мизенко О. О.	234
Миргородська В. Д.	252
Мироненко Л. С.	159
Миронюк І. Ф.	106
Мироняк М. О.	16, 30
Мислін М. В.	106
Мисов О. П.	99, 191
Мисюк В. С.	253
Мінаєва Ю. А.	32
Міщенко В. П.	254
Міщенко В. В.	203, 219
Музичка Л. В.	148
Мурашєвич Б. В.	169

Мусіна А. О.	255
Мухін А. С.	238
Мухлядо В. И.	256
Мягка Ю. О.	237, 257
Мязина Е. В.	232
Набережная О. А.	296
Нагорняк М. І.	324
Назар А. П.	107
Немченко Н. В.	159
Ненастина Т. А.	258
Нестерівська С. П.	319
Нестерова Л. О.	14
Нефедов В. Г.	194
Нікітіна А. Д.	108
Ніколаєвський А. М.	185, 211
Ніколенко М. В.	16, 30, 242, 251, 252
Новікова К. В.	185
Новотна В. О.	204, 221
Норик О. А.	286
Носенко О. В.	240
Носова Н. Г.	324
Нужний О. О.	226
Овчаренко В. И.	194
Овчаренко О. О.	267
Олекса В. В.	324
Олексеюк І. Д.	116
Олексій Ю. А.	104
Олексюк Г. І.	171
Олишевець І. П.	109
Олімова Г. А.	205
Омельченко С. О.	259
Омельянчик Л. О.	23
Оніпко О. В.	160, 161
Опейда И. А.	215
Опейда Й. О.	43, 61, 198, 200, 207, 223
Опейда Л. І.	185
Осипова М. О.	255
Остапів Д. Д.	137
Павленко О. В.	88
Павлов О. В.	164
Павлова С. Є.	147
Павлюк О. В.	110, 165
Панасенко Т. В.	23
Пандяк Н. Л.	225
Пантелеймонов Р. А.	260
Панченко Т. І.	112
Пастернак О. М.	62
Першина К. Д.	260
Петрик І. С.	179
Петух С. І.	261
Печаліна Є. І.	93
Печенова Г. Г.	206
Пилипенко О. І.	234
Підгорна Л. П.	307, 308
Пільо С. Г.	135
Плешингер Т. С.	60
Пльонсак П. П.	33
Плюшко О. В.	207
Поливанов Є. А.	75
Поліщук А. О.	78

Пономаренко Т. В.	209
Пономарьов В. К.	208
Пономарьов М. М.	259
Попов Р. Ю.	236, 253, 256
Попова Л. А.	138
Поповська О. Ю.	92
Порфірян В. В.	76
Похмурська А. В.	325
Прадівляна А. С.	112
Привалова Г. С.	262
Проскуріна В. О.	267
Радио С. В.	102
Радіо С. В.	92, 104
Радовенчик Я. В.	113
Радченко О. А.	326
Радченко О. В.	263
Радюк А. Н.	327
Ранський А. П.	112
Рассоха О. М.	328, 329, 340
Ребров О. Л.	209
Реброва Т. П.	209
Редько А. М.	175
Редько А. Н.	189
Решетняк О. В.	312, 319, 335
Рибаченко В. І.	175
Рикмас Я. В.	19
Родигін К. М.	287
Родигін М. Ю.	287
Рожнова Р. А.	318, 330, 334
Розанцев Г. М.	92, 102, 104, 286
Роман І. Т.	155
Романенко Х. В.	142
Романюк О. І.	19
Руденчик Т. В.	330, 334
Рудьман Я. О.	264
Рыбаченко В. И.	189
Рябінін С. О.	265
Рябов С. В.	326
Рябоконт О. Л.	239
Рябченко В. В.	332
Сабадаш Н. І.	278
Савцова О. В.	265, 270
Савчук О. О.	210, 214
Сасвич О. В.	230
Салей Ан. А.	266
Самарик В. Я.	137
Сахненко Н. Д.	258
Сачанова Ю. І.	267
Свашенко Ю. В.	288
Свиридюк К. П.	78
Северенчук І. М.	304, 305, 306
Семененко Т. С.	211
Семиволос Д. С.	61
Сербін В. С.	62
Сергєєва Ю. Ю.	186
Сердюк А. А.	63, 149, 190, 212
Сидельников А. В.	13, 27
Сидоренко Я. Л.	79
Сидорко М. С.	339
Сидорова Л. П.	12, 29, 32, 33
Симонова Н. А.	49

Сирош В. А.	213
Ситник Н. С.	69, 280
Сігунов О. О.	255
Сінельніков С. І.	326
Скиданенко М. С.	250
Скнар І. В.	210, 214, 268
Скнар Ю. Є.	210, 214, 268
Скороход К. С.	134
Скубенко К. Г.	289
Слива Т. Ю.	98
Сметанін М. В.	166
Смирнов В. А.	250
Смирнова О. В.	168, 215
Смирнова-Замкова М. Ю.	216
Смітюк Н. М.	17, 25
Смітюх О. В.	116
Смола С. С.	222
Смолій О. Б.	148
Смоляк О.	117
Сніткіна А. І.	269
Снурнікова О. В.	222
Соколова Т. И.	118
Спасьонова Л. М.	193
Старкова Г. М.	50
Стасевич С. М.	335
Стасюк А. В.	324
Стащенко К. В.	334
Стеців Ю. А.	217, 295, 335
Стрелко В. В.	195
Стрижак П. Є.	174
Сухара А. В.	217
Сухий К. М.	94
Сущиц А. Г.	218
Тажбаев Е. М.	301, 337
Тараненко І. А.	328
Тарас Т. М.	171
Татарчук Т. Р.	106
Татарчук Т. Р.	100
Ташенов А. К.	143
Ткач А. Р.	167
Ткаченко Т. В.	165
Ткачук І. Г.	120
Ткачук М. М.	203, 219
Токайчук Я. О.	90, 103
Токарева С. В.	132
Токарь А. В.	64
Толкунов А. С.	168
Толкунов В. С.	168
Толкунов С. В.	168
Толмачов А. О.	144
Толошний Д. В.	80
Томаровська Л. Ю.	81
Томина А.-М. В.	296
Топчий В. Л.	270
Торопін Н. В.	169
Трепядько Д. О.	220
Третьякова І. М.	91
Трус І. М.	273
Трусова Е. Е.	249
Труш В. О.	98
Труш Я. В.	169
Тульський Г. Г.	238

Туров В. В.	300
Турсунова Р. Т.	126
Тютюнник Т. В.	221
Фадєєв Є. М.	222
Фалалеева Т. В.	159
Фарат О. К.	147, 166
Фатальська А.	42
Федоришин О. С.	272
Ференс М. В.	336
Филоненко С. Н.	176
Фігурка Н. В.	336
Флейшер Г. Ю.	273, 297
Фрасинюк М. С.	140, 180
Хавунко О. Ю.	223
Халявка Т. О.	179
Хамитова Т. О.	337
Хижан О. І.	211
Хижан О. І.	211
Хмарська Л. О.	274
Хоботова Е. Б.	269, 275
Ходжасва Р. С.	224
Христенко І. В.	182, 205
Хрїстова Н. М.	123
Хрущик Х. І.	225
Худякова С. М.	10, 38
Циба І. О.	92
Цибань А. П.	275
Ціко У. В.	339
Цырина В. В.	176
Цяпало О. С.	46, 180, 186
Чабан О. О.	261
Чебаненко О. А.	123
Чебанов В. А.	160
Чепелева Л. В.	224, 226
Чепрасова В. И.	277
Чергинець В. Л.	209
Черевичная И. Ю.	227
Черкашина Г. М.	328, 329, 340
Черних В. П.	139
Черній В. Я.	91
Чернушенко О. О.	230
Чех Б. О.	324
Чигвинцева О. П.	64
Чудінович О. В.	228
Чумак А. Ю.	224
Чумак О. А.	264
Шаган Д. В.	276
Шалак В. Ф.	42
Шаметько К. Ю.	277
Шаповалов С. А.	208
Шаповалова А. В.	229
Швед О. М.	146, 153, 154, 167, 170, 172, 280
Швець І. І.	192
Швиденко А. Р.	38
Шевєрьова С. С.	230
Шевченко М. М.	104
Шевчик Л. З.	19
Шевчук А. В.	250

Author Index

Шемчук Л. А.....	139
Шендрик О. М.	43, 44, 46, 50, 60, 180, 186, 223
Шибєка Л. А.	246
Широков О. В.	228
Шнуренко І. О.	79
Штомпель В. І.....	323
Шувакін С. І.....	170
Шульжук Б. В.	124
Шумейко А. Е.....	149, 190
Шумило К. П.	237
Шупенюк В. І.....	171
Щепановський Р. Г.	42
Щербань Н. Д.	176, 179

Авторський показник

Юзькова В. Д.	203, 219
Юрженко М. В.....	323
Юрченко О. І.	209
Ютілова К. С.....	153, 167, 170, 172
Явір К. Б.	342
Яворська Д. Г.....	313
Якута П. О.....	172
Яновська Г. О.	79
Янченко О. В.	68
Яремов П. С.	176
Ясінська А. І.	278
Яцишин М. М. ...	183, 217, 295, 312, 319, 335, 339
Ячна М. Г.	51

CONTENTS / 3MICT

ANALYTICAL CHEMISTRY / АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ	7
A NEW METHOD OF QUANTITATIVE DESCRIPTION OF SOLID ELECTRODES VOLTAMMOGRAMS	
<i>Boguslavskiy V. B., Galimhanova R. V., Maksyutova E. I., Sidelnikov A. V.</i>	<i>8</i>
ВИЗНАЧЕННЯ ПЛЮМБУМУ В НАФТОПРОДУКТАХ МЕТОДОМ ААС	
<i>Бондар Д. К.</i>	<i>9</i>
ХЕМОСЕНСОР/СОРБЕНТ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ РУТЕНІЮ(IV)	
<i>Бондаренко М. А., Худякова С. М.</i>	<i>10</i>
МАСКА ДЛЯ ЖИРНОЇ ШКІРИ ОБЛИЧЧЯ	
<i>Бухал К. А., Волнянська О. В.</i>	<i>11</i>
ОДНОЧАСНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ВМІСТУ СУМІШІ СИНТЕТИЧНИХ БАРВНИКІВ E124 І E110 МЕТОДОМ ДОБАВОК "H-POINT STANDARD"	
<i>Волобой А. О., Сидорова Л. П.</i>	<i>12</i>
МУЛЬТИСЕНСОРНАЯ СИСТЕМА ТИПА «ЭЛЕКТРОННЫЙ ЯЗЫК» НА ОСНОВЕ МНОЖЕСТВЕННОСТИ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИХ ВРЕМЕННЫХ РЯДОВ	
<i>Галимханова Р. В., Богуславский В. Б., Максютова Э. И., Сидельников А. В.</i>	<i>13</i>
РОЗРАХУНКИ ПАРАМЕТРІВ ГІДРОФОБНОСТІ ІЗОМЕРІВ БЕНЗОПІРЕНУ ДЛЯ ПОШУКУ ОПТИМАЛЬНИХ УМОВ ВИМІРЮВАННЯ ЇХ ВМІСТУ В АТМОСФЕРНІЙ ВОДІ	
<i>Дерун Ю. А., Грибова Н. Ю., Нестерова Л. О., Кротенко В. В.</i>	<i>14</i>
РОЗРОБКА МЕТОДИКИ КІЛЬКІСНОГО СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ МЕТОПРОЛОЛУ ТАРТРАТУ	
<i>Донченко А. О., Васюк С. О.</i>	<i>15</i>
ЭКСПРЕС-ВИЗНАЧЕННЯ БЕТАЇНУ ТА ЙОГО ПОХІДНИХ ЗА ДОПОМОГОЮ ПОТЕНЦИОМЕТРИЧНИХ СЕНСОРІВ	
<i>Дорошенко Р. Є., Мироняк М. О., Ніколенко М. В.</i>	<i>16</i>
ФІЗИЧНИЙ ВПЛИВ НА СТАДІЇ ПРОБОПІДГОТОВКИ РОСЛИННИХ ЗРАЗКІВ ДЛЯ АТОМНО-АБСОРБЦІЙНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ВАЖКИХ МЕТАЛІВ	
<i>Дробот В. Є., Смітюк Н. М.</i>	<i>17</i>
VOLTAMMETRIC SENSORS BASED ON A POLYELECTROLYTE COMPLEX AND CYCLODEXTRINS FOR THE RECOGNITION OF ENANTIOMERS OF METHIONINE	
<i>Dubrovsky D. I., Zilberg R. A., Kabirova L. R., Habletdinova A. I.</i>	<i>18</i>
ЕКОЛОГО-АНАЛІТИЧНИЙ МОНИТОРИНГ СТАНУ ҐРУНТІВ ОЗОКЕРИТОВОЇ ШАХТИ М. БОРИСЛАВА	
<i>Жак Т. В., Рикмас Я. В., Шевчик Л. З., Романюк О. І.¹, Жак О. В.</i>	<i>19</i>
ВОЗМОЖНОСТИ РАЗЛИЧНЫХ МЕТОДОВ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФАЛЬСИФИКАТА В МАСЛО-ЖИРОВОЙ ПРОДУКЦИИ	
<i>Загребельная А. Ю., Вашкевич Е. Ю.</i>	<i>20</i>
A VOLTAMMETRIC SENSORY SYSTEM FOR RECOGNITION OF TRYPTOPHAN ENANTIOMERS BASED ON GLASSY CARBON ELECTRODES MODIFIED BY POLYARYLENEPHTHALIDE COMPOSITES OF α -, β -, AND γ -CYCLODEXTRINS	
<i>Zilberg R. A., Maistrenko V. N., Yarkaeva Yu. A., Dubrovsky D. I., Provorova Yu. R.</i>	<i>21</i>
PROJECTION TO LATENT STRUCTURES FOR RECOGNITION OF ATENOLOL BY MANUFACTURERS	
<i>Kabirova L. R., Provorova Yu. R., Dubrovsky D. I., Habletdinova A. I., Ganieva L. R.</i>	<i>22</i>
ХРОМАТОГРАФІЧНА ОЦІНКА ЛІПОФІЛЬНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ПОХІДНИХ 10-((1,3,4-ОКСАДІАЗОЛ-2-ІЛ)МЕТИЛ)АКРИДИН-9(10H)-ОНІВ ЯК ПОТЕНЦІЙНИХ НИЗЬКОМОЛЕКУЛЯРНИХ ІНДУКТОРІВ ІНТЕФЕРОНУ	
<i>Карпенко Ю. В., Омелянчик Л. О., Панасенко Т. В., Кучменко А. Р.</i>	<i>23</i>
ВИВЧЕННЯ РОЗПОДІЛУ ТРИХЛОРАЦЕТАТНОЇ КИСЛОТИ МІЖ ВОДОЮ ТА ОРГАНІЧНИМИ РОЗЧИННИКАМИ	
<i>Котляр К. О., Діденко В. В., Кроніковський О. І.</i>	<i>24</i>
КОНТРОЛЬ ВМІСТУ АЗОТУ У РОСЛИННИХ ЗРАЗКАХ	
<i>Кулішова Ю. О., Смітюк Н. М.</i>	<i>25</i>
РОЗІГРІВАЮЧИЙ АНТИЦЕЛЮЛІТНИЙ КРЕМ ДЛЯ ТІЛА	
<i>Куцевол А. Є., Волнянська О. В.</i>	<i>26</i>
ИМПЕДАНСОМЕТРИЧЕСКОЕ ТИТРОВАНИЕ ИОНОГЕННЫХ ПАВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ	
<i>Максютова Э. И., Сидельников А. В.</i>	<i>27</i>
FORMATION OF SODIUM HETEROPOLY DECATUNGSTOEUROPATE(III) $\text{Na}_9[\text{Eu}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 35\text{H}_2\text{O}$ IN AQUEOUS SOLUTION	
<i>Mariichak O. Yu., Rozantsev G. M., Radio S. V.</i>	<i>28</i>

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ВМІСТУ БІНАРНИХ СУМІШЕЙ ХАРЧОВИХ БАРВНИКІВ «ЗАХІД СОНЦЯ» (E110) ТА «АЗОРУБІН» (E122)	
<i>Медведева Д. Д., Засва А. С., Сидорова Л. П.</i>	29
СЕЛЕКТИВНЕ ВИЗНАЧЕННЯ НЕІОНОГЕННИХ ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНИХ РЕЧОВИН	
<i>Медяна Д. В., Мироняк М. О., Ніколенко М. В.</i>	30
VOLTAMMETRY OF TRYPTOPHAN ENANTIOMERS ON GLASSY CARBON ELECTRODES MODIFIED BY POLYARYLENEPHTHALIDE COMPOSITES OF α -, β -, AND γ -CYCLODEXTRINS	
<i>Murzina K. A., Zilberg R. A., Khabletdinova A. I.</i>	31
ГАЗОХРОМАТОГРАФІЧНИЙ АНАЛІЗ ЖИРНО-КИСЛОТНОГО СКЛАДУ ВЕРШКОВОГО МАСЛА	
<i>Мінаєва Ю. А., Сидорова Л. П.</i>	32
МЕТОД ФІРОРДТА ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ СУМІШІ ХАРЧОВИХ БАРВНИКІВ ЖОВТОГО «ЗАХІД СОНЦЯ» (E110) ТА ПОНСО 4R (E124)	
<i>Пльонсак П. П., Сидорова Л. П.</i>	33
PRINCIPAL COMPONENT ANALYSIS FOR SELECTIVE VOLTAMMETRIC RECOGNITION OF ATENOLOL ENANTIOMERS	
<i>Zilberg R. A., Provorova Yu. R., Kabirova L. R., Habletdinova A. I.</i>	34
VOLTAMMETRIC DETERMINATION OF ATENOLOL ENANTIOMERS USING POLYELECTROLYTE COMPLEXES OF CHITOSAN AND CHITOSAN SUCCINAMIDE WITH CYCLODEXTRINS	
<i>Provorova Yu. R., Kabirova L. R., Zilberg R. A.</i>	35
COMPARATIVE ANALYSIS OF MERCURY DETERMINATION IN RAW MATERIALS AND PRODUCTION OF HEAVY INDUSTRY ENTERPRISES	
<i>Tselik M. S.</i>	36
IMPEDANCE CHARACTERISTICS OF VOLTAMMETRIC ENANTIOSELECTIVE SENSORS BASED ON POLYARYLENEPHTHALIDES AND CYCLODEXTRINS	
<i>Sharipov D. R., Kabirova L. R., Dubrovsky D. I.</i>	37
ТЕСТ-МЕТОД ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ РОДІЮ(III)	
<i>Швиденко А. Р., Худякова С. М.</i>	38
IMPEDANCE CHARACTERISTICS OF VOLTAMMETRIC ENANTIOSELECTIVE SENSORS BASED ON POLYELECTROLYTE COMPLEXES AND CYCLODEXTRINS	
<i>Shirokova E. E., Kabirova L. R., Dubrovsky D. I.</i>	39
VOLTAMMETRIC SENSOR SYSTEM FOR THE RECOGNITION OF ENANTIOMERS OF PROPRANOLOL IN PHARMACEUTICAL FORMS	
<i>Yarkaeva Yu. A., Zilberg R. A., Khabletdinova A. I., Provorova Yu. R.</i>	40
БІОХІМІЯ / БІОХІМІЯ	41
СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ N-КОНЦЕВОГО ДОМЕНА ФАКТОРА ЭЛОНГАЦИИ ТРАНСЛЯЦИИ eEF1B β	
<i>Бондарчук Т. В., Шалак В. Ф., Ложко Д. М., Фатальська А., Щепановський Р. Г., Капустян Л. М.</i>	42
АКТИВНІСТЬ АМІНОКСИЛЬНИХ РАДИКАЛІВ В РЕАКЦІЯХ ВІДРИВУ АТОМА ВОДНЮ ВІД α -С-Н ЗВ'ЯЗКІВ У СПИРТАХ	
<i>Гордєєва І. О., Куц О. В., Компанець М. О., Шендрік О. М., Опейда Й. О.</i>	43
СТАБІЛЬНІ ІМІНОКСИЛЬНІ РАДИКАЛИ В РЕАКЦІЯХ ПЕРЕНОСУ Н-АТОМА	
<i>Зосенко О. О., Куц О. В., Компанець М. О., Шендрік О. М.</i>	44
IN VITRO АНТИОКСИДАНТНА АКТИВНІСТЬ РОСЛИННИХ ЕКСТРАКТІВ	
<i>Кондратенко К. О., Зосенко О. О., Гордєєва І. О., Куц О. В.</i>	45
pH-ОПТИМУМ ФЕРМЕНТНОГО ПРЕПАРАТУ «LACCASE FROM TRAMETES VERSICOLOR»	
<i>Конкіна Я. С., Лешишина Ю. О., Цяпало О. С., Шендрік О. М.</i>	46
АНТИОКСИДАНТНА АКТИВНІСТЬ ЕКСТРАКТІВ КОМЕРЦІЙНИХ ЧАЇВ	
<i>Ляшук О. С., Гордєєва І. О., Зосенко О. О., Куц О. В.</i>	47
PHYSICOCHEMICAL COMPARISON OF CHITIN AND CHITOSAN OBTAINED FROM TWO MUSHROOM SPECIES (<i>BOLETUS BOVINUS</i> AND <i>LACCARIA LACCATA</i>)	
<i>Oberemko A., Salaberria A. M., Baublys V., Labidi J.</i>	48
ВПЛИВ СИНТЕТИЧНИХ МІЮЧИХ ЗАСОБІВ НА ВМІСТ МАЛОНОВОГО ДІАЛЬДЕГІДУ В ТКАНИНАХ <i>CYPRINUS CARPIO L.</i>	
<i>Симонова Н. А., Маковійчук Т. В., Іванова Т. Д.</i>	49
КІНЕТИКА ТА МЕХАНІЗМ ЦИКЛІЧНИХ ОКИСНО-ВІДНОВНИХ ПЕРЕТВОРЕНЬ КАТІОН-РАДИКАЛА 2,2'-АЗИНО-БІС-(3-ЕТИЛБЕНЗОТІАЗОЛІН-6-СУЛЬФОНОВОЇ КИСЛОТИ) - ABTS ^{•+}	
<i>Старкова Г. М., Гордєєва І. О., Шендрік О. М.</i>	50
ВМІСТ ЗАГАЛЬНИХ ЛІПІДІВ В ТКАНИНАХ КОРОПА ЛУСКАТОГО (<i>CYPRINUS CARPIO L.</i>) ЗА ДІЇ НАТРІЙ ЛАУРИЛСУЛЬФАТУ	
<i>Ячна М. Г., Костюк К. К., Майко Г. С.</i>	51

QUANTUM CHEMISTRY / КВАНТОВА ХІМІЯ	53
DEPENDENCE OF CONFORMAL STABILITY (R) -4-MENTENONE FROM TEMPERATURE	
<i>Belkina N. V., Vakulin I. V., Talipova G. R., Latypova E. R., Vakulina A. I.</i>	<i>54</i>
EVALUATION OF CONFORMAL POPULATION (R)-4-MENTENONE	
<i>Belkina N. V., Vakulin I. V., Talipova G. R., Latypova E. R., Vakulina A. I.</i>	<i>55</i>
FEATURES OF CALCULATION OF STANDARD RedOx POTENTIALS BY THE SEMI-EMPIRICAL METHODS AM1, RM1 PM7	
<i>Bugaets D. V., Vakulin I. V., Zil'berg R. A.</i>	<i>56</i>
STUDY OF THE FEATURES OF STABILIZATION OF TRANSITION STATES OF THE PRINCE REACTION ON CLUSTERS FROM CARBON AND BORNITRIDE NANOTUBES	
<i>Zaytunova G. G., Pasko P. A., Vakulin I. V., Talipova G. R., Vakulina A. I.</i>	<i>57</i>
STABILIZATION OF THE TRANSITION STATE OF THE FORMATION OF 1,3-DIOXANES ON THE PRINCE REACTION IN THE PRESENCE OF CARBON NANOTUBES	
<i>Zaytunova G. G., Pasko P. A., Vakulin I. V., Talipova G. R., Vakulina A. I.</i>	<i>58</i>
STABILIZATION OF THE TRANSITION STATE OF FORMATION OF 1,3-DIOXANES ON THE PRINCE REACTION IN THE PRESENCE OF BORNITRIDE NANOTUBES	
<i>Zaytunova G. G., Pasko P. A., Vakulin I. V., Talipova G. R., Vakulina A. I.</i>	<i>59</i>
КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ СТРУКТУРИ НА ЕНЕРГІЮ О-Н ЗВ'ЯЗКУ N-ГІДРОКСИФТАЛІМІДА	
<i>Плешингер Т. С., Шендрік О. М.</i>	<i>60</i>
ПРО РЕАКТИВНІСТЬ ХІМІЧНИХ ЧАСТИНОК В РОЗЧИНАХ ВАНАДІЮ(V)	
<i>Семиволос Д. С., Волкова Л. К., Опейда Й. О.</i>	<i>61</i>
МОДЕЛЮВАННЯ ГОМОЛІЗУ МЕТИЛПЕРОКСИНІТРАТУ – КОМПОНЕНТА ФОТОХІМІЧНОГО СМОГУ	
<i>Пастернак О. М., Сербін В. С.</i>	<i>62</i>
АНАЛИЗ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МОЛЕКУЛЫ АНТРОНА И ИХ ВЗАИМОСВЯЗИ С ЕГО СПОСОБНОСТЬЮ К ОКИСЛЕНИЮ МОЛЕКУЛЯРНЫМ КИСЛОРОДОМ В ДМСО	
<i>Сердюк А. А., Касянчук М. Г.</i>	<i>63</i>
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ КРИТЕРИИ ЭФФЕКТИВНОСТИ ВОДОРОДНОГО СВЯЗЫВАНИЯ В СТРУКТУРНОМ АНАЛИЗЕ АРАМИДОВ	
<i>Токарь А. В., Чигвинцева О. П.</i>	<i>64</i>
MEDICINAL AND PHARMACEUTICAL CHEMISTRY / МЕДИЧНА ТА ФАРМАЦЕВТИЧНА ХІМІЯ	65
УЛЬТРАЗВУКОВА ІНТЕНСИФІКАЦІЯ БІОХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ	
<i>Базіло К. В., Зайка В. М.</i>	<i>66</i>
MODERN ASPECTS OF CREATING OF NEW POTENTIAL DRUGS BASED ON QuS-PROGRAM DEVELOPMENT	
<i>Dotsenko M. O.</i>	<i>67</i>
ОЦІНКА МУТАЦІЙНОГО ВПЛИВУ ДЕЯКИХ ОСНОВ ШИФФА 2-ГІДРАЗИНО-6-МЕТИЛПІРИМІДИН-4-ОЛУ ДЛЯ <i>DROSOPHILA MELANOGASTER</i>	
<i>Євсейчик Я. О., Янченко О. В.</i>	<i>68</i>
ПРОБЛЕМА ВАЛІДАЦІЇ КОНТРОЛЮ ЯКОСТІ СТЕРИЛЬНИХ ЛІКАРСЬКИХ ФОРМ ГЛЮКОЗИ	
<i>Івасик Ю. В., Беспалько Ю. М., Богза С. Л., Ситник Н. С.</i>	<i>69</i>
IDENTIFICATION OF EXPIRED MEDICINES ON BASIS ATENOLOL USING PRINCIPAL COMPONENT ANALYSIS	
<i>Kabirova L. R., Provorova Yu. R., Zilberg R. A., Habletdinova A. I.</i>	<i>70</i>
IN VITRO ACTIVITY OF NOVEL 1,3-OXAZOLE DERIVATIVES AGAINST HUMAN PAPILLOMAVIRUS	
<i>Kachaeva M. V., Pilyo G. S., Kornienko A. M., Prokopenko V. M., Zhirnov V. V., Brovarets V. S.</i>	<i>71</i>
РОЗРОБКА УМОВ ВИЗНАЧЕННЯ ГЛІКЛАЗИДУ В КРОВІ МЕТОДОМ ТВЕРДОФАЗНОЇ ЕКСТРАКЦІЇ ДЛЯ ХІМІКО-ТОКСИКОЛОГІЧНОГО АНАЛІЗУ	
<i>Кучер Т. В., Мерзлікін С. І.</i>	<i>72</i>
СРЕДСТВО ДЛЯ ЛЕЧЕНИЯ ОСТЕОПОРОЗА НА ОСНОВЕ КАЛЬЦИЕВЫХ СОЛЕЙ АМИНОКИСЛОТ	
<i>Манчик Е. А., Лопатик Д. В.</i>	<i>73</i>
6-FLUORO-2,3-DIHYDROBENZO[b][1,4]DIOXINE AS A PRECURSOR IN SYNTHESIS OF PHARMACOLOGICALLY IMPORTANT DERIVATIVES	
<i>Orlov M. A.</i>	<i>74</i>
РОЗРОБКА ТА ОПТИМІЗАЦІЯ СКЛАДУ ХАРЧОВОЇ ДОБАВКИ «ОМЕГА-ТОНІК» У МУЛЬТИКАПСУЛЬНІЙ ОБОЛОНЦІ	
<i>Поливанов Є. А.</i>	<i>75</i>

СИНТЕЗ ЧЕТВЕРТИННИХ ОНІЄВИХ СОЛЕЙ НА ОСНОВІ 6-ГАЛОГЕНОМЕТИЛ-3,4-ДИГІДРОПІРИМІДИН-2-ОНУ <i>Порфірян В. В., Арсеній Т. Г., Єфтенєва Р. І., Лявинець О. С.</i>	76
IDENTIFICATION OF ATENOLOL BASED AGENTS IN REAL OBJECTS USING THE PRINCIPAL COMPONENT METHOD <i>Provorova Yu. R., Kabirova L. R., Zilberg R. A., Ganieva L. R.</i>	77
АДСОРБЦІЙНА ІММОБІЛІЗАЦІЯ АЛЬБУМІНУ НАНОКОМПОЗИТОМ $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{SiO}_2$ <i>Свиридюк К. П., Поліщук А. О., Кусяк Н. В., Кальмбах С. С., Кусяк А. П., Горбик П. П.</i>	78
СИНТЕЗ ДЕНТАЛЬНОГО ГЕЛЮ НА ОСНОВІ ГІДРОКСИПАТИТУ З ЛІКУВАЛЬНИМ ЕФЕКТОМ <i>Сидоренко Я. Л., Шнуренко І. О., Яновська Г. О.</i>	79
ПЕРСПЕКТИВИ ВИКОРИСТАННЯ ЕКСТРАКТУ КАКАО З МЕТОЮ ПРОФІЛАКТИКИ ХВОРОБИ АЛЬЦГЕЙМЕРА <i>Толошній Д. В.</i>	80
КІЛЬКІСНЕ ВИЗНАЧЕННЯ АНТИДЕПРЕСАНТА АТОМОКСЕТИНА ЕКСТРАКЦІЙНО-СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНИМ МЕТОДОМ ЗА РЕАКЦІЄЮ З КИСЛОТНИМ АЗОБАРВНИКОМ – ПОХІДНИМ ТЕОФІЛІДИНУ <i>Томаровська Л. Ю., Карпушина С. А., Баюрка С. В.</i>	81
VOLTAMMETRIC SENSOR FOR DETERMINATION OF PROPRANOLOL IN BIOLOGICAL FLUIDS <i>Fayzullina Yu. G., Khabletdinova A. I., Zilberg R. A.</i>	82
A VOLTAMPEROMETRIC SENSORY SYSTEM FOR RECOGNITION OF TRYPTOPHAN ENANTIOMERS IN BIOLOGICALLY ACTIVE DIETARY SUPPLEMENTS <i>Khabletdinova A. I., Murzina K. A., Yarkaeva Yu. A.</i>	83
VOLTAMMETRIC SENSORS AND SENSOR SYSTEMS BASED ON ELECTRODES MODIFIED BY "SMART POLYMERS": NEW POSSIBILITIES FOR INCREASING SELECTIVITY <i>Maistrenko V. N., Zilberg R. A., Khabletdinova A. I., Kabirova L. R., Dubrovsky D. I., Yarkaeva Yu. A.</i> ..	84
INORGANIC CHEMISTRY / НЕОРГАНІЧНА ХІМІЯ	85
THE VARIED COORDINATION COMPOUNDS OF THE ANESTHETIC LIGANDS WITH PLATINUM (II) AND PALLADIUM(II) <i>Azizova A. N., Tagiyev D. B., Gasanov K. I., Gasimov Sh. G.</i>	86
NEW MAGNETIC COMPOUNDS BASED ON ZINC CHROMIUM SELENIDE ZnCr_2Se_4 <i>Barsova Z., Jendrzewska I.</i>	87
СПОСІБ ТРИСТАДІЙНОЇ ПЕРЕРОБКИ ФОСФОГІПСУ ДИГІДРАТУ НА ГІПСОВЕ В'ЯЖУЧЕ <i>Вазієв Я. Г., Павленко О. В.</i>	88
CRYSTAL ENGINEERING OF COPPER(I) AND SILVER(I) π -COMPLEXES WITH 1,2,4-TRIAZOLES ALLYL DERIVATIVES <i>Hordiichuk O. R., Slyvka Yu. I., Mys'kiv M. G.</i>	89
ДІАГРАМА СТАНУ СИСТЕМИ Dy–Ga–Ge (0-33,3 ат. % Dy, 600 C) <i>Деленко Т. О., Токайчук Я. О., Гладишевський Р. Є.</i>	90
ФТАЛОЦІАНІНОВІ КОМПЛЕКСИ ЦИРКОНІЮ ТА ГАФНІЮ З АЛКІЛАМІНО- β -КЕТОСНОЛЬНИМИ ЛІГАНДАМИ <i>Довбій Я. М., Третьякова І. М., Черній В. Я., Коробко С. В., Горський А. В.</i>	91
ЗМІШАНІ СОЛІ КУПРУМУ ТА ЦИНКУ З ПАРАВОЛЬФРАМАТ-Б-АНІОНОМ <i>Іванцова Е. С., Кравчук Ю. В., Поповська О. Ю., Циба І. О., Радіо С. В., Розанцев Г. М.</i>	92
СИНТЕЗ І ДОСЛІДЖЕННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ ПОДВІЙНИХ СИЛІКАТІВ ЛУЖНИХ МЕТАЛІВ ТА ПРАЗЕОДИМУ <i>Каишуба А. І., Борисова К. В., Печаліна Є. І.</i>	93
КОМПОЗИТНИЙ СОРБЕНТ «СИЛКАГЕЛЬ КРИСТАЛОГІДРАТ» ДЛЯ ВИКОРИСТАННЯ В СИСТЕМІ ДЕЦЕНТРАЛІЗОВАНОГО ОПАЛЕННЯ ПРИМІЩЕНЬ РІЗНОГО ПРИЗНАЧЕННЯ <i>Коломієць О. В., Сухий К. М.</i>	94
ELECTROCHEMICAL SYNTHESIS OF HYDRIDES $\text{Tb}_2\text{Ni}_{16}\text{SiH}_x$ AND $\text{Tb}_2\text{Ni}_{16}\text{Li}_{0.5}\text{Si}_{0.5}\text{H}_x$ <i>Kordan V. M., Nytko V. V., Tarasiuk I. I., Zelinska O. Ya., Pavlyuk V. V.</i>	95
ELECTROCHEMICAL SYNTHESIS OF THE $\text{TiAl}_{1-x}\text{Li}_x$ PHASE <i>Kordan V. M., Zhyshkovych O. R., Zelinska O. Ya., Pavlyuk V. V.</i>	96
ЕЛЕКТРОЛІТ ДЛЯ ЕЛЕКТРООСАДЖЕННЯ БЛИСКУЧИХ ПОКРИТТІВ СРІБЛОМ <i>Королянчук Д. Г., Коломієць О. В.</i>	97
^1H ТА ^{31}P -ЯМР ДОСЛІДЖЕННЯ ПАРАМАГНІТНИХ КООРДИНАЦІЙНИХ СПОЛУК ЛАНТАНОЇДІВ СКЛАДУ $[\text{Ln}(\text{CPh})_3 \cdot \text{Phen}]$, ДЕ $\text{CPh} = \text{CCl}_3\text{C}(\text{O})\text{N}^-\text{P}(\text{O})(\text{OCH}_3)_2$ <i>Труш В. О., Ліцис О. О., Слива Т. Ю., Амірханов В. М.</i>	98
ВПЛИВ ТЕМПЕРАТУРИ ТЕРМІЧНОГО РОЗКЛАДАННЯ АМОНІЙ ТЕТРАВАНАДАТУ НА ПРОЦЕСИ ФАЗОУТВОРЕННЯ ВИСОКОДИСПЕРСНИХ ОКСИДІВ ВАНАДІЮ <i>Лускань К. В., Мисов О. П.</i>	99

СИНТЕЗ, ВЛАСТИВОСТІ ТА АНТИСТРУКТУРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ КОБАЛЬТОВОГО АЛЮМІНАТУ	
<i>Лясковська М. Р., Татарчук Т. Р.</i>	100
REFINEMENT OF THE CRYSTAL STRUCTURE OF THE ARSENIDE HfNiAs	
<i>Makara I. A., Zhak O. V.</i>	101
МИКРОМОРФОЛОГИЯ ПОВЕРХНОСТИ, РЕНТГЕНСПЕКТРАЛЬНЫЙ МИКРОАНАЛИЗ И ИК-СПЕКТРОСКОПИЯ ПРОДУКТОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СИСТЕМАХ $\text{X}^{3+}-\text{WO}_4^{2-}-\text{H}^+-\text{H}_2\text{O}$, $\text{A}^+-\text{X}^{3+}-\text{WO}_4^{2-}-\text{H}^+-\text{H}_2\text{O}$ ($\text{A}^+=\text{K}^+, \text{NH}_4^+$), $\text{M}^{2+}-\text{X}^{3+}-\text{WO}_4^{2-}-\text{H}^+-\text{H}_2\text{O}$ ($\text{M}^{2+}=\text{Mg}^{2+}, \text{Zn}^{2+}$) ($\text{X} = \text{Y}, \text{Gd}, \text{Er}$)	
<i>Марійчак А. Ю., Ерошина Е. В., Розанцев Г. М., Радио С. В.</i>	102
КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА СПОЛУКИ $\text{HfAl}_{2,7}\text{Ge}_{0,3}$	
<i>Марискевич Д. Т., Токайчук Я. О., Гладішевський Р. Є.</i>	103
СИНТЕЗ Pr(III)-ВМІСНИХ ГЕТЕРОПОЛІ- ТА ІЗОПОЛІВОЛЬФРАМАТІВ	
<i>Марійчак О. Ю., Олексій Ю. А., Шевченко М. М., Розанцев Г. М., Радио С. В.</i>	104
КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА $\text{Pr}(\text{Nd})_3\text{Ni}_{0,5}\text{GeS}_7$	
<i>Марчук О. В., Гулай Л. Д.</i>	105
СИНТЕЗ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ МАГНІТОКЕРОВАНИХ МАГНІЙВМІСНИХ ШПІНІЛЬНИХ АДСОРБЕНТІВ	
<i>Мислін М. В., Миронюк І. Ф., Татарчук Т. Р.</i>	106
ХЕМОСОРБЦИОННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ ДИОКСИДА СЕРЫ ПРИРОДНЫМ И МОДИФИЦИРОВАННЫМ БАЗАЛЬТОВЫМ ТУФОМ	
<i>Кюсе Т. А., Назар А. П.</i>	107
КООРДИНАЦІЙНІ СПОЛУКИ Cu (II) з N-ДОНОРНИМИ ЛІГАНДАМИ ТА ДИЦІАНАМІДОМ: КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА ТА МАГНІТНІ ВЛАСТИВОСТІ	
<i>Букриньов О. С., Нікітіна А. Д., Вітушкіна С. В.</i>	108
СПЕКТРАЛЬНІ ДОСЛІДЖЕННЯ АНІОННИХ ТЕТРАКІС-КОМПЛЕКСІВ ЛАНТАНОЇДІВ З ДИМЕТИЛ-N-ТРИХЛОРАЦЕТИЛАМІДОФОСФАТОМ ТА ЗОВНІШНЬОСФЕРНИМ ТЕТРАФЕНІЛФОСФОНІЙ КАТІОНОМ	
<i>Олишевець І. П., Каряка Н. С., Амірханов В. М.</i>	109
СИНТЕЗ ТА КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА ГАЛОГЕНІДНИХ КОМПЛЕКСІВ Cu З КАТІОНОМ N-АЛІЛ-4-ЦІАНОПІРИДИНИ	
<i>Павлюк О. В., Лук'янов М. Ю., Горешнік Е. А.</i>	110
FROM THE TERNARY LAVES PHASES OF THE Mg-Ni-Ga SYSTEM	
<i>Pavlyuk N. V., Kowalczyk G., Krzyczmonik M., Balińska A., Dmytriv G. S., Pavlyuk V. V.</i>	111
ГЕТЕРОМЕТАЛЕВІ p-ЕЛЕМЕНТВМІСНІ КООРДИНАЦІЙНІ СПОЛУКИ КУПРУМУ(II) І НІКОЛУ(II) З ОСНОВАМИ ШИФФА	
<i>Панченко Т. І., Євсєєва М. В., Ранський А. П., Прадівляна А. С.</i>	112
ВИДАЛЕННЯ ІОНІВ ВАЖКИХ МЕТАЛІВ ІЗ ВОДИ ШЛЯХОМ ЗВ'ЯЗУВАННЯ З КАРБОНАТ-АНІОНАМИ	
<i>Радовенчик Я. В.</i>	113
HYDROGEN ELECTROSYNTHESIS WITH ANODE PROCESS DEPOLARIZATION BY ALUMINUM ALLOYS	
<i>Rudenko N. O., Zhelavskaya Yu. A., Smirnova O. L.</i>	114
STRUCTURAL CHEMISTRY OF COPPER(I) π -COMPLEXES WITH ALLYL ESTERS OF SOME HETEROCYCLIC SUBSTITUTED ACETIC ACIDS	
<i>Slyvka Yu. I., Goreshnik E. A., Myskiv M. G.</i>	115
КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА $\text{Er}_{2,36}\text{R}_{0,65}\text{Ge}_{1,28}\text{S}_7$ ($\text{R} = \text{Ce}, \text{Pr}$)	
<i>Смітюх О. В., Марчук О. В., Олексюк І. Д.</i>	116
ВИЩІ ПОТРІБНІ ФОСФІДИ Ta	
<i>Смоляк О., Ломницька Я.</i>	117
НИЗКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ОЧИСТКА ВОЗДУХА ОТ ДИОКСИДА СЕРЫ МОНО- И БИМЕТАЛЛЬНЫМИ СИСТЕМАМИ НА ОСНОВЕ БЕНТОНИТА	
<i>Кюсе Т. А., Голубчик К. О., Соколова Т. И.</i>	118
SILICA-SUPPORTED ERBIUM-YTTERBIUM NANOCOMPOSITES: THE STRUCTURAL AND MORPHOLOGICAL PROPERTIES	
<i>Sulym I. Ya., Tomanová K., Pálková H., Veteška P., Borysenko M. V., Janek M.</i>	119
СТРУКТУРИ, СФОРМОВАНІ НА ОСНОВІ 2D ШАРУВАТОГО НАПІВПРОВІДНИКА InSe І ІОННОЇ СОЛІ RbNO_3	
<i>Ткачук І. Г.</i>	120
NOVEL COPPER(I) π -COMPLEXES WITH ALLYL DERIVATIVES OF DISUBSTITUTED PSEUDOTHIOHYDANTOINS: SYNTHESIS, CRYSTAL STRUCTURE AND NLO PROPERTIES	
<i>Fedorchuk A. A., Slyvka Yu. I., Kityk I. V., Mys'kiv M. G.</i>	121

SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE CHARACTERIZATION OF NOVEL COPPER(I) π -COMPLEXES WITH N-ALLYL-1,2,3-TRIAZOLE	
<i>Fedko A. M., Slyvka Yu. I., Mys'kiv M. G.</i>	122
ОСОБЛИВОСТІ СИНТЕЗУ ТА БУДОВИ РІЗНОМЕТАЛЬНО-РІЗНОЛІГАНДНИХ КОМПЛЕКСІВ ГЕРМАНІЮ(IV) ТА ДЕЯКИХ ЗІД-МЕТАЛІВ З 1-ГІДРОКСІЕТИЛІДЕНДИФОСФОНОВОЮ КИСЛОТОЮ ТА 1,10-ФЕНАНТРОЛІНОМ	
<i>Хрїстова Н. М., Чебаненко О. А.</i>	123
ОДЕРЖАННЯ ПОДВІЙНИХ СИЛІКАТІВ ЗІ СТРУКТУРОЮ АПАТИТУ	
<i>Шульжук Б. В., Борисова К. В., Дремлюга А. В.</i>	124
ORGANIC CHEMISTRY / ОРГАНІЧНА ХІМІЯ	125
БИМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ КАТАЛИЗАТОРЫ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ Ag-Ni ДЛЯ ОРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА	
<i>Абишева А. К., Турсунова Р. Т.</i>	126
WATER-SOLUBLE NAPHTHOYLENE-BENZIMIDAZOLE DERIVATIVES AND THEIR SPECTRAL PROPERTIES	
<i>Bohdan K. I., Semenova O. M., Yermolenko I. G.</i>	127
MULTIPLE NONCOVALENT BONDING IN HALOGEN COMPLEXES WITH OXYGEN TERTIARY AMIDES	
<i>Burakov N. I., Kanibolotsky A. L.</i>	128
DEVELOPMENT OF WAYS OF IMPROVING EFFECTIVENESS OF IZOPREN PRODUCTION BY "DIOXANE" METHOD IN PRESENCE OF ZEOLITES OF GROUP Si_xO_y	
<i>Buranshina A. A., Pasko P. A., Vakulin I. V., Talipova G. R., Vakulina A. I.</i>	129
DEVELOPMENT OF WAYS TO INCREASE EFFICIENCY OF ISOPRENE PRODUCTION BY "DIOXANE" METHOD IN PRESENCE OF ZEOLITES OF GROUP OF $\text{Ca}_x[\text{H}_2\text{O}]_y\text{Al}_a\text{Si}_b\text{O}_c$	
<i>Buranshina A. A., Pasko P. A., Vakulin I. V., Talipova G. R., Vakulina A. I.</i>	130
DEVELOPMENT OF WAYS OF IMPROVING EFFECTIVENESS OF IZOPREN PRODUCTION BY "DIOXANE" METHOD IN PRESENCE OF ZEOLITES OF GROUP $\text{Na}^+_x(\text{H}_2\text{O})_y[\text{Al}_a\text{Si}_b\text{O}_c]$	
<i>Buranshina A. A., Pasko P. A., Vakulin I. V., Talipova G. R., Vakulina A. I.</i>	131
СИНТЕЗ НОВЫХ СПИРОПРОИЗВОДНЫХ 2-АМИНО-БЕНЗОТИЕН-3-ИЛ-ОНОВ	
<i>Токарева С. В., Бусыгина М. В., Варениченко С. А., Марков В. И.</i>	132
ПОХІДНІ 3,4-ДИГІДРОПІРИМІДИН-2-ОНУ ЯК ІНГІБІТОРИ РОЗКЛАДУ ГІДРОПЕРОКСИДУ КУМЕНУ	
<i>Бучковська О. С., Кошова Я. І., Єфтенєва Р. І., Лявинець О. С.</i>	133
ДОСЛІДЖЕННЯ РЕАКЦІЇ ОКИСНЕННЯ ЕТИЛБЕНЗЕНУ ТА ЙОГО ПОХІДНИХ ОЗОНОКИСНЕВОЮ СУМІШШЮ В ОЦТОВІЙ КИСЛОТІ	
<i>Бушуєв А. С., Скороход К. С.</i>	134
ВЗАЄМОДІЯ 2-АЦИЛАМІНО-3,3-ДИХЛОРОАКРИЛОНІТРИЛІВ З 5-АМІНОПІРАЗОЛАМИ	
<i>Велігіна Є. С., Абдурахманова Е. Р., Качаєва М. В., Пільо С. Г.</i>	135
ВПЛИВ ПОХІДНИХ 3,4-ДИГІДРОПІРИМІДИНОНУ З КОНДЕНСОВАНИМИ АРОМАТИЧНИМИ ЗАМІСНИКАМИ НА РОЗКЛАД ГІДРОПЕРОКСИДУ КУМЕНУ	
<i>Верега Б. Б., Крупич С. М., Єфтенєва Р. І., Лявинець О. С.</i>	136
ОДЕРЖАННЯ ПЕГЕЛЬОВАНИХ АНТИБІОТИКІВ ДЛЯ ВЕТЕРИНАРІЇ	
<i>Винницька С. І., Дронь І. А., Германович С. Б., Самарик В. Я., Ільков О. О., Остапів Д. Д.</i>	137
СИНТЕЗ 3-БЕНЗИЛГЕКСАГИДРОПИРРОЛО[1,2-а]ПИРАЗИН-1,4-ДИОНА І 3-ИЗОБУТИЛГЕКСАГИДРОПИРРОЛО[1,2-а]ПИРАЗИН-1,4-ДИОНА	
<i>Гайдукевич В. А., Попова Л. А., Книжников В. А.</i>	138
ВИКОРИСТАННЯ 1,2-БЕНЗОКСАТІН-4(3H)-ОН 2,2-ДІОКСИДУ В ТРИКОМПОНЕНТНОМУ СИНТЕЗІ 2-АМІНО-4-R-4H-ПІРАНО[3,2-C][1,2]БЕНЗОКСАТІН-3-КАРБОНІТРИЛ 5,5-ДІОКСИДІВ	
<i>Григорів Г. В., Лега Д. О., Черних В. П., Шемчук Л. А.</i>	139
АМІНОМЕТИЛЮВАННЯ УМБЕЛІФЕРОНУ ЗА УЧАСТЮ АМІНОСПИРТІВ	
<i>Данильченко В. Є., Фрасинюк М. С., Бондаренко С. П.</i>	140
СИНТЕЗ НОВИХ ПОХІДНИХ ПІРИДО[1,2-а]ПИРАЗИНУ	
<i>Дем'янюк В. В., Лучка С. П., Кушнір О. В.</i>	141
ПОХІДНІ ТРИФТОРОПІРИМІДИН-2-ОНУ ЯК ІНГІБІТОРИ ВІЛЬНОРАДИКАЛЬНИХ РЕАКЦІЙ	
<i>Єфтенєва Р. І., Гаврилик О. П., Романенко Х. В., Лявинець О. С., Вовк М. В.</i>	142
МЕТОДИ СИНТЕЗА ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ИЗОМЕРОВ N,N'-ДИМЕТИЛГЛИКОЛУРИЛА	
<i>Жаксыбаева А. Г., Кусербаева В. Р., Бакибаев А. А., Ташенов А. К.</i>	143
СИНТЕЗ КОНФОРМАЦІЙНО ОБМЕЖЕНИХ НАСИЧЕНИХ АМІНОСУЛЬФОХЛОРИДІВ	
<i>Жерш С. А., Григоренко О. О., Толмачов А. О.</i>	144
СИНТЕЗ 2-АМІНОАЛКІЛІМІДАЗОЛІВ НА ОСНОВІ АМІНОАЛЬДЕГІДІВ	
<i>Журавель І. О., Завада О. О.</i>	145

КАТАЛІТИЧНИЙ АЦИДОЛІЗ ЕПІХЛОРГІДРИНУ АЛІФАТИЧНИМИ ЦИКЛІЧНИМИ КАРБОНОВИМИ КИСЛОТАМИ	
<i>Завидовський О. І., Калінський О. М., Швед О. М.</i>	146
СИНТЕЗ ЗАМІЩЕНИХ ПІРАЗОЛІВ РЕЦИКЛІЗАЦІЮ ПОХІДНИХ 4-Н-ХРОМЕН-4-ІМІНІВ	
<i>Загорюлько С. П., Павлова С. Є., Фарат О. К., Варениченко С. А., Марков В. І.</i>	147
НОВИЙ ПІДХІД ДО СИНТЕЗУ 4,6-ДИЗАМІЩЕНИХ ПОХІДНИХ ПІРИДО[2,3- <i>d</i>]ПІРИМІДИН-7-ОНУ	
<i>Зінченко Г. М., Музичка Л. В., Смолій О. Б.</i>	148
РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ 1-МЕТИЛ-3-АЛКИЛ-2-(ГИДРОКСИМИНОМЕТИЛ)-ИМИДАЗОЛИЙ БРОМИДОВ В ПРОЦЕССАХ ПЕРЕНОСА ФОСФОНИЛЬНОЙ ГРУППЫ	
<i>Капитанов И. В., Сердюк А. А., Бураков Н. И., Шумейко А. Е., Карпичев Е. А.</i>	149
СИНТЕЗ НОВИХ СПІРОЦИКЛОАЛКЕНІЛЬНИХ ПОХІДНИХ 4,6-ДИГІДРОКСИ-2-ТІОПІРИМІДИНІВ РЕАКЦІЯМИ МЕТАТЕЗИСУ З ЗАКРИТТЯМ ЦИКЛУ	
<i>Кобижча Н. І., Головатюк В. М., Безуглий Ю. В., Кашковський В. І.</i>	150
NEW WATER-SOLUBLE DERIVATIVES OF 7-HYDROXY-3-HETARYL COUMARINS FOR THE FLUORESCENT LABELING OF BIOMOLECULES	
<i>Kuziv Ia. B., Dubey I. Ya.</i>	151
6-SULFOBENZOTRIAZOLE AS A NEW REAGENT FOR AMIDE BOND FORMATION IN AQUEOUS MEDIUM	
<i>Kuziv Ia. B., Dubey I. Ya.</i>	152
КВАНТОВОХІМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПОВЕДІНКИ КАРБОНОВИХ КИСЛОТ В РЕАКЦІЇ АЦИДОЛІЗУ ЕПІХЛОРГІДРИНУ	
<i>Марценюк Н. С., Кравчук А. В., Гембарук В. В., Ютілова К. С., Швед О. М.</i>	153
ГЕКСАНОВА КИСЛОТА ЯК НУКЛЕОФІЛЬНИЙ РЕАГЕНТ КАТАЛІТИЧНОГО РОЗКРИТТЯ ЦИКЛУ ХЛОРМЕТИЛОКСИРАНУ	
<i>Марчук Л. С., Бахалова Є. А., Калінський О. М., Швед О. М.</i>	154
СИНТЕЗ ПІРОЛО[3,4- <i>d</i>]ПІРИМІДИН-2,5,7-ТРИОНІВ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ЇХ ПРОТИГРИБКОВОЇ АКТИВНОСТІ	
<i>Мельничук Н. П., Роман І. Т., Манич Т. В., Кушнір О. В.</i>	155
DETERMINATION OF POTENTIALLY CATALYTICALLY ACTIVE ZEOLITES IN THE CONVERSION OF PIPERYLENE IN ISOPRENE	
<i>Mirgaleev D. S., Vakulin I. V., Talipov R. F., Talipova G. R., Vakulina A. I.</i>	156
DFT STUDY OF FREE GIBBS ENERGY ACTIVATION OF STAGES OF CONVERSION OF PIPERYLENE TO ISOPRENE	
<i>Mirgaleev D. S., Vakulin I. V., Talipov R. F., Talipova G. R., Vakulina A. I.</i>	157
THEORETICAL STUDY ON THE INFLUENCE OF TEMPERATURE ON THE FREE GIBBS ENERGY OF THE PROCESS OF THE CONVERSION OF PIPERYLENE TO ISOPRENE	
<i>Mirgaleev D. S., Vakulin I. V., Talipov R. F., Talipova G. R., Vakulina A. I.</i>	158
СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМАЗАНОНАФТАЛИМИДОВ	
<i>Немченко Н. В., Мироненко Л. С., Дистанов В. Б., Фалалеева Т. В., Дистанов В. В.</i>	159
СИНТЕЗ α -АМІНОАМІДИНІВ ТА ЇХ ВИКОРИСТАННЯ В СИНТЕЗІ НОВИХ НІТРОГЕНОВМІСНИХ ГЕТЕРОЦИКЛІВ	
<i>Онїко О. В., Гладков Є. С., Чебанов В. А.</i>	160
СИНТЕЗ НОВИХ ОКСИ- ТА АМІНОПОХІДНИХ 5-МЕТИЛТЕТРАЗОЛУ	
<i>Онїко О. В., Демидов О. О., Манвелян А. А., Гіюк В. М., Гладков Є. С.</i>	161
MECHANISM OF BENZIMIDAZO[2,1- <i>b</i>]THIAZANUM SALTS RECYCLIZATION UNDER THE ACTION OF EPICHLOROHYDRIN	
<i>Orlov M. A.</i>	162
SYNTHESIS OF NOVEL SERIES OF SUBSTITUTED 4-(2,3-DIHYDROBENZO[<i>b</i>][1,4]DIOXIN-6-YL)THIAZOLES	
<i>Orlov M. A.</i>	163
КАТАЛІТИЧНЕ АМІНУВАННЯ 1-МЕТОКСИ-ПРОПАНОЛУ-2	
<i>Павлов О. В., Білов В. В.</i>	164
ОДЕРЖАННЯ ОКСИАЛЬДЕГІДІВ З РОСЛИННОЇ СИРОВИНИ	
<i>Павлюк О. В., Ткаченко Т. В., Кашковський В. І.</i>	165
СИНТЕЗ ФУНКЦІОНАЛЬНО ЗАМІЩЕНИХ ІНДОЛІВ ЦИКЛІЗАЦІЄЮ АРИЛГІДРАЗОНІВ ПО МЕТОДУ ФІШЕРА	
<i>Сметанін М. В., Залізна К. В., Фарат О. К., Марков В. І.</i>	166
КІНЕТИКА РЕАКЦІЇ АЦЕТОЛІЗУ ЕПІХЛОРГІДРИНУ В ПРИСУТНОСТІ ТРЕТИННИХ АМІНІВ У БІНАРНОМУ РОЗЧИННИКУ	
<i>Ткач А. Р., Ютілова К. С., Швед О. М.</i>	167
СИНТЕЗ ЗАМЕЩЕННЫХ 5-АРИЛ-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ОНОВ	
<i>Толкунов А. С., Толкунов В. С., Смирнова О. В., Толкунов С. В.</i>	168

СИНТЕЗ 1,2,4-ТРИАЗОЛОВ ИЗ АРЕНАЛЬАЗИНОВ ХИНОНОВ <i>Труш Я. В., Мурашевич Б. В., Торопин Н. В., Бурмистров К. С.</i>	169
ВПЛИВ ПОЛЯРНОСТІ РОЗЧИННИКА НА ШВИДКІСТЬ КАТАЛІТИЧНОГО АЦИДОЛІЗУ ЕПІХЛОРГІДРИНУ ОЦТОВОЮ КИСЛОТОЮ <i>Шувакін С. І., Ютілова К. С., Швед О. М.</i>	170
МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУРИ 4-ЗАМІЩЕНОГО 9,10-АНТРАХІНОНУ В ЗАЛЕЖНОСТІ ВІД РОЗРАХУНКУ БІОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ <i>Шупенюк В. І., Тарас Т. М., Олексюк Г. І.</i>	171
DFT-ДОСЛІДЖЕННЯ НУКЛЕОФІЛЬНОСТІ ТРЕТИННИХ АМІНІВ У РЕАКЦІЇ КВАТЕРНІЗАЦІЇ <i>Якута П. О., Ютілова К. С., Швед О. М.</i>	172
PHYSICAL CHEMISTRY / ФІЗИЧНА ХІМІЯ	173
ВПЛИВ ТЕРМІЧНОЇ ОБРОБКИ НА КАТАЛІТИЧНУ АКТИВНІСТЬ ВІДНОВЛЕНОГО N-ДОПОВАНОГО БАГАТОШАРОВОГО ОКСИДУ ГРАФЕНУ В МОДЕЛЬНІЙ РЕАКЦІЇ ГІДРУВАННЯ ЕТИЛЕНУ <i>Абакумов О. О., Бичко І. Б., Стрижак П. Є.</i>	174
ІТК РЕАКЦІЇ СУЛЬФОНІЛЮВАННЯ БІСФЕНОЛІВ В ДВОФАЗНОМУ СЕРЕДОВИЩІ ВОДА-ДИХЛОРМЕТАН <i>Аніщенко В. М., Редько А. М., Рибаченко В. І.</i>	175
ПОЛУЧЕНИЕ МИКРО-МЕЗОПОРИСТЫХ АЛЮМОСИЛИКАТОВ SBA-15/ZSM-5 ЧАСТИЧНОЙ ЦЕОЛИТИЗАЦИЕЙ SBA-15 <i>Бараров Р. Ю., Щербань Н. Д., Яремов П. С., Филоненко С. Н., Цырина В. В.</i>	176
РЕГРЕССИОННЫЕ МОДЕЛИ QSAR <i>Бердник М. И., Дяченко А. В., Иванов В. В.</i>	177
ВЛАСТИВОСТІ НІКЕЛЕВИХ ІНТЕРКАЛАТІВ ШАРУВАТИХ КРИСТАЛІВ In_4Se_3 <i>Боледзюк В. Б., Ковалюк М. З.</i>	178
ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ТА ФОТОКАТАЛІТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НАНОКОМПОЗИТІВ C/TiO_2 , S/TiO_2 ТА $\text{C}/\text{S}/\text{TiO}_2$ <i>Бондаренко М. В., Халявка Т. О., Петрик І. С., Щербань Н. Д.</i>	179
ПОХІДНІ КУМАРИНУ ЯК СУБСТРАТИ ЛАККАЗИ <i>TRAMETES VERSICOLOR</i> <i>Бураков І. М., Лесишина Ю. О., Цяпало О. С., Фрасинюк М. С., Шендрик О. М.</i>	180
ИЗБИРАТЕЛЬНОЕ ХИМИЧЕСКОЕ РАСТВОРЕНИЕ СПЛАВА BrB_2 <i>Варфоломеева Ю. А., Егорова Л. М., Ларин В. И.</i>	181
ТЕОРЕТИЧНЕ ТА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОННИХ СПЕКТРІВ ПОГЛИНАННЯ КУПРУМУ (II) <i>Васильєва А. В., Христенко І. В., Иванов В. В.</i>	182
МОРФОЛОГІЯ ПЛІВОК ПОЛІАНІЛІНУ, ПОТЕНЦІОДИНАМІЧНО ОСАДЖЕНИХ НА АЛЮМІНІЄВОМУ ЕЛЕКТРОДІ З РОЗЧИНІВ СУЛЬФАТНОЇ КИСЛОТИ <i>Влад Х. І., Костів В. Т., Яцишин М. М.</i>	183
СИСТЕМИ $\text{ZrO}_2(\text{HfO}_2)\text{-NiO}$ ЯК ОСНОВА СТВОРЕННЯ НОВІТНІХ МАТЕРІАЛІВ <i>Глабай М. С.</i>	184
РОЛЬ СТРУКТУРИ N-ГІДРОКСИФТАЛІМІДІВ У РЕАКЦІЇ З ПЕРМАНГАНАТОМ КАЛІЮ <i>Гринда Ю. М., Компанець М. О., Новікова К. В., Ніколаєвський А. М., Опейда Л. І., Куш О. В.</i>	185
ВИВЧЕННЯ КІНЕТИКИ ОКИСНЕННЯ ГІДРОХІНОНУ В ПРИСУТНОСТІ ЛАККАЗИ <i>TRAMETES VERSICOLOR</i> МЕТОДОМ АМПЕРОМЕТРИЧНОЇ КИСНЕМЕТРІЇ <i>Гусенікова Є. С., Сергєєва Ю. Ю., Цяпало О. С., Лесишина Ю. О., Шендрик О. М.</i>	186
МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ АМОРФНИХ МЕТАЛЕВИХ СПЛАВІВ СИСТЕМ $\text{Fe}_{82}\text{Nb}_2\text{B}_{14}\text{RE}_2$ ($\text{RE} = \text{Y, Gd, Tb, Dy}$) <i>Даниляк М.-О. М., Бойчишин Л. М.</i>	187
MESOPOROUS SILICA FUNCTIONALIZED WITH METHYL RED AS COLORIMETRIC pH SENSOR <i>Dziazko M. O., Roik N. V.</i>	188
ИЗУЧЕНИЕ АНТИРАДИКАЛЬНЫХ СВОЙСТВ ОСНОВАНИЙ ШИФФА ГОССИПОЛА В РЕАКЦИИ С ДФПГ В ПРИСУТСТВИИ НСИ <i>Дикун А. М., Редько А. Н., Рибаченко В. И.</i>	189
КИСЛОТНО-ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА E- И Z-ФОРМ 1,3-ДИМЕТИЛ-2-(ГИДРОКСИМИНО-МЕТИЛ)ИМИДАЗОЛИЙ ИОДИДА <i>Капитанов И. В., Сердюк А. А., Бураков Н. И., Шумейко А. Е., Карпичев Е. А.</i>	190
ТЕРМОДИНАМІКА ОТРИМАННЯ МОНОДИСПЕРСНИХ ЧАСТИНОК SiO_2 ГІДРОЛІЗОМ ТЕТРАЕТОКСИСИЛАНУ В СИСТЕМІ Si-O-H-C-N <i>Каюн І. Г., Мисов О. П.</i>	191
ВИЗНАЧЕННЯ САЛІЦИЛОВОЇ КИСЛОТИ В РІЗНИХ СПОЛУКАХ <i>Козлова Ю. В., Швець І. І.</i>	192
ФАЗОВІ РІВНОВАГИ В СИСТЕМІ $\text{ZrO}_2\text{-La}_2\text{O}_3\text{-Gd}_2\text{O}_3$ ПРИ 1600 °C <i>Корнієнко О. А., Андрієвська О. Р., Биков О. І., Спасьонова Л. М.</i>	193

О МЕХАНИЗМЕ КОРРОЗИОННОГО РАЗРУШЕНИЯ МЕТАЛЛОВ ПОД ТОНКИМИ СЛОЯМИ ВЛАГИ	
<i>Короляничук Д. Г., Нефедов В. Г., Овчаренко В. И.</i>	194
ВПЛИВ ГІДРОТЕРМАЛЬНОЇ ОБРОБКИ НА СТРУКТУРНІ ВЛАСТИВОСТІ СИЛІКАТУ ЦИРКОНІЮ, СИНТЕЗОВАНОГО ЗОЛЬ-ГЕЛЬ МЕТОДОМ	
<i>Кравченко М. В., Стрелко В. В.</i>	195
ELECTROCHEMICAL BEHAVIOR OF Fe-Fe ₃ O ₄ -NaOH-O ₂ ENERGY STORAGE ELECTRODE SYSTEMS	
<i>Potapenko O. V., Kravchenko O. V., Pershina K. D.</i>	196
STRUCTURED HIERARCHICAL ZEOLITES OVERGROWN ON EXPANDED OBSIDIAN OR PERLITE	
<i>Kurmach M. M., Konysheva K. M., Yaremov P. S., Shvets O. V.</i>	197
ОКИСЛЕННЯ БАРВНИКІВ ХРОМОВОГО ТЕМНО-СИНЬОГО ТА МЕТИЛОВОГО ФІОЛЕТОВОГО ПЕРОКСИДОМ ВОДНЮ В ПРИСУТНОСТІ СОЛЕЙ ПЕРЕХІДНИХ МЕТАЛІВ	
<i>Куценко Н. В., Жильцова С. В., Опейда Й. О.</i>	198
STABILITY OF NANOPOROUS SILVER FOAMS IN ELECTROCATALYTIC DEHALOGENATION OF ORGANIC HALIDES	
<i>Mishura A. M., Lytvynenko A. S., Gavrilenko K. S., Kolotilov S. V.</i>	199
ЕФЕКТИВНІСТЬ РЕАКЦІЇ ФЕНТОНА В ПРОЦЕСІ ЗНЕБАРВЛЕННЯ МЕТИЛОВОГО ФІОЛЕТОВОГО	
<i>Макарова Л. О., Жильцова С. В., Опейда Й. О.</i>	200
ВПЛИВ ВМІСТУ СТАБІЛІЗАТОРІВ НА ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НАНОКРИСТАЛІЧНИХ ПОРОШКІВ СИСТЕМИ ZrO ₂ -Y ₂ O ₃ -CeO ₂	
<i>Марек І. О.</i>	201
КИСЛОТНЫЙ КАТАЛИЗ В РЕАКЦИЯХ УГЛЕВОДОРОДОВ В СЕРНОКИСЛОТНЫХ РАСТВОРАХ ВАНАДИЯ(V) И 1-АДАМАНТАНОЛА	
<i>Мерзликина М. А., Волкова Л. К.</i>	202
ОПИСАНИЯ МАСОПЕРЕНОСУ БІЛЯ ОБЕРТОВОГО ДИСКОВОГО ЕЛЕКТРОДУ: АНАЛІЗ НАБЛИЖЕНЬ В ДИФУЗНОМУ ШАРІ	
<i>Міщенчук В. В., Ткачук М. М., Боштан Ю. В., Юзькова В. Д.</i>	203
МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ АДСОРБЦІЇ АНТОЦΙΑНІВ ОЖИНИ З ВОДНИХ ЕКСТРАКТІВ НА БЕНТОНІТІ	
<i>Новотна В. О.</i>	204
ДОСЛІДЖЕННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ СЕРЕДОВИЩА В ПРИПОВЕРХНЕВОМУ ШАРІ ГІБРИДНИХ ОРГАНО-КРЕМНЕЗЕМНИХ МАТЕРІАЛІВ	
<i>Олімова Г. А., Христенко І. В.</i>	205
ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ НА ОСНОВЕ ФЕРРИТА ВИСМУТА Bi _{0,95} Pr _{0,05} FeO ₃ , Bi _{0,95} La _{0,05} FeO ₃ , Bi _{0,9} La _{0,1} FeO ₃	
<i>Печенова Г. Г., Губко С. В., Дудчик Г. П., Великанова И. А.</i>	206
ЗНЕБАРВЛЕННЯ РОЗЧИНУ МЕТИЛОВОГО ФІОЛЕТОВОГО ПРИ ДІЇ СИСТЕМИ H ₂ O ₂ + Fe ³⁺	
<i>Плюшко О. В., Жильцова С. В., Опейда Й. О.</i>	207
СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ КРИТИЧНОЇ КОНЦЕНТРАЦІЇ МІЦЕЛОУТВОРЕННЯ ЦЕТИЛПРИДИНІЙ БРОМІДУ З ВИКОРИСТАННЯМ БАРВНИКА	
<i>Пономарьов В. К., Шаповалов С. А.</i>	208
ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ПЕРЕБІГУ ПРОЦЕСУ ОЧИСТКИ РОЗТОПУ K ₂ Sr ₂ Cl ₅ ПАРОЮ ТЕТРАХЛОРМЕТАНУ ПРИ 973 К	
<i>Ребров О. Л., Чергинец В. Л., Юрченко О. І., Реброва Т. П., Пономаренко Т. В.</i>	209
ФОТОКАТАЛІТИЧНА АКТИВНІСТЬ НАНОКОМПОЗИТІВ Ni-TiO ₂ , ОДЕРЖАНИХ НА НІКЕЛЕВІЙ МАТРИЦІ	
<i>Савчук О. О., Скар І. В., Скар Ю. Є.</i>	210
АНТИРАДИКАЛЬНА АКТИВНІСТЬ ХІНОЛІЛГІДРАЗОНІВ З ФЕНОЛЬНИМИ ФРАГМЕНТАМИ У СКЛАДІ МОЛЕКУЛ	
<i>Семененко Т. С., Хижан О. І., Хижан О. І., Ніколаєвський А. М.</i>	211
ВЛИЯНИЕ ТРИФТОРУКСУСНОЙ КИСЛОТЫ НА ПРОЦЕСС ОСНОВНО-КАТАЛИЗИРУЕМОГО ОКИСЛЕНИЯ АНТРОНА МОЛЕКУЛЯРНЫМ КИСЛОРОДОМ В ДМСО	
<i>Сердюк А. А., Касянчук М. Г.</i>	212
УДЕЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЛИТИЙ-СЕРНЫХ ЯЧЕЕК В СОЛЬ-СОЛЬВАТНЫХ ЭЛЕКТРОЛИТАХ	
<i>Сирош В. А., Глоба Н. И.</i>	213
ЕЛЕКТРООСАДЖЕННЯ КОМПОЗИТІВ Ni-TiO ₂ ІЗ МЕТИЛСУЛЬФАТНОГО ЕЛЕКТРОЛІТУ, ЩО МІСТИТЬ ВОДОРОЗЧИННУ СІЛЬ ТИТАНУ(IV)	
<i>Скар Ю. Є., Скар І. В., Савчук О. О., Безик А. О.</i>	214

СПЕКТРАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМ АСКОРБИНОВОЙ КИСЛОТЫ В ПРОЦЕССАХ РАДИКАЛЬНО-ЦЕПНОГО ОКИСЛЕНИЯ	
Ефимова И. В., Смирнова О. В., Опейда И. А.	215
ВПЛИВ TEMПЕРАТУРИ ОБРОБКИ ВИХІДНИХ ПОРОШКІВ НА СПІКАЄМІСТЬ ЗТА-КОМПОЗИТІВ	
Смирнова-Замкова М. Ю.	216
СТРУКТУРА ГІБРИДНИХ ПОЛІМЕРНИХ КОМПОЗИТІВ НА ОСНОВІ МІКРОВОЛОКОН ЦЕЛЮЛОЗИ ТА ПОЛІАНІЛІНУ	
Сухара А. В., Козловська О. Р., Верещагін О. М., Стеців Ю. А., Яцишин М. М.	217
СРАВНИТЕЛЬНАЯ СОРБЦИЯ ГЛИЦИНА И ПРОЛИЛЛЕЙЦИЛГЛИЦИНА НА АНИОНИТЕ АВ-17	
Каранкевич Е. Г., Сушиц А. Г.	218
ГРАНИЧНІ УМОВИ МОДЕЛЕЙ СТАЦІОНАРНОЇ ТА НЕСТАЦІОНАРНОЇ КІНЕТИКИ В ЕЛЕКТРОХІМІЧНИХ СИСТЕМАХ З ДИСКОВИМ ОБЕРТОВИМ ЕЛЕКТРОДОМ	
Ткачук М. М., Міщенчук В. В., Боштан Ю. В., Юзькова В. Д.	219
ГІДРУВАННЯ ДІОКСИДУ ВУГЛЕЦЮ НА КОБАЛЬТОВОМУ КОМПОЗИТНОМУ МЕМБРАННОМУ КАТАЛІЗАТОРІ	
Трепядько Д. О., Корж Р. В.	220
АДСОРБЦІЙНЕ ВИЛУЧЕННЯ АНТОЦΙΑНІВ ЯГІД ЧОРНОПІДНОЇ АРОНІЇ НА ВОЛОКНИСТОМУ КАТІОНІТІ ФІБАН К-1	
Тютюнник Т. В., Новотна В. О.	221
ДОСЛІДЖЕННЯ СТАНУ АДСОРБОВАНИХ НА ПОВЕРХНІ АЕРОСИЛІВ АДДУКТІВ ТРИС- β -ДИКЕТОНАТІВ Eu(III) ТА 1,10-ФЕНАНТРОЛІНУ	
Фадєєв Є. М., Смола С. С., Снурнікова О. В., Коровін О. Ю.	222
ПРО СУМІСНЕ ОКИСНЕННЯ КУМОЛУ І БЕНЗИЛОВОГО СПИРТУ В ПРИСУТНОСТІ N-ГІДРОКСИФТАЛІМІДУ	
Гринда Ю. М., Хавунко О. Ю., Компанець М. О., Шендрік О. М., Опейда Й. О.	223
ФОТОХІМІЧНА E-, Z- ІЗОМЕРИЗАЦІЯ 2-СТИРИЛ-5-ФЕНІЛОКСАЗОЛУ	
Ходжаєва Р. С., Чумак А. Ю., Чепелева Л. В.	224
КІНЕТИКА НАНОСТРУКТУВАННЯ АМОРФНИХ МЕТАЛЕВИХ СПЛАВІВ НА ОСНОВІ АЛЮМІНІЮ ЛЕГОВАНИХ Y, Gd, Dy	
Хрущук Х. І., Даниляк М.-О. М., Бойчишин Л. М., Лопчак М. М., Лема А. О., Пандяк Н. Л.	225
РЕАКЦІЯ ФОТОПЕРЕНОСУ ПРОТОНА ТА СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМІНЕСЦЕНТНІ ВЛАСТИВОСТІ 1,5-ДИФЕНІЛ-3-(2'-ГІДРОКСИФЕНІЛ)-2-ПІРАЗОЛІНУ	
Чепелева Л. В., Нужний О. О.	226
СОРЕБЦИЯ СОЕДИНЕНИЙ УРАНА (VI) ИЗ МОДЕЛЬНЫХ РАСТВОРОВ, ИМИТИРУЮЩИХ ШАХТНЫЕ ВОДЫ, С ПОМОЩЬЮ ОРГАНО-НЕОРГАНИЧЕСКИХ АНИОНИТОВ	
Черевичная И. Ю.	227
ВЗАЄМОДІЯ ОКСИДУ ТРИЮ З ОКСИДАМИ ЛАНТАНУ ТА САМАРІЇ ПРИ TEMПЕРАТУРІ 1500 °C	
Чудінович О. В., Широков О. В.	228
ВПЛИВ КІЛЬКОСТІ ВМІСТУ ОРГАНІЧНОЇ ФАЗИ НА В'ЯЗКІСТЬ ПАРАФІНОВИХ ЕМУЛЬСІЙ	
Шаповалова А. В., Крутько І. Г., Каулін В. Ю.	229
ВПЛИВ МІКРОХВИЛЬОВОГО ПОЛЯ НА СТУПІНЬ НАБУХАННЯ КОЛАГЕНУ	
Шевєрьова С. С., Сасєвич О. В., Чернушенко О. О.	230
CHEMICAL ENGINEERING / ХІМІЧНА ІНЖЕНЕРІЯ.....	231
ПУТИ ПОВЫШЕНИЯ КАЧЕСТВА ЦИАНИСТОГО НАТРИЯ	
Авина С. И., Мязина Е. В.	232
РЕГЕНЕРАЦІЯ МОТОРНИХ ОЛИВ	
Адамчук А. В., Єфименко В. В., Макарьчук М. С.	233
ЕЛЕКТРОХІМІЧНЕ ОКСИДУВАННЯ ТИТАНОВОГО СПЛАВУ ВТ6 У РОЗЧИНАХ ЩАВЛЕВОЇ КИСЛОТИ	
Андрущенко О. О., Мизенко О. О., Пилипенко О. І.	234
ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНА УСТАНОВКА ДЛЯ ОДЕРЖАННЯ ДОБРИВА ТА БІОГАЗУ НА ОСНОВІ ПОБУТОВИХ ВІДХОДІВ	
Баранник К. В., Волошин М. Д.	235
ПОЛУЧЕНИЕ ТЕПЛОИЗОЛЯЦИОННЫХ КЕРАМИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОТХОДОВ ПЕНООБРАЗОВАТЕЛЕЙ	
Белугин Д. С., Богдан Е. О., Попов Р. Ю.	236
ДОСЛІДЖЕННЯ КІНЕТИКИ ВИДІЛЕННЯ БІОГАЗУ ІЗ СУМІШІ ПОБУТОВИХ ВІДХОДІВ ІЗ ДОДАВАННЯМ КАЛЬЦІЄВМІСНОГО ШЛАМУ	
Белянська О. Р., Біленко Т. Є., Мягка Ю. О., Шумило К. П.	237
ОБҐРУНТУВАННЯ ВИБОРУ КОНЦЕНТРАЦІЇ ЕЛЕКТРОПРОВІДНОЇ ДОБАВКИ ДЛЯ ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО СИНТЕЗУ ПЕРОКСИОЦТОВОЇ КИСЛОТИ	
Білоус Т. А., Тульський Г. Г., Мухін А. С.	238

ВИБІР ПАРАМЕТРІВ СПЕКТРІВ ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ІМПЕДАНСУ ДЛЯ ОЦІНКИ СТАНУ ПЕРВИННИХ ДЖЕРЕЛ СТРУМУ	
<i>Бойчук О. В., Рябоконь О. Л.</i>	239
БАГАТОСВИНЦЕВІ ЛЕГКОПЛАВКІ СТЕКЛА ТА СКЛОКОМПОЗИЦІЇ НА ЇХ ОСНОВІ	
<i>Гордєєв Ю. С., Носенко О. В., Голеус В. І.</i>	240
ТОКСИКОЛОГІЧНА НЕБЕЗПЕКА ВІДХОДІВ ГАЛЬВАНІЧНИХ ВИРОБНИЦТВ	
<i>Диманов Б. В., Даценко В. В.</i>	241
ЗАСТОСУВАННЯ УЛЬТРАЗВУКУ НА СТАДІЇ «БІЛОЇ ФІЛЬТРАЦІЇ» В ТЕХНОЛОГІЇ ПІГМЕНТНОГО ДІОКСИДУ ТИТАНУ	
<i>Дубенко А. В., Ніколенко М. В., Авдієнко Т. М., Верещак В. Г.</i>	242
ВИКОРИСТАННЯ ФУЛЕРЕНІВ В ЯКОСТІ ПРИСАДОК ДО ПАЛИВНО-МАСТИЛЬНИХ МАТЕРІАЛІВ	
<i>Єфіменко О. В.</i>	243
ВИКОРИСТАННЯ ВІДПРАЦЬОВАНИХ ОЛИВ ДЛЯ ВИРОБНИЦТВА ПЛАСТИЧНИХ МАСТИЛ	
<i>Іванова І. О., Атаманенко Н. С., Добрівська О. О., Кучерук М. А.</i>	244
АНАЛІЗ ТЕМПЕРАТУРНИХ УМОВ КОКСУВАННЯ В ПРОМИСЛОВИХ ПЕЧАХ РІЗНОЇ ШИРИНИ	
<i>Кардаш М. О., Збіковський О. І.</i>	245
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РАЗЛИЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ОЧИСТКИ СТОЧНЫХ ВОД КРАСИЛЬНО-ОТДЕЛОЧНЫХ ПРОИЗВОДСТВ	
<i>Команяк В. А., Шибека Л. А.</i>	246
ПЕРЕРАБОТКА ШЛАМА ХИМВОДООЧИСТКИ ТЭЦ	
<i>Копач А. И., Залыгина О. С.</i>	247
ВПЛИВ НАФТОГАЗОВОЇ ГАЛУЗІ НА ДОВКІЛЛЯ	
<i>Маховський В. О., Крюковська О. А.</i>	248
РАЗРАБОТКА СОСТАВОВ И ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗНОСОСТЙКИХ СТЕКЛОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ	
<i>Летченя А. В., Трусова Е. Е.</i>	249
БАГАТОФУНКЦІОНАЛЬНИЙ РЕАКТОР-НЕЙТРАЛІЗАТОР З МОДУЛЬНИМИ СЕПАРАЦІЙНО-, ТЕПЛО- ТА МАСООБМІННИМИ ПРИСТРОЯМИ	
<i>Люшинченко М. П., Маренок В. М., Смирнов В. А., Скиданенко М. С., Ляпощенко О. О., Шевчук А. В.</i>	250
СИНТЕЗ ФОСФАТНИХ ХАРЧОВИХ ДОБАВОК	
<i>Малахова К. В., Ніколенко М. В.</i>	251
ДОСЛІДЖЕННЯ ФАКТОРІВ, ЩО МАЮТЬ ВПЛИВ НА ПРОЦЕС МОДИФІКАЦІЇ КРОХМАЛІВ	
<i>Миргородська В. Д., Должиков С. С., Авдієнко Т. М., Ніколенко М. В.</i>	252
РАЗРАБОТКА СОСТАВОВ КЕРАМИЧЕСКИХ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ЭЛЕКТРОИЗОЛЯЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ	
<i>Мисюк В. С., Попов Р. Ю., Дятлова Е. М.</i>	253
РОЗРОБКА ПЛАНУ ПРОМИСЛОВИХ ДОСЛІДЖЕНЬ ВПЛИВУ ТЕХНОЛОГІЧНИХ ФАКТОРІВ НА ЯКІСТЬ КОКСУ ПРИ ВЕЛИКИХ ПЕРІОДАХ КОКСУВАННЯ	
<i>Міщенко В. П., Збіковський О. І.</i>	254
ВИКОРИСТАННЯ ФЕРОСИЛІЦІЇ В ТЕХНОЛОГІЇ ВИГОТОВЛЕННЯ ГАЗОБЕТОНІВ	
<i>Мусіна А. О., Осипова М. О., Сігунов О. О., Кравченко Т. В.</i>	255
ЗАЩИТНО-УПРОЧНЯЮЩИЕ ПОКРЫТИЯ ДЛЯ ФУТЕРОВКИ ТЕПЛОВЫХ АГРЕГАТОВ, ПОЛУЧЕННЫЕ МЕТОДОМ СВС	
<i>Мухлядо В. И., Попов Р. Ю.</i>	256
ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕХНОЛОГІЇ УТИЛІЗАЦІЇ КАЛЬЦІЄВМІСНИХ ШЛАМІВ З ПЕРСПЕКТИВОЮ ОДЕРЖАННЯ БІОМІНЕРАЛЬНОГО ДОБРИВА	
<i>Мягка Ю. О., Волошин М. Д.</i>	257
КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКИХ ПОКРЫТИЙ СПЛАВАМИ D ⁴⁻⁸ МЕТАЛЛОВ	
<i>Ненастина Т. А., Сахненко Н. Д., Ведь М. В.</i>	258
ТЕХНОЛОГІЯ ОТРИМАННЯ МАРМУРУ ІЗ БЕТОНУ	
<i>Омельченко С. О., Пономарьов М. М., Каулін В. Ю.</i>	259
ВПЛИВ ДОМІШОК АЛЮМОСИЛКАТУ НА РЕЗИСТИВНІ ТА ТЕПЛОВІ ВЛАСТИВОСТІ ЕЛЕКТРОХІМІЧНОЇ СИСТЕМИ Fe-Fe ₃ O ₄ -C-NaOH	
<i>Пантелеймонов Р. А., Кравченко О. В., Першина К. Д.</i>	260
ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ СТРУКТУРИ ПОРИСТИХ СКЛОКРИСТАЛІЧНИХ МАТЕРІАЛІВ (ПСКМ) НА ГЛИБИНУ ЇХ ПРОСОЧУВАННЯ ВОДНИМ РОЗЧИНОМ	
<i>Петух С. І., Чабан О. О., Кольцова Я. І.</i>	261
ИССЛЕДОВАНИЯ Co-Cr КАТАЛИЗАТОРОВ НАНЕСЕННОГО ТИПА, ПОЛУЧЕННЫХ С ПРИМЕНЕНИЕМ КЕРАМИЧЕСКИХ НОСИТЕЛЕЙ	
<i>Привалова Г. С., Авина С. И., Лобойко А. Я., Бутенко А. Н.</i>	262

НІТРАТНОКИСЛОТНЕ РОЗКЛАДАННЯ АЛЖИРСЬКИХ ФОСФОРИТІВ <i>Радченко О. В., Ларичева Л. П., Волкова А. Є.</i>	263
АНАЛІЗ ВІДПРАЦЬОВАНИХ МОТОРНИХ ОЛИВ <i>Рудьман Я. О., Кривуш М. С., Чумак О. А.</i>	264
ЗМІЦНЕННЯ ПОВЕРХНІ ЛІТІЙАЛЮМОСИЛКАТНИХ СКЛОКРИСТАЛІЧНИХ МАТЕРІАЛІВ ШЛЯХОМ ІОНОГО ОБМІНУ <i>Рябінін С. О., Савцова О. В., Воронов Г. К.</i>	265
ДОСЛІДЖЕННЯ ФОРМУВАННЯ ЕМАЛЕВИХ ПОКРИТТІВ НА АЛЮМІНІІ В ЗАЛЕЖНОСТІ ВІД ТОНІНИ ПОМЕЛУ СКЛА <i>Салей Ан. А., Голєус В. І., Козирєва Т. І.</i>	266
ІНГІБІТОРНА ЗДАТНІСТЬ ФЕНОЛІВ <i>Сачанова Ю. І., Овчаренко О. О., Проскуріна В. О., Дженюк А. В.</i>	267
ЕЛЕКТРООСАДЖЕННЯ ПОКРИТТІВ Ni-TiO_2 ІЗ МЕТИЛСУЛЬФОНАТНОГО ЕЛЕКТРОЛІТУ ЗА ПРИСУТНОСТІ ВОДОРОЗЧИННИХ СОЛЕЙ ТИТАНУ(IV) ТА ІОНІВ КУПРУМУ(II) <i>Скнар І. В., Скнар Ю. Є.</i>	268
РАДІОНУКЛІДНИЙ СКЛАД КАЛІЙНИХ ДОБРІВ <i>Сніткіна А. І., Хоботова Е. Б.</i>	269
СПОСОБИ ПІДВИЩЕННЯ ЗАХИСНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ОПТИЧНИХ СИТАЛІВ <i>Топчий В. Л., Савцова О. В., Бабіч О. В.</i>	270
PREPARATION AND INVESTIGATION OF $\text{Er}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$ CO-DOPED $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ CERAMIC <i>Trusova E., Ва́ча L., Veteška P., Janek M.</i>	271
НОВИЙ СПОСІБ ПЕРЕЕСТЕРИФІКАЦІЇ РОСЛИННИХ ОЛІЙ ТА ЖИРІВ БІОЛОГІЧНОГО ПОХОДЖЕННЯ <i>Федоришин О. С.</i>	272
ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ АМІНІВ НА ГІГРОСКОПІЧНІСТЬ КЛІНКЕРУ <i>Флейшер Г. Ю., Трус І. М., Гарбуз А. С.</i>	273
ПОРІВНЯЛІНИЙ АНАЛІЗ ЕФЕКТИВНОСТІ МЕТОДІВ ЗАПОБІГАННЯ УТВОРЕННЮ ТРИАЛОГЕНМЕТАНІВ ПРИ ПІДГОТОВЦІ ПИТНОЇ ВОДИ <i>Хмарська Л. О., Заруба С. В.</i>	274
РАДІОНУКЛІДИ У СКЛАДІ АЗОТНО-ФОСФОРНИХ ДОБРІВ <i>Цибань А. П., Хоботова Е. Б.</i>	275
ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДУ АНАЛІЗУ ІЄРАРХІЙ ДЛЯ ВИБОРУ КАТАЛІЗАТОРА <i>Шаган Д. В., Бугаєва Л. М.</i>	276
ОСАЖДЕНИЕ НИКЕЛЯ ИЗ ОТРАБОТАННЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ НИКЕЛИРОВАНИЯ ГИДРОКСИДОМ НАТРИЯ <i>Шаметько К. Ю., Залыгина О. С., Чепрасова В. И.</i>	277
ДОСЛІДЖЕННЯ РІВНЯ ФЕНОЛЬНИХ РЕЧОВИН У ВИЧАВКАХ ВИШНІ ЗВИЧАЙНОЇ <i>Ясінська А. І., Сабадаш Н. І.</i>	278
CHEMICAL EDUCATION / ХІМІЧНА ОСВІТА	279
ІНДИВІДУАЛІЗАЦІЯ НАВЧАННЯ ІЗ СТЕРЕОХІМІЇ НА ОСНОВІ ДИСТАНЦІЙНОГО КУРСУ НА ПЛАТФОРМІ MOODLE <i>Антонова П. В., Ситник Н. С., Швед О. М.</i>	280
ФОРМУВАННЯ КОМПЕТЕНТНОСТЕЙ ПРИ ВИКЛАДАННІ ХІМІЇ <i>Бойко Ю. В.</i>	281
ВЗАЄМОЗВ'ЯЗОК ДЕЯКИХ ФУНДАМЕНТАЛЬНИХ ТА СПЕЦІАЛЬНИХ ДИСЦИПЛІН ПРИ ПІДГОТОВЦІ ІНЖЕНЕРІВ-ТЕХНОЛОГІВ <i>Горайнова Ю. А.</i>	282
ЗАВДАННЯ ДО ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ З ДИСЦИПЛІНИ «БІОХІМІЯ КЛІТИНИ» <i>Гуцалюк М. Ю., Лесишина Ю. О., Ількевич Н. С.</i>	283
НОВЫЕ ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ХИМИИ <i>Егорова Л. М.</i>	284
КОМПЕТЕНТІСНИЙ ПІДХІД У ХІМІЧНІЙ ОСВІТІ – ВИМОГА СЬОГОДЕННЯ <i>Кочерга С. В.</i>	285
РОЗРОБКА МЕТОДИЧНОЇ ЛІТЕРАТУРИ ДО КУРСУ «КРИСТАЛОХІМІЯ» <i>Норик О. А., Борисова К. В., Розанцев Г. М.</i>	286
АЛХІМІЧНА ДОБА В УКРАЇНІ <i>Родигін К. М., Родигін М. Ю.</i>	287
ХІМІЧНА ОСВІТА В ТЕХНІЧНОМУ ВНЗ <i>Свашенко Ю. В., Даценко В. В.</i>	288

ЖОВЧ ЯК ОБ'ЄКТ ЛАБОРАТОРНОЇ ДІАГНОСТИКИ ПРИ ВИВЧЕННІ ДИСЦИПЛІНИ «КЛІНІЧНА БІОХІМІЯ»	
<i>Скубенко К. Г., Лаховець К. М., Лесишина Ю. О.</i>	289
WORK WITH GIFTED CHILDREN: "CHEMICAL OLYMPIADS"	
<i>Fazliev S. A.</i>	290
CHEMISTRY OF POLYMERS AND COMPOSITES / ХІМІЯ ПОЛІМЕРІВ І КОМПОЗИТІВ	291
GEL-LIKE FORMS OF DRUGS ON THE BASIS OF SOLUTIONS OF SUCCINAMIDE OF CHITOSAN WITH GLYCEROL	
<i>Bazunova A. A.</i>	292
THE COMPUTER SIMULATION OF CONSTANT PHYSICAL FIELDS	
<i>Bardadym Y., Sporyagin E.</i>	293
ПОЛІМЕР-ПОЛІМЕРНІ КОМПОЗИТИ НА ОСНОВІ ВОДОРОЗЧИННИХ ПОЛІМЕРІВ ТА ПОЛІАНІЛІНУ	
<i>Білосорочка Е. О., Дутка В. С., Ковальський Я. П.</i>	294
ПОЛІМЕР/ПОЛІМЕРНІ ПЛІВКОВІ КОМПОЗИТИ НА ОСНОВІ ЦЕЛЮЛОЗИ ТА ПОЛІАНІЛІНУ	295
<i>Бубісь М. Р., Журавецька І. М., Верещагін О. М., Стеців Ю. А., Яцишин М. М.</i>	
ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ УГЛЕПЛАСТИКОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭФИРЭФИРКЕТОНОВ	
<i>Веремейченко Н. А., Буря А. И., Набережная О. А., Томина А.-М. В.</i>	296
ВПЛИВ АМІНІВ НА ДИСПЕРСНІСТЬ ЦЕМЕНТУ	
<i>Гарбуз А. С., Флейшер Г. Ю.</i>	297
ИССЛЕДОВАНИЯ НЕВЫСЫХАЮЩИХ ГЕРМЕТИЗИРУЮЩИХ БУТИЛКАУЧУКОВЫХ КОМПОЗИЦИЙ	
<i>Гарькавый Д. Ю., Авраменко В. Л.</i>	298
ВПЛИВ ІНІЦІАТОРА НА КІНЕТИКУ РОЗКЛАДАННЯ КОМПЛЕКСНОГО ГАЗОУТВОРЮВАЧА ДЛЯ ОТРИМАННЯ ПЕКОВИХ ПІН	
<i>Данило І. І., Костенков А. В., Крутько І. Г.</i>	299
ГИДРАТНЫЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТНОЙ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ ЯНТАРЯ И ВЫСОКОДИСПЕРСНОГО КРЕМНЕЗЕМА	
<i>Елагина Н. В., Крупская Т. В., Туров В. В.</i>	300
СИНТЕЗ И ХАРАКТЕРИСТИКА НАНОЧАСТИЦ АЛЬБУМИНА И ПОЛИМОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ ДЛЯ ИММОБИЛИЗАЦИИ ИХ ЛЕКАРСТВЕННЫМИ ПРЕПАРАТАМИ	
<i>Жапарова Л. Ж., Жумагалиева Т. С., Тажбаев Е. М., Арыстанова Ж. Т.</i>	301
ФЕНОЛ-СЕЧОВИНО-ФОРМАЛЬДЕГІДНІ ОЛІГОМЕРИ З АЗОТВІСНИМИ ГЕТЕРОЦИКЛАМИ	
<i>Золотаренко М. С., Варлан К. Є.</i>	302
ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КОМПОНЕНТОВ В СИСТЕМЕ ХИТОЗАН-КАНАМИЦИН	
<i>Зидиханова Л. Ф.</i>	303
МОДИФІКОВАНІ ФЕНОЛЬНІ СМОЛИ ДЛЯ ПЛІВКОУТВОРЮВАЛЬНИХ ЗАХИСНИХ КОМПОЗИЦІЙ	
<i>Зубенко А. Е., Варлан К. Є., Северенчук І. М.</i>	304
СМОЛИ НА ОСНОВІ МЕЛЕЙНОВАНИХ ФЕНОЛІВ ДЛЯ ЗАХИСНИХ КОМПОЗИЦІЙ	
<i>Зубенко А. Е., Варлан К. Є., Северенчук І. М.</i>	305
ПОЛІМЕРНІ МАТЕРІАЛИ НА ОСНОВІ МАЛЕЙНОВОГО АНГІДРИДУ І ПОХІДНИХ КИСЛОТ РОСЛИННОГО ПОХОДЖЕННЯ	
<i>Зубенко А. Е., Варлан К. Є., Северенчук І. М.</i>	306
ДОСЛІДЖЕННЯ БАНДАЖНИХ ПОЛІМЕРНИХ КОМПАУНДІВ ВІДПОВІДНО ДО УМОВ МОНТАЖНИХ РОБІТ	
<i>Карандашов О. Г., Дегтярь В. В., Авраменко В. Л., Підгорна Л. П.</i>	307
СТВОРЕННЯ СИСТЕМИ ТВЕРДНЕННЯ З СУМІШІ ТВЕРДНИКІВ З ЗАДАНОЮ ЖИТТЄЗДАТНІСТЮ ТА ЧАСОМ ТВЕРДНЕННЯ ПОЛІЕФІРНИХ КОМПАУНДІВ	
<i>Карандашов О. Г., Василенко О. М., Авраменко В. Л., Підгорна Л. П.</i>	308
ХІМІЧНА СТІЙКІСТЬ ПОЛІЕСТЕР-ПОЛІВІНІЛХЛОРИДНИХ МАТЕРІАЛІВ	
<i>Катрук Д. С., Гуменецький Т. В., Левицький В. Є.</i>	309
МОДИФІКУВАННЯ ПОЛІЕТЕРСУЛЬФОНОВИХ МЕМБРАН ПОЛІЕЛЕКТРОЛІТНИМИ КОМПЛЕКСАМИ, ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНИМИ НАНОЧАСТИНКАМИ SnO ₂	
<i>Колесник І. С., Джоджик О. Я., Коновалова В. В., Бурбан А. Ф.</i>	310
ДОСЛІДЖЕННЯ НАЯВНОСТІ МОЖЛИВИХ РЕАКЦІЙ В СИСТЕМІ ФУРФУРИЛГЛІЦИДНИЙ ЕТЕР – 5,5-ДИМЕТИЛГІДАНТОІН	
<i>Коломіна М. С., Корягін А. Г.</i>	311
ПОЛІМЕР/ПОЛІМЕРНІ КОМПОЗИТИ НА ОСНОВІ МЕТИЛГІДРОКСІЕТИЛЦЕЛЮЛОЗИ ТА ПОЛІАНІЛІНУ	
<i>Лаврись А. З., Верещагін О. М., Яцишин М. М., Решетняк О. В.</i>	312
ДОСЛІДЖЕННЯ КИСЛОТНО-ОСНОВНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ДЛЯ ПОЛІМЕРНИХ КОМПОЗИТІВ	

<i>Лебедев В. В., Карев А. І., Данченко Ю. М., Яворська Д. Г.</i>	313
ПЕРСПЕКТИВИ ВИКОРИСТАННЯ ІНТЕРМЕТАЛІДІВ І КОМПОЗИТІВ У АВІА- ТА РАКЕТОБУДУВАННІ	
<i>Левківський І. С.</i>	314
ТЕРМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ЕПОКСИДНО-ПОЛІСИЛОКСАНОВИХ НАНОКОМПОЗИТІВ КАТІОННОЇ ПОЛІМЕРИЗАЦІЇ	
<i>Леонова Н. Г., Жильцова С. В.</i>	315
ПЕРКОЛЯЦІЙНА ПОВЕДІНКА ЕЛЕКТРОПРОВІДНОСТІ В НАНОКОМПОЗИТАХ НА ОСНОВІ ОЛІГОЕТЕРІВ ТА ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБОК	
<i>Лисенков Е. А., Клепко В. В.</i>	316
ВПЛИВ НАПОВНЮВАЧА НА ФУНКЦІОНАЛЬНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ КОМПОЗИТНИХ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ ВТОРИННОГО ПОЛІЕТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТУ	
<i>Лінчаковський С. М., Лісовий Р. А., Лисенков Е. А.</i>	317
СИНТЕЗ ПОЛІУРЕТАНІВ З ВИКОРИСТАННЯМ ТРИЗОЦІАНАТІВ. ФІЗИКО-МЕХАНІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ОТРИМАНИХ МАТЕРІАЛІВ	
<i>Лукашевич С. А., Рожнова Р. А., Галатенко Н. А., Козлова Г. А.</i>	318
ВПЛИВ ВМІСТУ ГЛАУКОНІТУ НА ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КОМПОЗИТІВ ПАн/Гл, СИНТЕЗОВАНИХ У РОЗЧИНАХ РІЗНИХ КИСЛОТ	
<i>Макогон В. М., Нестерівська С. П., Яцишин М. М., Решетняк О. В.</i>	319
ВПЛИВ МЕТАЛОВМІСНОГО ПОЛІМЕР-СИЛІКАТНОГО НАПОВНЮВАЧА НА РЕОЛОГІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ПОЛІКАПРОАМІДУ	
<i>Масюк А. С., Вашук К. І., Левицький В. Є.</i>	320
CHARACTERISTICS OF COMPOSITES BASED ON ALIPHATIC AND AROMATIC OLIGOMERS AND LITHIUM SALT	
<i>Matkovska L. K., Iurzhenko M. V.</i>	321
РЕГУЛЮВАННЯ ТЕМПЕРАТУРИ ПРОЯВУ ЕФЕКТУ ПАМ'ЯТІ ФОРМИ ЕПОКСИУРЕТАНОВИХ ПОЛІМЕРНИХ СИСТЕМ	
<i>Матковська О. К., Мамуня Є. П.</i>	322
СТРУКТУРА ПОЛІМЕРНОГО КОМПОЗИТУ НА ОСНОВІ АМОРФНОГО ТА НАПІВКРИСТАЛІЧНОГО ПОЛІМЕРІВ І СОЛІ ЛІТІУ	
<i>Матковська Л. К., Юрженко М. В., Штомпель В. І.</i>	323
ПРЕПАРАТИ ЕСЕНЦІАЛЬНИХ МІКРОЕЛЕМЕНТІВ НА ОСНОВІ N-ПОЛЮКСИЕТИЛЬОВАНИХ ПОХІДНИХ ГЛУТАМІНОВОЇ КИСЛОТИ	
<i>Олекса В. В., Нагорняк М. І., Васишин Т. М., Стасюк А. В., Чех Б. О., Носова Н. Г.</i>	324
ОСОБЛИВОСТІ ФОРМУВАННЯ ПОВЕРХНІ МЕТАЛОНАПОВНЕНИХ ГІДРОГЕЛЕВИХ ПЛІВОК, ОДЕРЖАНИХ ВІДЦЕНТРОВИМ ФОРМУВАННЯМ	
<i>Похмурська А. В., Бедльовська Х. М., Гриценко О. М., Баран Н. М.</i>	325
ВПЛИВ ЕЛЕКТРИЧНОГО ПОЛЯ НА СОРБЦІЮ ФЕНОЛФТАЛЕЇНУ МАГНІТОКЕРОВАНИМИ β -ЦИКЛОДЕКСТРИНВМІСНИМИ ПОЛІМЕРАМИ	
<i>Радченко О. А., Сінельников С. І., Рябов С. В., Демченко В. Л.</i>	326
АНАЛИЗ МЕТОДОВ И НАПРАВЛЕНИЙ МОДИФИКАЦИИ ОТХОДОВ ОБУВНЫХ ПОЛИУРЕТАНОВ	
<i>Радюк А. Н.</i>	327
ЗАХИСНІ МАТЕРІАЛИ ДЛЯ РЕМОНТНИХ РОБІТ ГАЗОПРОМИСЛОВОГО ОБЛАДНАННЯ	
<i>Рассоха О. М., Черкашина Г. М., Тараненко І. А.</i>	328
ФУРАНО-ЕПОКСИДНІ АНТИКОРОЗІЙНІ ПОКРИТТЯ ГРАДІЄНТНОЇ СТРУКТУРИ НА ПОВЕРХНІ БУДІВЕЛЬНИХ ЗАЛІЗОБЕТОННИХ ВИРОБІВ	
<i>Рассоха О. М., Черкашина Г. М., Корнева І. С.</i>	329
ДОСЛІДЖЕННЯ БІОДЕГРАДАЦІЇ ПОЛІМЕРНИХ МАТЕРІАЛІВ З ТІАМУЛІН ФУМАРАТОМ НА ОСНОВІ ПОЛІУРЕТАНСЕЧОВИНИ З ФРАГМЕНТАМИ КОПОЛІМЕРУ N-ВІНІЛПРОЛІДОНУ З ВІНІЛАЦЕТАТОМ ТА ВІНІЛОВИМ СПИРТОМ У ЇХ СТРУКТУРІ	
<i>Руденчик Т. В., Рожнова Р. А., Галатенко Н. А.</i>	330
SOL-GEL SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF PROTON CONDUCTIVE MEMBRANES	
<i>Rymsha Kh. V., Zhyhailo M. M., Demchyna O. I., Yevchuk I. Yu.</i>	331
NANOPOROSITY FORMATION OF BROWN COAL ADSORBENTS DURING HEAT-SHOCK ALKALI ACTIVATION	
<i>Saberova V. O., Tamarkina Ju. V.</i>	333
ВЛАСТИВОСТІ ГІДРОФІЛЬНИХ ПОЛІУРЕТАНСЕЧОВИН З ЛІЗОЦИМОМ, ЯКІ МІСТЯТЬ У СТРУКТУРІ ФРАГМЕНТИ КОПОЛІМЕРУ N-ВІНІЛПРОЛІДОНУ ВІНІЛАЦЕТАТУ З ВІНІЛОВИМ СПИРТОМ	
<i>Сташенко К. В., Руденчик Т. В., Рожнова Р. А., Кісельова Т. О.</i>	334
СЕНСОРНІ ВЛАСТИВОСТІ ПЛІВОК ПОЛІАНІЛІНУ НА ПОЛІЕТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТНІЙ ПІДКЛАДЦІ	

<i>Стеців Ю. А., Стасевич С. М., Яцишин М. М., Решетняк О. В.</i>	335
ОСОБЛИВОСТІ КОПОЛІКОНДЕНСАЦІЇ ФЛЮОРЕСЦЕЇНУ В УМОВАХ РЕАКЦІЇ СТЕГЛІХА	
<i>Ференс М. В., Варваренко С. М., Фігурка Н. В., Майкович О. В.</i>	336
МЕТАЛЛ-ПОЛИМЕРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ НА ОСНОВЕ СОПОЛИМЕРОВ ПОЛЭТИЛЕНПРОПИЛЕНГЛИКОЛЬМАЛЕИНАТОВ С АКРИЛОВОЙ КИСЛОТОЙ	
<i>Хамитова Т. О., Буркеев М. Ж., Тажбаев Е. М., Жапарова Л. Ж.</i>	337
DESCRIPTION OF THE KINETICS OF RELEASE OF AMIKACIN FROM THE POLYMER MATRIX	
<i>Shurshina A. S.</i>	338
СТРУКТУРА КОМПОЗИТІВ ПОЛІАНІЛІН/КАОЛІНІТ	
<i>Ціко У. В., Сидорко М. С., Яцишин М. М.</i>	339
ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ КЛІМАТИЧНИХ ФАКТОРІВ НА ВЛАСТИВОСТІ КОМПОЗИЦІЙ З ВТОРИННИХ ПОЛІОЛЕФІНІВ	
<i>Черкашина Г. М., Рассоха О. М.</i>	340
STUDYING OF INFLUENCE OF SOME ANTIBIOTICS OF A CEPHALOSPORIN SERIES ON THE PROCESS OF ENZYME HYDROLYSIS OF CHITOZAN IN THE SOLUTION OF ACETIC ACID	
<i>Chernova V. V.</i>	341
ВИВЧЕННЯ ВПЛИВУ КОМПЛЕКСНОГО СТАБІЛІЗАТОРА ІРГАНОКС-МЕЛАМІН НА ТЕРМІЧНУ ДЕГРАДАЦІЮ ПЕКОПОЛІМЕРНОЇ МАТРИЦІ	
<i>Явір К. Б., Крутько І. Г., Каулін В. Ю.</i>	342
AUTHOR INDEX / АВТОРСЬКИЙ ПОКАЖЧИК	343
CONTENTS / ЗМІСТ	351
CONFERENCE SUPPORT	367



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!



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 отримуєте якість, справедливі 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

UKRAINIAN AEROSOLS

«Украинские аэрозоли» - крупнейшая вертикально интегрированная производственная компания на аэрозольном рынке Украины. Спектр наших возможностей простирается от разработки рецептур до производства комплектующих и создания готового продукта.

Синергия производственного потенциала, передовых технологий, профессионального менеджмента, взвешенной стратегической политики позволяют нам достигать лидирующих позиций в аэрозольной отрасли Украины.

Мы создаем идеи новых продуктов и брендов, аккумулируя передовые мировые технологии, развивая собственные знания и опыт.

Мы ищем лучших партнеров по всему миру, способных обеспечить максимально качественное воплощение задуманного.



Ukrainian Aerosols LLC is the main manufacturer of aerosols in Ukraine. The enterprise develops formulations, produces packaging and fills aerosols.

Synergy of production capacity, top-notch technologies, professional management and considered strategy make it possible to keep leading positions in Ukrainian aerosol market.

We generate new product and brand ideas by accumulation of cutting-edge technologies and development of own experiences.

We are actively looking for best partners from around the world and hope for a fruitful cooperation enabling our plans to come true.



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.

УКРАЇНСЬКИЙ ВИРОБНИК АЛМАЗНОГО ІНСТРУМЕНТУ з 1999 року

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: stasiukvv@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 роботі 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).

FOR NOTES

Наукове видання

**I Міжнародна (XI Українська) наукова конференція
студентів, аспірантів і молодих учених**

**ХІМІЧНІ
ПРОБЛЕМИ
СЬОГОДЕННЯ
(ХПС-2018)**

**ЗБІРНИК ТЕЗ ДОПОВІДЕЙ
(українською, російською та англійською мовами)**

Відповідальний редактор О. М. Шендрик

Комп'ютерна верстка С. В. Жильцова

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.

Підписано до друку 02.03.2018 р.
Формат 60×84/16. Папір офсетний.
Друк – цифровий. Умовн. друк. арк. 21,86
Тираж 180 прим. Зам. № 1868

Видавець ТОВ «Нілан-ЛТД»
Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи до
Державного реєстру видавців, виготовлювачів і розповсюджувачів
видавничої продукції серія ДК № 4299 від 11.04.2012 р.
21027, а/с 8825, м. Вінниця, вул. 600-річчя, 21.
Тел.: (0432) 69-67-69, 603-000.