

XIV всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпропетровськ, 24-26 травня 2016 р.

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДНІПРОПЕТРОВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ОЛЕСЯ ГОНЧАРА**

**Інститут органічної хімії
НАН України**

XIV ВСЕУКРАЇНСЬКА КОНФЕРЕНЦІЯ
молодих вчених та студентів
з актуальних питань сучасної хімії



МАТЕРІАЛИ КОНФЕРЕНЦІЇ

Дніпропетровськ
24-26 травня 2016 р.

XIV всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпропетровськ, 24-26 травня 2016 р.

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДНІПРОПЕТРОВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ОЛЕСЯ ГОНЧАРА**

**Інститут органічної хімії
НАН України**



XIV ВСЕУКРАЇНСЬКА КОНФЕРЕНЦІЯ
молодих вчених та студентів
з актуальних питань сучасної хімії

Дніпропетровськ
24-26 травня 2016 р.

XIV всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпропетровськ, 24-26 травня 2016 р.

ПРОГРАМНИЙ ОРГАНІЗАЦІЙНИЙ КОМІТЕТ

Голова – *Варгалюк Віктор Федорович*, декан хімічного факультету ДНУ, д.х.н., професор, заслужений діяч науки і техніки України.

Відповідальний секретар – *Маторіна Катерина Вячеславівна*, к.х.н., доцент кафедри аналітичної хімії.

Шермолівч Юрій Григорович заступник директора ІОХ НАН України, д.х.н., професор.

Вишнікін Андрій Борисович, зав. каф. аналітичної хімії ДНУ, д.х.н., професор.

Оковитий Сергій Іванович, зав. каф. органічної хімії ДНУ, д.х.н., професор.

Варлан Константин Єлисейович, зав. каф. високомолекулярних сполук ДНУ, к.х.н., доцент.

Колісниченко Тетяна Олександрівна, зав. каф. харчових технологій ДНУ, к.т.н., доцент.

Деркач Тетяна Михайлівна, зав. каф. фізичної та неорганічної хімії ДНУ, д.п.н., доцент.

Петко Кирило Ігорович, с.н.с. ІОХ НАН України, к.х.н.

Матюшок Віктор Іванович, директор Науково-сервісної фірми «ОТАВА» (м. Київ).

Коробов Віктор Іванович, доц. каф. фізичної та неорганічної хімії ДНУ, к.х.н., доцент

Аніщенко Андрій Олександрович, доцент каф. органічної хімії ДНУ, к.х.н., доцент.

Крамська Ольга Сергіївна, доцент каф. фізичної та неорганічної хімії ДНУ, к.х.н.

Пальчиков Віталій Олександрович, с.н.с. каф. органічної хімії ДНУ, к.х.н.

Борщевич Лариса Вікторівна, доцент каф. фізичної та неорганічної хімії ДНУ, к.х.н., доцент.

Висловлюємо щирю подяку спонсору конференції – науково-сервісній фірмі «ОТАВА»

АДРЕСА ОРГКОМІТЕТУ:

Хімічний факультет (16 корпус),

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара

вул. Козакова, 22

Дніпропетровськ, 49010, Україна

E-mail: matorinae@pochta.ru, albina.klimkina@ya.ru

XIV всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпропетровськ, 24-26 травня 2016 р.

УДК 54(063)

ББК 24я431

Т 67

ISBN

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара
Інститут органічної хімії НАН України

Голова оргкомітету

Варгалюк Віктор Федорович, декан хімічного факультету ДНУ імені Олеся Гончара, д.х.н., професор, заслужений діяч науки і техніки України

Т67 «XIV Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії» Дніпропетровськ: ,2016, - 93 с.

ISBN

УДК 54(063)

ББК 24я431

Т 67

СЕКЦІЯ АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ

Керівник: Вишнікін Андрій Борисович, зав. каф. аналітичної хімії ДНУ,
д.х.н., професор

Секретар: Сидорова Лариса Петрівна, доц. каф. аналітичної хімії ДНУ,
к.х.н., доц.

ПОЛІМЕРНІ МЕМБРАНИ, ЧУТЛИВІ ДО ВМІСТУ ІОНІВ ЦИНКУ

Гордон А. В., Маторіна К. В.

Дніпропетровський національний університет ім. О. Гончара

В останні роки сполуки Zn (глюконат, аспарагінат) стали широко застосовувати в дерматології, ендокринології, при лікуванні імуннодефіцитних станів. Оптимальна інтенсивність надходження Zn в організм 10-15 мг / день. Поріг токсичності становить 600 мг / день. Особливо багато цинку міститься в яловичині, печінці, морських продуктах, пшеничних зародках, рисових висівках, вівсяній муці, моркві, цибулі. Цинк відіграє важливу роль в процесах регенерації шкіри, росту волосся і кісток, секреції сальних залоз. Важливу роль він відіграє в переробці організмом алкоголю. Цинк необхідний для підтримки шкіри в нормальному стані, а також при загоєнні ран, оскільки він грає важливу роль в синтезі білків. Цинк зміцнює імунну систему організму та сприяє видаленню з організму двоокису вуглецю.

Синтезовані пластифіковані дибутилфталатом полівінілхлоридні мембрани. Для їх приготування використовували матрицю – полівінілхлорид, розчинник – циклогексанон, пластифікатор – дибутилфталат та електродно-активні речовини (ЕАР) на основі барвника еріохрому чорного Т (ЕХЧТ), полівінілпіролідону та іонів Zn (II). Полімерні мембрани використані у якості чутливих елементів йон-селективних електродів для визначення вмісту Zn (II) у водних розчинах.

У якості оптимального внутрішнього розчину для електродів обрано розчин Zn (II) з $C = 5 \cdot 10^{-4}$ моль/л.

Таблиця 1

Хіміко - аналітичні характеристики виготовленого електроду, оборотного до іонів Zn (II)

ЕАР	Співвідношення ПВПД:Zn:ЕХЧТ	pH	pC	S, мВ/pC	Час відгуку, хв	C _{min} , М
ЕХЧТ – ПВПД – Zn (II)	1:6:6	8,5	3,3 – 5,3	35	3	$7 \cdot 10^{-6}$

Отримані результати дослідження можуть бути використані для виявлення Zn(II) у водних розчинах.

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ФУЛЬВОКИСЛОТ В ҐРУНТАХ

Кравцева А.П.*

*Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,
49010, г. Дніпропетровськ, пр-т Гагаріна, 72*

e-mail: kravtseva.nastia@ya.ru

Останнім часом актуальності набувають проблеми антропогенного впливу пов'язані з порушенням ґрунтового покриву і його складових компонентів, зокрема органічної речовини. Однією з найважливіших характеристик органічної речовини ґрунту є стійкі фракції гумінових речовин. З огляду на виняткову складність молекулярної структури гумінових сполук, їх визначення засноване на методах фракціонування. Гумінові кислоти, які осаджують в кислому середовищі, включають хімічно зрілі форми, тоді як розчинні фульвокислоти (ФК) об'єднують слабогуміфіковані компоненти.

Метою роботи було визначення вмісту фульвокислот в різних зразках ґрунту. Аналізували ґрунт, який не було використано в аграрних цілях, а також зразки, на яких протягом останнього року вирощували різні культури: пшеницю, кукурудзу, сою, соняшник.

Для фракціонування ФК використовували метод Форсита. Він заснований на пропусканні кислого фільтрату, після осадження гумінових кислот, через активоване вугілля. Для десорбції ФК з активованого вугілля послідовно використовували хлоридну кислоту, диметилкетон, воду і натрій гідроксид. З отриманих ФК з ґрунту готували розчин з концентрацією фульвокислот 1,9 г/л. Для визначення оптимальних умов визначення ФК на спектрофотометрі СФ-46 отримано спектр поглинання в ультрафіолетовій області від 194 до 240 нм. Показано, що робочою довжиною хвилі для спектрофотометричного аналізу ФК є 198 нм.

Методом градуального графіка визначено ФК в представлених зразках ґрунтів (рис. 1).



Рис. 1 – Вміст фульвокислот в аналізованих пробах ґрунту

Встановлено, що в ґрунті, який не використовували протягом року, найвищий вміст фульвокислот, а вирощування культур кукурудзи та пшениці призводить до значного зменшення вмісту ФК.

*Наукові керівники: к.х.н., доц.. Смітюк Н.М., к.х.н., доц. Саєвич О.В.

**АТОМНО-АБСОРБЦІЙНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ВАЖКИХ МЕТАЛІВ У
ГРУНТАХ ТА РОСЛИННИХ ЗРАЗКАХ З ВИКОРИСТАННЯМ
УЛЬТРАЗВУКУ НА СТАДІЇ ПРОБОПІДГОТОВКИ**

Мельник Л.О. *

*Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,
49010, г. Дніпропетровськ, пр-т Гагаріна, 72
e-mail: lesya93@bk.ru*

Посилення техногенного тиску на екосистеми призводить до погіршення екологічної ситуації не лише на територіях, що є центрами розвитку промисловості, чи у межах урбоекосистем, а й у аграрних регіонах з низьким ступенем концентрації промислового виробництва. Серед численних антропогенних забруднювачів довкілля пріоритетне значення мають важкі метали та їх сполуки, які характеризуються значною стійкістю, високою токсичністю, вираженими кумулятивними властивостями та негативно впливають на здоров'я населення. Зокрема, досить значного антропогенного впливу зазнають ґрунтовий покрив і рослини, які на ньому ростуть. Рослини мають здатність акумулювати в собі техногенні елементи. Визначення вмісту цих елементів у рослинах важливо як для оцінки стану самої рослини, так і для біосфери в цілому в плані розуміння процесів кругообігу речовин, а також для наукової і практичної роботи з екологічного моніторингу. Для атомно-абсорбційного визначення техногенних елементів зазвичай використовують довготривалу, трудомістку агрохімічну методику мінералізації рослинних зразків з використанням сильно агресивних окислювальних сумішей. В зв'язку з цим є актуальним розробка прискорених методик їх пробопідготовки з використанням ультразвуку.

В результаті проведення експерименту отримані данні вмісту важких металів (Ni, Cu, Pb, Cd, Zn) в зразках кукурудзи, сої, пшениці, соняшника та зразках ґрунту на якому вони росли. Повну мінералізацію досліджуваних зразків зернових культур проводили в концентрованій нітратній кислоті. Для ґрунту в якості розчинника використовували царську водку. Інша серія зразків рослин та ґрунту підлягали ультразвуковій обробці з наступним кип'ятінням в мінералізуючих розчинах. Для визначення іонів Ni, Cu, Pb, Cd, Zn в досліджуваних розчинах використовували атомно-абсорбційний спектрофотометр С-115 ПКС з полум'яним варіантом атомізації в суміші ацетилен-повітря.

В таблиці 1 наведені результати атомно-абсорбційного визначення валового вмісту важких металів та показано, що кількість важких металів в ґрунті після вирощування сої значно зменшується. Встановлено, що вміст купруму та кадмію у деяких випадках перевищує гранично допустимі концентрації.

Під дією ультразвуку проба ґрунту майже повністю розкладається та спостерігається максимальний ступінь вилучення мікроелементів, а саме збільшується в 1,5 рази для Ni, Cu та Zn, в 2 рази для Cd та Pb.

Встановлено, що ступінь вилучення купруму, плумбуму, кадмію та цинку в ґрунті після дії ультразвуку збільшується. Це показало, що в досліджуваних зразках кількість деяких ВМ перевищує гранично допустимі концентрації.

Таблиця 1 – Результати атомно-абсорбційного визначення валового вмісту важких металів (мг/гк) в чорноземі

Ґрунт після вирощування	Кислотна мінералізація					Кислотна мінералізація з дією УЗ (f=22 кГц, I=3,88 Вт/см ² , t=10 хв)				
	Ni	Cu	Pb	Cd	Zn	Ni	Cu	Pb	Cd	Zn
Кукурудза	26,6	23,7	6,21	0,91	40,8	36,8	32,0	11,2	1,62	61,2
Соя	9,81	8,52	3,83	0,51	28,3	15,5	16,9	7,82	1,01	42,5
Соняшник	20,5	15,7	5,04	0,74	55,8	30,9	24,6	9,52	1,62	83,7
Пшениця	21,3	20,2	7,44	0,92	44,3	33,4	28,2	14,1	1,71	66,5
Нічого не вирощували	10,5	14,1	5,01	0,61	36,0	21,5	21,4	9,0	1,10	54,1
ГДК	40,0	20,0	10,0	0,50	50,0					

Показано, що в відібраних зразках рослин вміст таких металів як Ni, Zn, Cu значно перевищує ГДК для рослинних зразків (табл.2). Потрапляння цих металів до рослини можливо як з ґрунту, так із повітря

Таблиця 2 – Результати атомно-абсорбційного визначення важких металів (мг/кг) в мінералізатах різних рослинних зразків

Зразки рослин	Кислотна мінералізація					Кислотна мінералізація з дією УЗ (f=22 кГц, I=3,88 Вт/см ² , t=10 хв)				
	Ni	Cu	Pb	Cd	Zn	Ni	Cu	Pb	Cd	Zn
Кукурудза	5,71	1,22	1,10	0,12	12,1	8,91	1,91	1,29	0,20	14,5
Соя	5,41	3,23	1,80	0,22	17,4	9,01	5,1	2,05	0,51	19,8
Соняшник	4,90	2,20	1,12	0,14	15,2	7,42	3,52	1,30	0,30	18,1
Пшениця	4,01	3,42	1,11	0,14	9,24	7,02	5,1	1,28	0,36	11,2
ГДК	2,11	0,79	2,16	0,46	2,11					

Під впливом ультразвуку відбувається більш повне розкладання рослинних зразків, оскільки при цьому ступінь вилучення йонів металів збільшується в 1,2 рази для Pb та Zn, в 1,6 рази для Ni, Cu та в 2 рази для Cd, час стадії пробопідготовки зменшується в 1,5 рази.

*Науковий керівник Смітюк Н.М.

ОСОБЕННОСТИ СОРБЦИИ И ДЕСОРБЦИИ ИОНОВ НИКЕЛЯ ЧОРНОЗЕМОМ ОБЫКНОВЕННЫМ

Жабина О.Н.

*Днепропетровский национальный университет имени Олеся Гончара,
49010, г. Днепропетровск, пр-т Гагарина, 72*

e-mail: olunya7337@yandex.ru

Растения могут поглощать из почвы микроэлементы, в том числе тяжелые металлы, аккумулируя их в тканях или на поверхности листьев, являясь, таким образом, промежуточным звеном в цепи "почва - растение - животное - человек". Никель поступает в атмосферу от предприятий цветной металлургии, на долю которых приходится 97% всех выбросов никеля. Соединения никеля играют важную роль в кроветворных процессах, являясь катализаторами. Повышенное его содержание оказывает специфическое действие на сердечно-сосудистую систему. Считается, что свободные ионы никеля (Ni^{2+}) примерно в 2 раза более токсичны, чем его комплексные соединения. Поэтому целесообразно определить условия, влияющие на подвижность ионов никеля в почве.

Изучены оптимальные условия сорбции ионов никеля из слабокислой, слабощелочной и нейтральной сред. Зависимости массы сорбированных ионов никеля от времени контакта фаз показали, что равновесие устанавливается в течение 60 мин для всех сред и оптимальная масса навески почвы 3 г.

Изучение изотерм сорбции Ni^{2+} показало, что максимальная сорбция наблюдается в слабокислой среде, где ионы никеля наиболее подвижны, а минимальная – в слабощелочной, где никель преимущественно связывается аммиачным комплексом, используемым для создания среды почвы, и гуминовыми веществами, содержащимися в почве. Изотермы сорбции можно описать уравнением Френдлиха.

Изучены процессы десорбции ионов никеля из почвы. В качестве экстрагентов использовали ацетатный, аммиачный буферы и 1 М раствор хлоридной кислоты. При извлечении ионов никеля установлено, что в слабокислой среде суммарная степень извлечения наибольшая, а наименьшая – в слабощелочной. Показано, что наиболее эффективным экстрагентом является раствор хлоридной кислоты, а наименее – ацетатный буфер. Максимальное извлечение ионов никеля раствором хлоридной кислоты связано с тем, что этот экстрагент обладает более высокой мобилизирующей способностью в отношении запасов тяжелых металлов. Но при её использовании создаются агрессивные условия для почвы, которые негативным образом влияют на её свойства. Использование аммиачного комплекса в качестве экстрагента более эффективно, чем ацетатного, так как он способствует большему извлечению ионов никеля из почвы.

**УЛЬТРАЗВУКОВЕ ПРИСКОРЕННЯ СТАДІЇ ПРОБОПІДГОТОВКИ
ГРУНТІВ ДЛЯ АТОМНО-АБСОРБЦІЙНОГО ВИЗНАЧЕННЯ
ДЕЯКИХ МЕТАЛІВ**

Дробот В. Є., Кулішова Ю. О. *

*Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,
49010, г. Дніпропетровськ, пр-т Гагаріна, 72
e-mail: uakulis@mail.ru*

При аналізі ґрунтів на вміст різних форм важких металів стадія пробопідготовки є найбільш тривалою. Прискорити її можна при використанні різних фізичних полів, зокрема, ультразвуку. Метали можуть адсорбуватися на поверхні ґрунтових колоїдних частинок шляхом неспецифічного зв'язування завдяки електростатичним силам, або внаслідок утворення між ними специфічних хімічних зв'язків. Тому додатковий вплив ультразвукового поля під час мокрої мінералізації ґрунтів призводить до підвищення ступеня їх розкладання.

Досить небезпечним є забруднення ґрунту важкими металами такими, як кадмій, свинець, хром, мідь, цинк та інші. Накопичення їх у ґрунті призводить до зниження рН, руйнування ґрунтово-поглинального комплексу, як наслідок відбувається зменшення врожаю та підвищення вмісту важких металів в сільськогосподарській продукції. Ці метали є токсичними і перешкоджають активності мікрофлори ґрунту. Концентрація важких металів у ґрунті може зберігатися впродовж десятиліть і навіть століть.

Визначення валового вмісту та кількості рухливих форм Ni, Fe, Pb, Cd, Mn, Cu, Cr проводили в зразки ґрунтів з полів, на яких вирощувались пшениця, соя, кукурудза, соняшник. В якості контрольного зразка виступав ґрунт, на якому нічого не вирощували протягом року. Вилучення рухомих форм важких металів проводили реагентами, що мають різну розчинну здатність (дистильована вода, амонійний буфер, ацетатний буфер та 1 М хлоридна кислота). Валове розкладання зразків здійснювали методом мокрої мінералізації в царській водці. Ультразвукове розкладання проводили за допомогою ультразвукового диспергатора УЗДН-1 при частоті 22 кГц, інтенсивності 3,28 Вт/см² та протягом 10 хв. В отриманих розчинах визначали вміст іонів металів методом атомної абсорбції в полум'ї ацетилен-повітря

Встановлено, використання ультразвуку на стадії пробопідготовки ґрунтів при визначенні рухливих форм важких металів дозволяє скоротити затрати часу у 6 разів та підвищує ступінь вилучення деяких металів в 1,3-1,5 разів. Максимальна кількість рухливих форм іонів металів спостерігається у витяжках зі зразків ґрунту, на якому росла соя, а мінімальна – у ґрунтових витяжках з полів, на яких росла кукурудза.

ВПЛИВ КАТІОННОГО ФЛОКУЛЯНТА PURO FLOCK 920 ТА ПОЛІСАХАРИДУ ХІТОЗАНУ НА СПЕКТРАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ БРОМФЕНОЛОВОГО ЧЕРВОНОГО

Прачова М.С., Алхімова М.М.*

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара

49010 м. Дніпропетровськ, пр. Гагаріна, 72

e-mail: alkhimova2011@yandex.ru

Вивчено вплив полісахариду хітозану (ХТ) та катіонного флокулянта Puro Flock 920 (PF 920) на спектральні властивості кислотно-основного індикатора бромфенолового червоного (БФЧ). В області рН від 0,125 до 9 БФЧ існує у розчині в двох іонних формах: HR^- при $\text{pH} < 5,8$, ($\lambda = 440\text{nm}$) та R^{2-} при $\text{pH} > 8,3$, ($\lambda = 574\text{nm}$). Спектральні властивості БФЧ в присутності PF 920 та ХТ змінюються в інтервалі рН від 0,2 до 9,0, що свідчить про утворення адуктів (рис. 1).

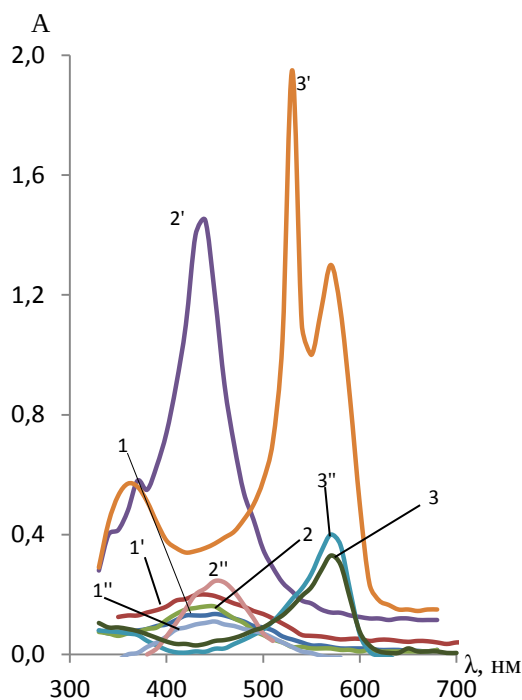


Рис. 1 - Спектри поглинання розчинів БФЧ (1-3), БФЧ+PF 920 (1'-3') та БФЧ+ХТ (1''-3'') при значеннях рН середовища: рН=0,1 (1-1''); рН=4,1 (2-2''); рН=9,1 (3-3''). $C_{\text{БФЧ}}=2 \cdot 10^{-5}$ моль/л, $C_{\text{PF920}}=4 \cdot 10^{-3}$ г/мл, $C_{\text{ХТ}}=2 \cdot 10^{-6}$ г/мл, $l=1$ см, СФ-26

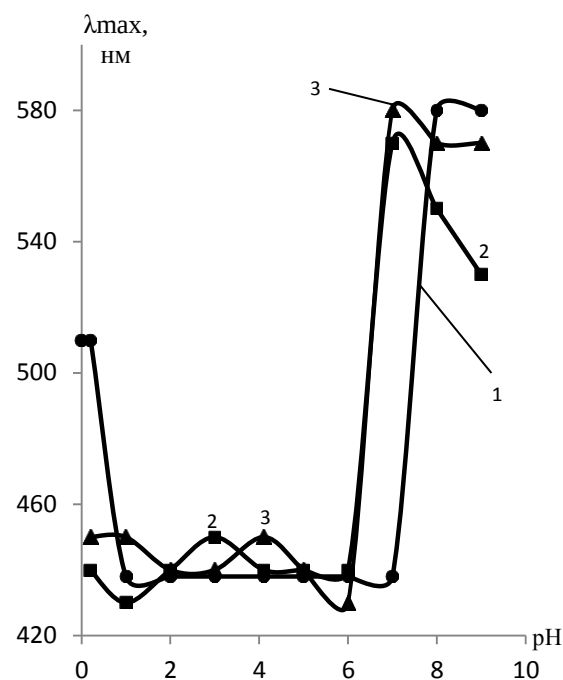


Рис. 2 - Залежність положення максимумів смуг поглинання від рН розчинів 1 - БФЧ, 2 - БФЧ+PF920 та 3 - БФЧ+ХТ. $C_{\text{БФЧ}}=2 \cdot 10^{-5}$ моль/л, $C_{\text{PF920}}=4 \cdot 10^{-3}$ г/мл, $C_{\text{ХТ}}=2 \cdot 10^{-6}$ г/мл, $l=1$ см, СФ-26

При зміні рН від 0,2 до 6,0 положення максимумів смуг поглинання (HR^-)-форми БФЧ в присутності полімерних речовин (рис. 2, кр. 2, 3) свідчить про взаємодію полімерів з таутомерними формами барвника, а максимумами смуг поглинання (R^{2-})-форми з'являються в більш кислому середовищі - $\Delta\text{pH}=1,0$ (рис. 2).

СОРБЦІЙНЕ КОНЦЕНТРУВАННЯ РУТЕНІЮ(IV) ТА КОЛЬОРОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ

Балясіна О.О.*

Дніпропетровський національний університет ім. Олеса Гончара

49010, г. Днепропетровск, пр. Гагарина, 72

e-mail: analyticdnu@mail.ru

Рутеній, його сполуки та матеріали на їх основі (сплави, каталізатори, порошки, оксидні плівки, покриття) володіють низкою цінних та специфічних властивостей. Завдяки цьому їх успішно використовують у різних галузях сучасної техніки: електроніці, радіо- та електротехніці, авіа- та ракетобудуванні. Комплекси рутенію є ефективними агентами в хіміотерапії при лікуванні онкологічних захворювань, оскільки є менш токсичними для біологічних молекул.

Визначення мікро- та субмікроеміностей йонів рутенію в технологічних розчинах представляє труднощі та потребує попереднього концентрування. Розробка методів та засобів експрес-контролю зі спрощеною процедурою аналізу є однією з найважливіх тенденцій розвитку сучасної аналітичної хімії. При цьому інтерес представляють прості, швидкі та дешеві методи отримання аналітичної інформації.

Встановлено оптимальні умови динамічного концентрування Ru(IV) пінополіуретаном (ППУ) з іммобілізованим 3-феніл-2,6-димеркапто-1,4-тіопіроном (H₂Ф) для його кольорометричного визначення у фазі ППУ: об'ємна швидкість прокачування аналіту через сорбент масою 5 мг складає 0.3 мл/хв; максимальна концентрація Ru(IV) у досліджуваному хлориднокислому (2 М HCl + 4 М NaCl) або сульфатнокислому (1 М H₂SO₄) розчині не перевищує 2.5 мкг/мл в 5 мл проби. Сорбційна ємність модифікованого ППУ за рутенієм $\alpha_{\text{ппу-H}_2\text{Ф}}^{\text{Ru(IV)}} = 25$ мкмоль/г. З урахуванням величини $\alpha_{\text{ппу}}^{\text{H}_2\text{Ф}} = 28$ мкмоль/г, встановлено, що 1 г сорбента при стехіометрії Ru : H₂Ф = 1 : 1 вилучає 2.53 мг рутенію.

Для підвищення чутливості визначення Ru(IV) доцільно використовувати кольорометричні характеристики сорбату на поверхні носія, наприклад, кольорометричні функції: *R*, *G*, *B* – координати кольору в системі *RGB*. За результатами їх вимірювань побудовано градувальні графіки. Найбільш чутливою до зміни концентрації Ru(IV) виявилась *G*-координата. Результати проведеного дослідження покладено в основу експресної та чутливої сорбційно-кольорометричної методики визначення рутенію у штучних сумішах, що моделюють сплави даного металу з платиною, лантаном, церієм та скандієм, методом градувального графіку в інтервалі 0–12.5 мкг/5 мл проби. При цьому межа виявлення, розрахована за 3 σ -критерієм, складає 0.03 мкг/мл та є практично у 50 разів нижчою, у порівнянні з методикою кольорометричного визначення Ru(IV) на поверхні силікагелю, модифікованого тіосечовинними групами.

ВИКОРИСТАННЯ ГЕТЕРОПОЛІАНІОНІВСТРУКТУРИ КЕГГІНА В ІОНОМЕТРІЇ ПОЛІГІДРОКСИСПОЛУК

Біжко О.М., Луценко Н.В., Мироняк М.О.

*Український державний хіміко-технологічний університет
м. Дніпропетровськ, пр. Гагаріна, 8*

На сьогодні пряма потенціометрія з використанням іон-селективних електродів (ІСЕ) є одним з перспективних методів для експресного аналізу ганічних речовин, таких як ПАР, нітрогенвмісні лікарські препарати, ноли, поліфеноли та ін. Одними з найбільш широко вивчених є ІСЕ з мембранами, де в якості електродноактивних речовин (ЕАР) використані графенілборатні солі поліоксиетильованих поверхнево-активних сполук катіонами металів, що селективні до іонів металів і органічних речовин.

В якості металів-комплексоутворювачів використовують барій, льцій, стронцій, плюмбум. Згідно з даними наукової літератури, йкращі електродні характеристики проявляють системи на основі мплексів барію. Молекули досліджуваних речовину водному розчині чинають реагувати з іонами барію, функціональними групами ворюючи псевдо краунструктуру, до порожнини якої катіони барію лючаються за рахунок іон-дипольної взаємодії.

В якості протиіона замість тетрафенілборату нами запропоновано користувувати гетерополіаніон 12-молібдофосфатної кислоти (МФК). В зульгаті проведених досліджень булосконструйовано ІСЕ чутливі до іоногенної ПАР (полісорбат 20) з пластифікованими лівінілхлоридними мембранами. Як показав аналіз літературних даних, у дних розчинах таніни здатні проявляти властивості поверхнево-активних човин. Отже, можливою стає розробка аналогічних іон-селективних електродів, чутливих до таніну. В якості ЕАР в розроблених ІСЕ були користані іонні асоціати МФК з катіонними комплексами полісорбату та ніну з сіллю барію.

Проведені комплексні дослідження дозволили розробити юметричні методики визначення кількісного визначення полісорбату та ніну в промисловій продукції, яківідповідають всім вимогам сучасного алізу – вони прості, селективні, доступні та чутливі.

ГАЗОХРОМАТОГРАФІЧНИЙ КОНТРОЛЬ ВМІСТУ НІКОТИНУ В ЕЛЕКТРОННИХ СИГАРЕТАХ ТА В ПРИМІЩЕННЯХ ДЛЯ КУРЦІВ

Губецька Т.С., Левчик В.М., Кобилінська Н.Г.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
01601, Київ, вул. Володимирська, 64/13

За останнє десятиліття значної популярності набув новий засіб боротьби з тютюновою залежністю - електронні сигарети, як безпечно альтернативи тютюновим сигаретам. Однак з часом ці сигарети набули масової популярності й стали повноправними господарями сигаретного ринку. На ринку України присутні як ароматизовані без нікотинових сигарети, так і їх нікотинвмісні аналоги. Насьогодні відсутні переконливі дослідження щодо методології визначення нікотину у цих видах сигарет та контролю його вмісту при курінні в місцях загального користування, а також оцінки завданої шкоди на організм людини.

Метою роботи було розробити універсальну газохроматографічну методику з попереднім твердофазним концентруванням для одночасного визначення нікотину в електронних сигаретах та в повітрі приміщень призначених для куріння цих сигарет. Провести порівняльний аналіз розподілу нікотину під час паління електронних та тютюнових сигарет.

Вміст нікотину контролювали методом газової хроматографії із полуменево-іонізаційним детектуванням. За оптимальних умов хроматографування відбувається розділення піку нікотину з піками інших супровідних речовин в сигаретному диму, що відповідає Rs критерію. При порівнянні вмісту нікотину в електронних та тютюнових сигаретах вітчизняних та іноземних виробників показано, що українська продукція відповідає європейським критеріям якості.

Для твердофазного концентрування нікотину із сигаретного диму використали мембранні фільтри на основі полівінілхлориду: АФА-ВІ ($S=10\text{ см}^2$) та фільтр «Петрякова» (НЭЛ-3). Сорбційне концентрування алкалоїду проводили в динамічному та статичному режимах. Десорбцію проводили шляхом елюювання метанолом та ізопропанолом протягом 1, 5, 24, 48, 72 та 120 годин. Встановлено, що СОЕ за нікотинном для фільтру «Петрянова» становить 2,93 мг/г, а для АФА-ВІ - 2,2 мг/г. Повноті вилучення нікотину з полімерних фільтрів досягається за 48 годин.

Розроблену методику апробовано для контролю вмісту нікотину та інших компонентів тютюнового диму в приміщенні при тривалому палінні звичайних та електронних сигарет. Крім того, оцінено здатність до поглинання тютюнового диму предметами та матеріалами, які знаходились в приміщенні для куріння сигарет. Дослідження проведено на зразках дерева, паперу, пластику та тканини. Показано, що за час викурювання однієї тютюнової сигарети нікотин найкраще поглинає бавовна.

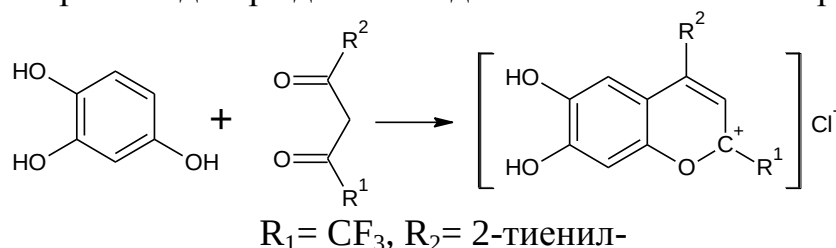
КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ Mo(VI) И ВОЛЬФРАМА(VI) С ХЛОРИДОМ 6,7-ДИГИДРОКСИ-2-ТРИФТОРОМЕТИЛ-4-(2-ТИЕНИЛ)БЕНЗОПИРИЛИЯ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ

Барбалат Д.А., Невмержицкая Е.С., Михайлова А.С.,
Снигур Д.В., Чеботарёв А.Н.

Одесский национальный университет имени И.И. Мечникова,
65082, г. Одесса, ул. Дворянская, 2
e-mail: denis270892@yandex.ua

Близость химических свойств молибдена и вольфрама является основным препятствием для их разделения и количественного определения. Возможность карбидообразования и тяжелая атомизация усложняет возможность использования атомно-абсорбционной спектроскопии для их определения. Атомно-эмиссионное с индуктивно связанной плазмой определение этих элементов представляется экономически не рентабельным. В связи с этим разработка простых, доступных и чувствительных методик спектрофотометрического и раздельного цветометрического определения молибдена и вольфрама с использованием органических реагентов остается актуальной задачей.

Нами синтезирован новый аналитический реагент хлорид 6,7-дигидрокси-2-трифторометил-4-(2-тиенил)бензопирилий (ТФТДОХ), структура которого подтверждена методами ИК- и масс-спектрометрии.



Оптимизированы условия взаимодействия молибдена(VI) и вольфрама(VI) с ТФТДОХ. Состав и устойчивость комплексов определяли классическими спектрофотометрическими методами (изомольных серий, насыщения по лиганду/металлу и сдвига равновесия). Полученные результаты обобщены в таблице.

Таблица. Химико-аналитические характеристики комплексов

Металл	pH _{опт}	M:R	β	Заряд	$\lambda_{\text{макс}}$, нм	$\varepsilon \cdot 10^{-4}$
Mo(VI)	2,0	1:2	$2,4 \cdot 10^9$	0	570	0,95
W(VI)	2,0	1:2	$1,1 \cdot 10^9$	0	570	0,90

Методом В.А. Назаренко установлен химизм взаимодействия исследуемых ионов металлов с ТФТДОХ: координирующими частицами являются катионы молибденила и вольфрамила, а лиганд вступает в реакцию в форме ангидрооснования.

СОРБЦИОННОЕ ИЗВЛЕЧЕНИЕ КОМПЛЕКСА ПЛЮМБУМ(II) С 1,5-ДИФЕНИЛКАРБАЗОНОМ АНИОНИТОМ AWA-G1

Николаенко К.В., Гузенко Е.М., Чеботарёв А.Н.

Одесский национальный университет имени И.И. Мечникова,

65082, г.Одесса, ул. Дворянская 2

e-mail: guzenkodom@yandex.ua

При мониторинге водных объектов окружающей среды актуальной проблемой является разработка простых, чувствительных и экспрессных методик анализа вод различных категорий на содержание тяжёлых металлов, проявляющих токсичное воздействие на живые организмы.

Одним из высокотоксичных поллютантов, требующих строгого контроля в природных и промышленных сточных водах является плюмбум(II), для спектрофотометрического определения которого используют различные органические реагенты (ОР). Чаще всего ОР позволяют получить окрашенные комплексные соединения (КС), химико-аналитические характеристики которых могут быть использованы для новых твёрдофазно-спектрофотометрических методик определения веществ. Рядом преимуществ из известных тест-устройств обладают индикаторные трубки (ИТ), основным конструкционным элементом которых является слой твёрдого носителя на котором в динамическом режиме сорбируется из раствора определяемый компонент. При этом, особый интерес вызывают исследования в области механизма и кинетики процессов, протекающих в такой гетерогенной системе.

В настоящей работе в качестве ОР для определения плюмбу(II) использован 1,5-дифенилкарбазон (ДФКон), который при pH 6,5 образует красно-фиолетовый комплекс – дифенилкарбазонат плюмбу(II) (ДФКон-Рb(II)). Извлечение КС проводили с использованием слабоосновного анионита Гранион AWA-G1 в статическом (СР) и динамическом (ДР) режимах при заранее оптимизированных условиях.

На выходных кривых сорбции наблюдалось формирование нескольких небольших плато, что обусловлено изменением пространственного расположения адсорбированного КС относительно поверхности носителя по мере насыщения поверхности сорбента. По полученным зависимостям построены изотермы сорбции, которые можно отнести к S- (СР) и H-(L-)типу (ДР), а также рассчитаны коэффициенты скорости процесса сорбции, что позволило оценить особенности формирования адсорбционных слоёв на анионите Гранион AWA-G1 в зависимости от режима концентрирования.

Полученная информация позволила предложить конструкционные параметры ИТ для извлечения плюмбу(II) в виде его комплекса с ДФКон слабоосновным анионитом Гранион AWA-G1, что может быть

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВИСМУТА(III) В ВИДЕ ИОННОГО АССОЦИАТА ТЕТРАЙОДОВИСМУТАТА С АСТРАФЛОКСИНОМ

Гурова М.Г., Климкина А.Ю., Мойсейченко С.В., Гордынская В.С.,
Вишникин А.Б.

*Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,
49010, г. Дніпропетровськ, пр-т Гагаріна, 72
e-mail:albina.klimkina@yandex.ru*

Ионные ассоциаты (ИА) основных органических красителей (ОК) широко используются для спектрофотометрического определения ряда веществ учитывая, что в этом случае достигается высокая чувствительность и избирательность. В этих методиках необходимо устранять избыток красителя экстракцией или использовать ПАВ для солюбилизации осадков ИА. Нами предложено использовать ИА ОК с анионными комплексами металлов без использования экстракции и в условиях, когда эти системы являются агрегативно устойчивыми без использования ПАВ.

При взаимодействии анионных комплексов металлов с ОК образуются осадки ИА, которые являются агрегативно устойчивыми при достаточно малых концентрациях ионов. Кроме того, образование малорастворимой фазы ИА сопровождается значительным изменением окраски раствора. Сближение катионов красителя в кристаллах осадка способствует образованию агрегатов и является причиной, по которой происходят существенные изменения в спектре красителя. В спектре поглощения появляется новая полоса, сдвинутая bathochromно на 30-50 нм относительно полосы красителя. Молярный коэффициент светопоглощения, рассчитанный для длины волны, соответствующей максимуму отклонения от аддитивности, достигает $9 \cdot 10^4$ моль⁻¹·л·см⁻¹. Такой высокий молярный коэффициент позволяет достигнуть высокой чувствительности определения висмута(III). Предел обнаружения составил $1,5 \cdot 10^{-8}$ моль/л. Градуировочный график линейен в интервале концентраций $4 \cdot 10^{-8}$ – 10^{-7} моль/л. ИА образуется мгновенно и его окраска устойчива в течение не менее чем двух часов.

Найдено, что растворы ИА АФ с $[\text{BiI}_4]^-$ устойчивы при концентрациях висмута(III) меньше 10^{-6} моль/л. Количественное образование ИА наблюдается при концентрации KI $4 \cdot 10^{-3}$ моль/л. Важны также порядок смешивания (Bi(III), HCl, H₂O, KI, АФ) и определенная кислотность раствора (0,04 М HCl). Насыщение на кривой молярных отношений наблюдается при соотношении, которое в три раза больше стехиометрического, поэтому нужно создавать небольшой избыток красителя. Оптимальная концентрация АФ составила $4 \cdot 10^{-6}$ моль/л.

**ВИЗНАЧЕННЯ ФОРМ ЙОДУ З ВИКОРИСТАННЯМ
РІДИННО-РІДИННОЇ ВОРТЕКС МІКРОЕКСТРАКЦІЇ ЗІ
СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНИМ ДЕТЕКТУВАННЯМ**

Заруба С.В.¹, Andruch V.², Вишнікін А.Б.¹.

¹*Дніпропетровський національний університет ім. Олеся Гончара
49000, Україна, м. Дніпропетровськ, пр. Гагаріна 72*

²*P.J. Šafárik University, 04001, Slovak Republic, Košice, Moyzesova 11
e-mail:zaruba.sv@gmail.com*

Запропоновано нову та чутливу методику мікроекстракційного визначення йодиду (I^-), молекулярного йоду (I_2), йодату (IO_3^-) та сумарного йоду (TI). Використано метод рідинно-рідинної вортекс мікроекстракції (РРВМЕ), в якому для збільшення швидкості міжфазного обміну використовується вортекс – компактний персональний міксер. За рахунок енергійного струшування екстракційної суміші, утворюються дрібні краплі органічного розчинника у водній фазі, що призводить до суттєвого збільшення поверхні контакту фаз та швидкого встановлення екстракційної рівноваги.

Визначення сумарного йоду базується на окисненні неорганічних форм йоду до йодату за допомогою N-бромосукциніміда (NBS) в середовищі хлоридної кислоти, видаленні надлишку окисника з використанням щавлевої кислоти, утворенні іонного асоціату ТВА- I_3 при реакції IO_3^- з надлишком тетрабутиламоній йодиду (ТВА- I). Далі ТВА- I_3 екстрагують 150 мкл амілацетату протягом 30 с при інтенсивному перемішуванні у вортексі. Вимірювання поглинання екстракту проводять при 295 нм у кварцевій мікрокюветі з товщиною поглинаючого шару 1 см. Йодат визначають в таких же умовах, як і сумарний йод, але без стадії окиснення NBS. Молекулярний йод екстрагують при рН 6,4 в надлишку ТВА- I . Кількість йодиду може бути розрахованою за різницею сумарного йоду і йодата та молекулярного йоду ($I^- = TI - (IO_3^- + I_2)$).

У роботі вперше запропоновано використовувати безбарвні протііони (на прикладі ТВА⁺) для визначення забарвленого іона (I_3^-) у мікроекстракційному аналізі. Цей підхід дозволяє вирішити ряд проблем, які виникають при використанні іонних асоціатів органічних барвників в аналізі. По-перше, це високе забарвлення контрольного дослідження, яке викликано суттєвою екстракцією іонних асоціатів простих солей органічних барвників. Це обмежує можливість концентрування, тобто чутливість і призводить до погіршення відтворюваності. По-друге, це значне погіршення селективності за рахунок екстракції ІА з великими за розміром протііонами.

НОВИЙ МЕТОД ГОМОГЕННОЇ МІКРОЕКСТРАКЦІЇ

Кабашна К.В., Заруба С.В.

*Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара
49010, м. Дніпропетровськ, пр. Гагаріна 72*

Мікроекстракційні методи розділення і концентрування є сучасним і перспективним напрямком розвитку аналітичної хімії. При їх застосуванні можна досягти декількох суттєвих переваг у порівнянні з попередніми екстракційними методами:

- значно зменшити об'єми органічного розчинника (1-300 мкл) та аналіту, що відповідає принципам «зеленої хімії»;
- досягти високого ступеню концентрування (до 1000);
- автоматизувати визначення;
- здійснити нові способи мікроекстракції (у краплі, мембранна мікроекстракція і т.п.).

В даній роботі вперше запропоновані декілька нових мікроекстракційних методик. Вперше показано, що вищі карбонові кислоти можуть виступати у якості екстрагента в методі гомогенної мікроекстракції. Знайдено спосіб переведення пеларгонової кислоти у гомогенну фазу. На першій стадії органічний розчинник переводять у ту форму, яка є добре розчинною у воді. Для цього до пеларгонової кислоти додавали достатню кількість концентрованого розчину аміаку або лугу. Потім до гомогенного розчину додавали розчин комплексної сполуки аналіту. В якості таких систем були випробувані комплекси феруму(II) з фенатроліном та міді(II) з диетилдитіокарбамінатом. На другій стадії створювали умови для утворення органічної фази (переключали рН). При додаванні сірчаної кислоти миттєво утворювалася друга органічна фаз. Такий спосіб змішування водної та органічної фаз дозволяє проводити миттєвий і ідеальний масообмін між двома фазами, що дозволяє провести екстракцію і досягти екстракційної рівноваги за мінімальний час. Далі для повного розділення фаз проводили центрифугування і вимірювали оптичну густину органічної фази (~300 мкл) в пластмасовій мікрокуветі на 1 см. У якості альтернативного способу закінчення визначення запропоновано заморожувати краплю пеларгонової кислоти після центрифугування і проводити відокремлення органічної фази механічним способом.

Показано, що до концентрування методом гомогенної мікроекстракції з використанням вищих карбонових кислот найбільш придатні речовини, які є катіонами або нейтральними сполуками. Ступінь екстракції комплексу Fe(II) виявився суттєво нижчим за 100%. Це пояснюється тим, що карбонові кислоти є не таким ефективним екстрагентом як інші кисневмісні органічні розчинники, а також неповним співпадінням оптимального рН вилучення і досягнутого при гомогенній мікроекстракції.

ЕЛЕКТРОДНА ФУНКЦІЯ СЕНСОРІВ У ВОДНИХ РОЗЧИНАХ СИСТЕМИ ЦІАНОКОБАЛАМІН-МАГНЕЗОН

Кулик Є.Ю., Маторіна К.В.

*Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара
49010, м. Дніпропетровськ, пр. Гагаріна 72
e-mail: Kulyk.Elizaveta@yandex.ru*

Вітамін В₁₂- бере участь у багатьох біохімічних процесах. Його фізико-хімічні властивості були ретельно вивчені і вони були предметом численних оглядових статей і книг. Характерною хімічною особливістю молекули ціанокобаламіна є наявність в ній атома кобальту і ціано-групи, що утворюють координаційний комплекс. Ця інформація говорить про те, що вітамін зв'язується переважно з деякими аніонами. Отже, є доцільним розробка йон-селективних електродів, використовуючи похідні сполуки вітамін В₁₂.

Методом спектрофотометрії у видимій області спектру встановлено утворення асоціату між ціанокобаламіном (ЦК) та органічним реагентом – магнезоном (МГ). Методом насичення за МГ та ЦК встановлено утворення двох асоціатів зі співвідношенням компонентів 1:2 та 1:3.

Були виготовлені електродно-активні речовини (ЕАР) з співвідношенням ЦК:МГ=1:2 та ЦК:МГ=1:3

Синтезовані пластифіковані дибутилфталатом полівінілхлоридні мембрани. Для їх приготування використовували матрицю – полівінілхлорид, розчинник – циклогексанон, пластифікатор – дибутилфталат та ЕАР на основі барвника МГ. Полімерні мембрани використані у якості чутливих елементів йон-селективних електродів для визначення вмісту ЦК у водному розчині.

У якості оптимального внутрішнього розчину для електродів обрано розчин ЦК з $C=7,5 \cdot 10^{-5}$ М, приготований на фоні 1 М розчину KSCN.

Таблиця 1. Хіміко-аналітичні характеристики виготовлених електродів, оборотних до ЦК

ЕАР	Співвідношення ЦК-МГ	pH	pC	S, мВ/pC	Час відгуку, хв	C _{min} , М
ЦК-МГ	1:2	4,0	4-6	45	3	$9 \cdot 10^{-7}$
ЦК-МГ	1:3	4,0	4-7	59	3	$8 \cdot 10^{-8}$

Розроблені електроди, оборотні до вітаміну В₁₂, можуть бути використані для виявлення ЦК у фармпрепаратах, зокрема у препаратах «Neurobion», «Duovit», «Неуробекс Форте».

ВПЛИВ ХІТОЗАНУ НА СПЕКТРАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ МАГНЕЗОНУ ХС

Липка О.О.*

*Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара
49010, м. Дніпропетровськ, пр. Гагаріна, 72*

Одним із сучасних напрямків розвитку аналітичної хімії є визначення малих кількостей нітрогеновмісних органічних сполук. Вивчено вплив амінополісахариду хітозану (ХТ) на спектрофотометричні властивості азобарвника магнезону ХС (МГ). Хітозан до рН 7 існує у катіонній формі, а при рН більше 8 він переходить у молекулярну форму. В області рН до 1 МГ у розчині знаходиться у формі H_3R^+ ($\lambda_{\max}=454$ нм), при рН від 1 до 3,5 - у формі H_3R ($\lambda_{\max}=565$ нм) і при рН від 3,5 до 8 - у формі H_2R^- ($\lambda_{\max}=520$ нм) (рис.2).

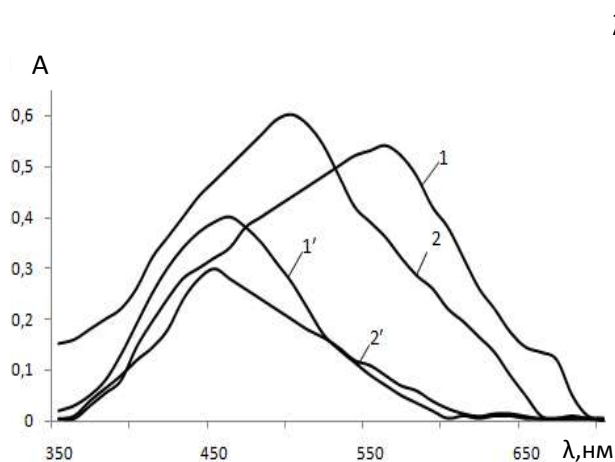


Рис. 1 – Спектри поглинання розчинів МГ у відсутності (1,2) та в присутності ХТ (1', 2') при рН: 3(1,1'); 5(2, 2').

$C_{\text{МГ}} = 4 \cdot 10^{-5}$ моль/л, $C_{\text{ХТ}} = 1,7 \cdot 10^{-6}$ моль/л, $C_{\text{МГ}} = 4 \cdot 10^{-5}$ моль/л, $C_{\text{ХТ}} = 1,7 \cdot 10^{-6}$ М, $l = 1$ см, СФ - 26.

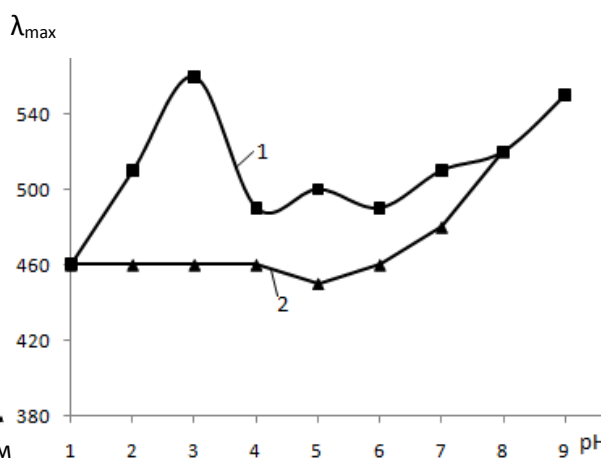


Рис. 2 – Залежність довжини хвилі максимума смуги поглинання розчинів МГ (1) та МГ - ХТ (2) від рН.

$l = 1$ см, СФ - 26.

Зміни спектральних характеристик магнезону ХС в присутності хітозану (рис. 1, 2) спостерігаються в усьому дослідженому інтервалі кислотності середовища. В присутності ХТ з'являються максимуми смуг поглинання при 460 нм та 510 нм ($\Delta\lambda = 100$ нм при рН 3,0 та $\Delta\lambda = 60$ нм рН 5,0), які відповідають взаємодії ХТ з молекулярною та іонізованою формами барвника. Гіпсохромні зсуви супроводжуються зменшенням інтенсивності світло поглинання. Отриманий модифікований барвник перспективний для застосування в аналітичних цілях.

*Науковий керівник: к.н.х., доц. Жук Л.П.

ВПЛИВ ПОЛІВІНІЛОВОГО СПИРТУ НА СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ МАГНЕЗОНУ ХС

Ляшенко Ю.Ю.*

*Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара
49010, м. Дніпропетровськ, пр. Гагаріна, 72*

Застосування полівінілового спирту (ПВС) в харчовій промисловості як емульгатора, в розчинах очних крапель як лубриканта, в нейрохірургічному лікуванні як емболізуючого агента потребує простих та надійних методів його контролю. Вивчено вплив ПВС на спектрофотометричні властивості магнезону ХС (МГ), відомого барвника, що застосовується як металохромний індикатор для титриметричного та фотометричного визначення іонів $Mg(II)$ при рН 10-11, $Ca(II)$ і $Cd(II)$ при рН 11,5, $Sr(II)$ і $Ba(II)$ при рН 12,5.

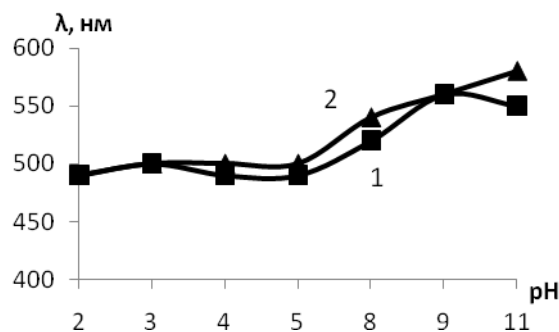
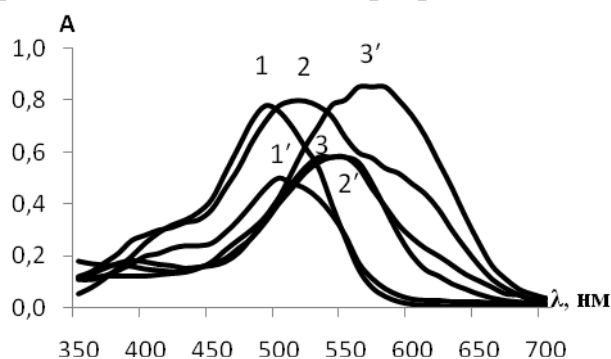


Рис. 1 – Спектри поглинання розчинів магнезону ХС у відсутності (1,2,3) та присутності ПВС (1',2',3') при рН 4,0 (1,1'), рН 8,0 (2,2') та рН 11 (3,3'). $C_{MГ} = 4 \cdot 10^{-5}$ моль/л; $C_{ПВС} = 0,02\%$. Спектрофотометр СФ-26; $l=1$ см

Рис. 2 – Залежність довжини хвилі максимуму смуги поглинання розчинів МГ (1) та МГ-ПВС (2) від рН. $C_{MГ} = 4 \cdot 10^{-5}$ моль/л; $C_{ПВС} = 0,02\%$. Спектрофотометр СФ-26; $l=1$ см

При введенні у розчини МГ ПВС з концентрацією 0,02% спостерігаються зміни у спектрах магнезону ХС в усьому дослідженому інтервалі кислотності середовища (рис.1, 2): незначні батохромні зсуви максимумів смуг поглинання, які супроводжуються дворазовим зменшенням оптичної густини в кислому і нейтральному середовищі (рис.1 кр. 1', 2') та триразовим її зростанням в лужному середовищі (кр.3'). Зазначені зміни свідчать про взаємодію ПВС з магнезоном ХС і утворення аддуктів в інтервалі рН від 3 до 11. Отримані аддукти можуть бути використані як аналітичні форми для визначення кількісного вмісту ПВС в реальних об'єктах.

*Наук. керівник к.х.н., доц. Жук Л.П.

ВИЗНАЧЕННЯ ЗАЛИШКОВОГО ВМІСТУ КАТІОННОГО ФЛОКУЛЯНТУ PUROFLOCK 920 У ВОДОПРОВІДНІЙ ВОДІ

Носікова К.В.*

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара
49010, м. Дніпропетровськ, пр. Гагаріна, 72, тел. (056) 373-12-56

e-mail: Blondi2708@rambler.ru

Флокулянти, водорозчинні високомолекулярні сполуки, широко застосовують у зв'язку з необхідністю очистки зростаючих обсягів стічних вод.

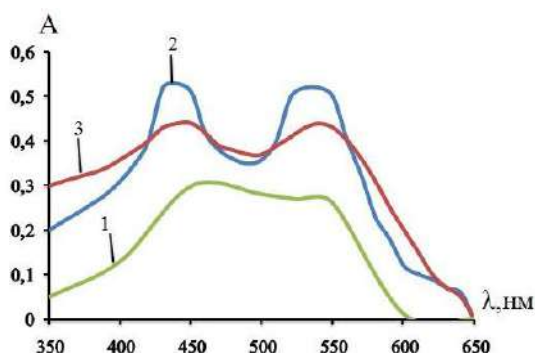


Рисунок. Спектри поглинання розчинів БПЧ у відсутності (1) та присутності (2,3) Puro Flock 920 при концентраціях PF920: кр.2 – 5 мг/л, кр.3 – 12 мг/л та pH 2,5.
 $C_{\text{БПЧ}} = 4 \cdot 10^{-5}$ моль/л; $l = 1,0$ см, СФ-26

Вивчено взаємодію катіонного флокулянту Puro Flock 920 з трифенілметановим барвником бромпірогаллоловим червоним (БПЧ). В присутності PF 920 оптична густина розчинів БПЧ при оптимальній кислотності середовища (pH 2,5) збільшується, при цьому максимума смуг поглинання зміщуються гіпсохромно(рис.).

В оптимальних умовах отримані градувальні залежності, лінійні в інтервалі концентрацій від 0,15 до 5 мг/л при $C_{\text{PF920}} = 5$ мг/л ($y = 0,410x + 0,184$, $R^2 = 0,982$) та від 0 до 62,5 мг/л при $C_{\text{PF920}} = 12$ мг/л ($y = 0,020x + 0,064$, $R^2 = 0,986$). Аналітична система використана для визначення вмісту PF 920 у воді централізованого водопостачання (табл.). Знайдений вміст катіонного флокулянта Puro Flock 920 у воді не перевищує ГДК (0,1 - 2 мг/л).

Таблиця - Результати визначення вмісту Puro Flock 920 у водопровідній воді

	За градуванням $C_{\text{PF920}} = 5$ мг/л ($\lambda = 410$ нм)			За градуванням $C_{\text{PF920}} = 12$ мг/л ($\lambda = 430$ нм)		
	C_x , мг/л	$(\bar{C} \pm \Delta)$, мг/л	S_r	C_x , мг/л	$(\bar{C} \pm \Delta)$, мг/л	S_r
1	$2,1 \cdot 10^{-3}$	$(2,2 \pm 0,1) \cdot 10^{-3}$	$5,77 \cdot 10^{-5}$ 0,005	$1,6 \cdot 10^{-3}$	$(1,6 \pm 0,1) \cdot 10^{-3}$	$5,77 \cdot 10^{-5}$ 0,006
2	$2,3 \cdot 10^{-3}$			$1,5 \cdot 10^{-3}$		
3	$2,2 \cdot 10^{-3}$			$1,7 \cdot 10^{-3}$		

* Робота виконана під керівництвом к.х.н., доц. Жук Л.П.

ПОЛІМЕРНІ МЕМБРАНИ, ЧУТЛИВІ ДО ВМІСТУ САЛІЦИЛОВОЇ КИСЛОТИ

Степаненко К.М., Маторіна К.В.

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара

49010, м. Дніпропетровськ, пр. Гагаріна, 72

e-mail: katerinamandarinastepanenko@mail.ru

Саліцилову кислоту (СК) у розчинах визначають хроматографічними, електрохімічними та спектроскопічними методами, але найбільш простим у виконанні, доступним та достатньо чутливим є йонометричний метод.

Синтезовані пластифіковані дибутилфталатом полівінілхлоридні мембрани. Для їх приготування використовували матрицю – полівінілхлорид, розчинник – циклогексанон, пластифікатор – дибутилфталат та електродно-активну речовину (ЕАР) на основі барвника сафраніну Т (СТ). Полімерні мембрани використані у якості чутливих елементів йон-селективних електродів для визначення вмісту СК у водному розчині.

У якості оптимального внутрішнього розчину для електродів обрано розчин СК з $C=1 \cdot 10^{-3}$ М, приготований на фоні 1 М розчину KCNS. Електродна функція сконструйованих електродів лінійна в інтервалі концентрацій $1 \cdot (10^{-10} - 10^{-3})$ моль/л, крутизна відповідає теоретичному значенню для двозарядних аніонів. Оптимальний час кондиціонування – 2 доби. Дрейф потенціалу не перевищує 5 мВ/добу. Час відгуку ЙСЕ складає 5 хвилин (табл.).

Таблиця. Хіміко-аналітичні характеристики виготовлених електродів, оборотних до СК

ЕАР	Співвідношення СТ:БК	pH	pC	S, мВ/pC	Час відгуку, хв	C _{min} , М
СТ-СК	1:1	6,1	3-8	25	5	$3,5 \cdot 10^{-8}$

Отримані результати дослідження можуть бути використані для виявлення СК у розчинах та лікарських препаратах, наприклад, таких як «Аспірин».

ВЗАЄМОДІЯ ДИКЛОФЕНАКА НАТРІЯ З ОРГАНІЧНИМИ РЕАГЕНТАМИ

Чернопольська Ю.А., Маторіна К. В.

Дніпропетровський національний університет ім. О. Гончара

Диклофенак натрію належить до похідних фенілоцтової кислоти та відноситься до групи нестероїдних протизапальних засобів. Даний ненаркотичний знеболювальний препарат використовують для зовнішнього та внутрішнього застосування при хворобі суглобів, остеохондрозу та при різних больових синдромах. Цей препарат має особливе значення серед лікарських препаратів, тому потребує постійного контролю якості.

Спектрофотометричним методом встановлена взаємодія диклофенака натрія (ДК) з наступними органічними реагентами (R): метиленовий синій (МС), метиленовий зелений (МЗ), метиленовий фіолетовий (МФ), сафранін Т (СТ). Хіміко – аналітичні характеристики досліджуваних систем узагальнено у таблиці 1.

Таблиця 1 – Хіміко - аналітичні характеристики системи диклофенак натрія – органічний реагент.

Реагент	$\lambda_{R, \text{нм}}$	$\lambda_{R\text{-ДК}, \text{нм}}$	$\epsilon_R \cdot 10^{-5}$	$\epsilon_{R\text{-ДК}} \cdot 10^{-5}$	$C_{\min \text{ ДК}} \cdot 10^7$
МС	660	670	0,63	0,52	3,8
МЗ	590	600	0,43	0,23	9,1
МФ	580	590	0,39	0,37	5,1
СТ	520	500	0,39	0,37	5,1

Таким чином, запропоновані аналітичні форми диклофенак натрію - органічний реагент є достатньо чутливими та можуть використовуватись при контролі якості лікарських засобів на основі диклофенака натрія, наприклад, «Дикловит», «Диклонат-П», «Диклопак», «ДиклоФ».

СЕКЦІЯ ОРГАНІЧНА ХІМІЯ

Керівник: Оковитий Сергій Іванович, зав. каф. органічної хімії ДНУ,
д.х.н., професор.

Секретар: Заровна Ірина Сергіївна, м.н.с. МДГ каф. органічної хімії ДНУ

ОСОБЛИВОСТІ ПЕРЕБІГУ РЕАКЦІЇ КОРІ-ЧАЙКОВСЬКОГО З ДИМЕТИЛСУЛЬФОКСОНІЙМЕТИЛИДОМ

Вікторія Чепурна, Анастасія Барабаш*

Кафедра органічної хімії та технології органічних речовин хіміко-технологічного факультету, Національний технічний університет України «КПІ»

03056, м. Київ, пр. Перемоги, 37, корп. 4

barabash.anastasia@gmail.com

Реакція Корі-Чайковського широко вживана у синтетичній органічній хімії як універсальний метод отримання епоксидів. При цьому, механізм перетворення детально досліджено лише для напівстабілізованих сульфонієвих ілідів через їх стереоселективне метиленування ароматичних альдегідів та кетонів. В той же час інші реагенти Корі, такі як, наприклад, диметилсульфоксонійметилід (ДМСМ) залишились поза увагою. Нами було розраховано метиленування різних за своєю просторовою ускладненістю аліфатичних метилкетонів з використанням ДМСМ як метиленуючого реагенту. Виявилось, що перетворення є тристадійним для всіх модельних кетонів (Рис. 1).

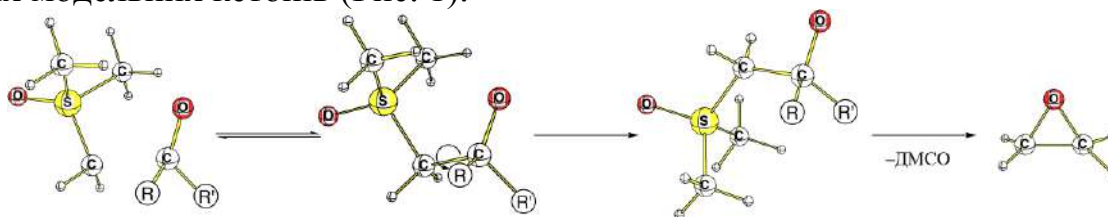


Рис. 1 Схема механізму метиленування карбонільних сполук з використанням ДМСМ

Так, на першій стадії відбувається атака ілїду на карбонільну групу з утворенням *цис*-бетаїну. Термін «*цис*» в цьому випадку відноситься до взаємного розташування Оксигену карбонільної групи та Сульфуру сульфоксонієвої групи. Елімінування ДМСО від *цис*-бетаїну ускладнене занадто високим бар'єром реакції. Тому відбувається обертання навколо новоутвореного С–С зв'язку, яке приводить до *транс*-бетаїну. Останній легко вступає у внутрішньомолекулярну S_N2 -реакцію, що приводить до утворення відповідного епоксиду. При цьому, наявність об'ємного замісника поблизу реакційного центру підвищує бар'єр реакції. Запропонована схема є загальною як для просторово-ускладнених субстратів (1-діамантилметилкетон), так і для стерично не навантажених кетонів (ацетон).

1. Corey, E. J., Chaykovsky, M. *J. Am. Chem. Soc.* **1965**, 87, 1353.

2. Butova, E. D., Barabash, A. V., Petrova, A. A., Kleiner, C. M., Schreiner, P. R., Fokin, A. A. *J. Org. Chem.* **2010**, 75, 6229.

* Робота виконана під керівництвом к.х.н., доц. Бутової К. Д., та д.х.н., проф. Фокіна А. А.

ДИНАМІЧНА ПОВЕДІНКА 4-ДІАМАНТИЛФЕНІЛ ФОСФІНУ

Лябах Ю.В., Барабаш А.В.

Кафедра органічної хімії та технології органічних речовин,
Національний технічний університет України "КПІ",
Україна, м. Київ, пр. Перемоги, 37,
ebutova@yahoo.com

Фосфіни, що містять адамантильні та діамантильні фрагменти, використовують в якості лігандів в гомогенному каталізі та в реакціях утворення С-С зв'язку. Раніше нами було розроблено метод синтезу діамандоїдних похідних Р-стереогенних первинних і вторинних фосфінів із дихлорофосфінових кислот. Аналогічно, було отримано 1-діамантилфеніл фосфін і 4-діамантилфеніл фосфін з високими виходами (73% та 85%, відповідно). Характеристика ^{31}P ЯМР спектра 4-діамантилфеніл фосфіну при кімнатній температурі в CDCl_3 була несподівана, оскільки не спостерігалось жодного сигналу. VT-NMR спектр показав динамічну поведінку, характерну при температурі 295 К.

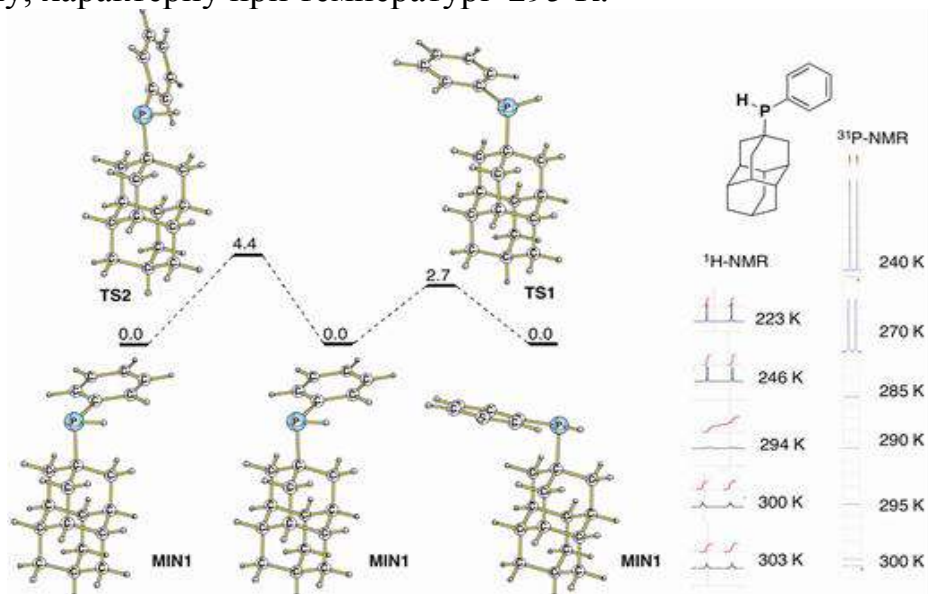


Схема 1. Квантово-хімічне моделювання обертання фенільної групи у 4-діамантилфеніл фосфіні та сигнали ^1H і ^{31}P ЯМР спектрів.

Моделювання обертання фенільної групи через перехідний стан TS2 свідчить (Схема 1), що конформаційний перехід супроводжується бар'єром в 4,4 ккал/моль. Це пояснює динамічну поведінку фосфіну, експериментально отриману в розчині: через швидке обертання фенільної групи чіткі резонанси PhP-H сигнали в ^1H і ^{31}P ЯМР спектрах спостерігаються тільки при температурі нижче 270 К.

1. A. Zapf, M. Beller, Chem. Commun., 2005, p. 431;
2. J. P. Stambuli, R. Kuwano, J. F. Hartwig, Angew. Chem., 2002, 114, p. 4940;
3. Angew. Chem. Int. Ed., 2002, 41, p. 4746.

* Робота виконана під керівництвом к.х.н., доц. Бутової К. Д., та д.х.н., проф. Фокіна А. А.

НЕОБЫЧНАЯ ДИМЕРИЗАЦИЯ В ПРИСУТСТВИИ РЕАКТИВА НОРМАНА

Кибальний Н. А., Барабаш А.В.

*Кафедра органічної хімії та технології органічних речовин,
Національний технічний університет України "КПІ",*

Україна, м. Київ, просп. Перемоги, 37

barabash.anastasia@gmail.com

Диамондоиды — молекулярные аналоги наноалмазов — являются многообещающими прекурсорами для создания новых материалов, таких как мономолекулярные высокоэффективные полевые эмитторы и особо прочные механические покрытия. В частности, функционализация диамондоидов ненасыщенными группами (винильной, аллильной) открывает путь к созданию новых наноматериалов.[1] Наша попытка синтезировать дивинильное производное диамантана, замещенного в третьем положении, с использованием винилмагний бромида неожиданно привела к диену **5**. Образование ненасыщенного производного, очевидно, происходит в результате димеризации промежуточно образующегося радикала.

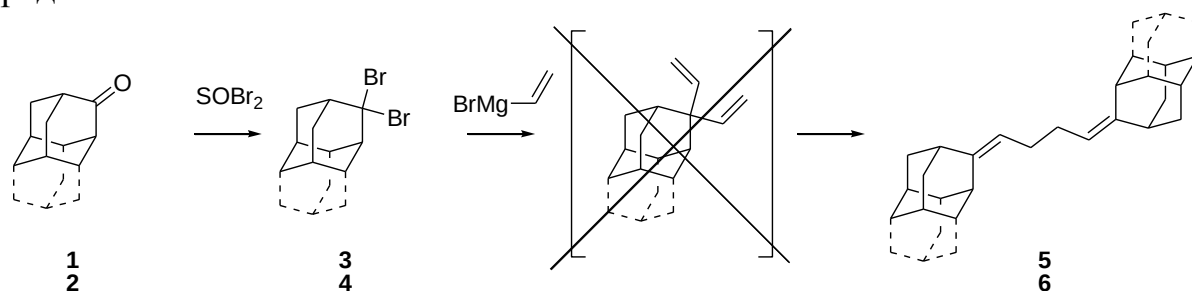


Схема 1. Димеризация интермедиата реакции с использованием реактива Нормана.

Подобное превращение также характерно для адамантана, и приводит к соответствующему диену **6**. Структура полученных впервые соединений **5** и **6** охарактеризована спектральными методами анализа.

[1] Fokin, A. A., Butova, E. D., Barabash, A. V., Huu, N. N., Tkachenko, B. A., Fokina, N. A., Schreiner, P. R. // *Synth. Comm.* – 2013 - 43(13) - pp 1772-1777.

* Работа выполнена под руководством к.х.н., доц. Бутовой К. Д., и д.х.н., проф. Фокина А. А.

РЕГІОСЕЛЕКТИВНЕ РОЗКРИТТЯ ОКСИРАНОВОГО ЦИКЛУ ХЛОРМЕТИЛОКСИРАНУ БЕНЗОАТ-АНІОНОМ

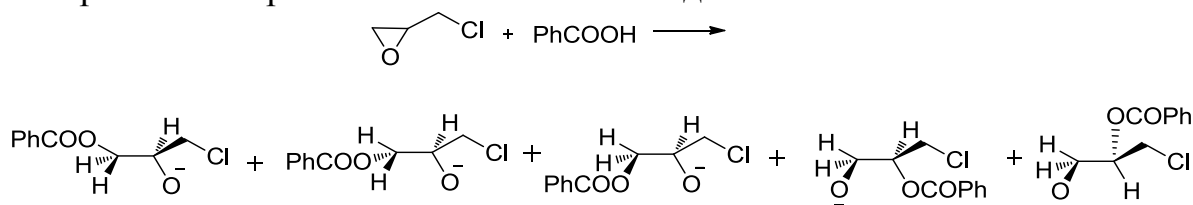
Бахалова Є.А., Беспалько Ю.М., Сінельникова М.А.

Донецький національний університет

bahalova.j@yandex.ua

Хлорметилоксиран широко використовується в органічному синтезі для енантіоселективного оксиалкілювання і гліцидилування нуклеофільних груп для отримання ряду технологічно важливих продуктів: оптично прозорих матеріалів, епоксидних смол, модифікованих компонентів покриттів і клеїв, різних пластифікаторів. Реакція алкілювання нуклеофільних груп (ОН, СООН, NH і ін.) α -оксидами розглядається як модельна при вивченні механізму біохімічних процесів і створенні біологічно активних речовин, при дослідженні складних процесів затвердіння епоксидних смол. Важливу роль при цьому відіграє регіоселективність реакції розкриття оксиранового циклу нуклеофільними реагентами, оскільки у заміщених α -оксидів є два конкуруючих реакційних центри. Реакції заміщених оксіранов з гідроксилвмістними реагентами можуть протікати за двома напрямками: з розкриттям циклу (α -розрив (згідно правила Красуського) і β -розрив) і утворенням двох типів регіоізомерів, в першому типі можливі три стереоізомерів, а в другому два.

Метою даної роботи є вивчення перетворень в системі «хлорметилоксиран – бензоат-аніон» методами квантової хімії:



З використанням програмного комплексу PC FIREFLY 7.1.G проведено квантово-хімічні розрахунки. Визначення топологічних структур можливих перехідних станів (ПС) на шляху реакції здійснено в наближенні B3LYP/6-31+G** для вакууму. Належність знайдених ПС відповідній реакції доведено спусками за процедурою IRC в долини реактантів і продуктів. Масштабуючий множник - 0,96. Поріг по градієнту енергії у всіх розрахунках складає 10^{-4} (a.u./bohr.). Локалізовано ПС, в яких атакуючий нуклеофіл знаходиться в площині оксиранового циклу.

Для різних положень атаки бензоат-аніоном знайдено рівноважні конфігурації перехідних станів, їх геометричні характеристики і активаційні параметри відповідних реакцій розкриття оксиранового циклу. Зроблено співвіднесення із експериментальними даними щодо виходу ізомерних продуктів реакції.

МАТЕРІАЛИ ДЛЯ ОРГАНІЧНИХ СВІТЛОВИПРОМІНЮЮЧИХ ДІОДІВ: ЗАГАЛЬНІ ЗАСАДИ ТА ПЕРСПЕКТИВНІ НАПРЯМКИ

Безуглий М.Ю.^{1,3}, Бєда О.А.^{2,3}

¹*Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського,
пр. Академіка Палладіна, 32/34, Київ, Україна 03142
e-mail mykola.bezuglyi@gmail.com*

²*Київський національний університет ім. Тараса Шевченка,
хімічний факультет, вул. Льва Толстого, 12, Київ, Україна 01033*

³*Research Centre of progressive technologies, Slovak University of Technology
of Bratislava, J. Bottu 25, 91724 Trnava, Slovak Republic*

Вирішальне значення для органічних світловипромінюючих діодів (OLED) має загальна ефективність, тобто можливість бути й енергозберігаючим, й мати тривалий термін служби як у якості дисплеїв, так і систем освітлення. Перша комерціалізація органічних світловипромінюючих діодів у 1997 році призвела до значного росту кількості досліджень органічних матеріалів, що можуть бути використані як компоненти дисплеїв та освітлювальних панелей третього покоління. Численні підходи були запропоновані для досягнення високої ефективності OLEDів за рахунок синтезу нових органічних матеріалів, конструкції тонких та надтонких емісійних конструкцій, корегування високоефективної архітектури пристроїв тощо.

Нами було проведено аналіз літературних даних щодо органічних матеріалів, що використовуються як n- або p-провідники, емітери електронів та дірок, матеріали-носії (host-materials) та, власне, емітери світла. Проведено огляд як речовин, що використовуються в промисловості, так і новітніх матеріалів.

З оглянутих даних випливає що в майже усіх типах робочих шарів пристроїв використовуються похідні карбазолу, трифеніламіну, дифенілантрациламіну, трифенілсилану, 9,9-спіробіфлуорену, трифенілфосфіноксиду, оксодіазолу, та, в деяких випадках, ароматичних карбонових кислот, або їх електронно-зв'язані чи незв'язані комбінаторні сполуки.

СИНТЕЗ НОВИХ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ ПОХІДНИХ 4-АМІНОХІНАЗОЛІНУ ТА 3-КАРБОКСИХІНОЛІНУ

Сапелкін В.Н., Виграненко К.В., Бджола В.Г. та Ярмолук С.М.

Інститут молекулярної біології і генетики НАН України

вул. Академіка Заболотного, 150, м. Київ, 03680, Україна

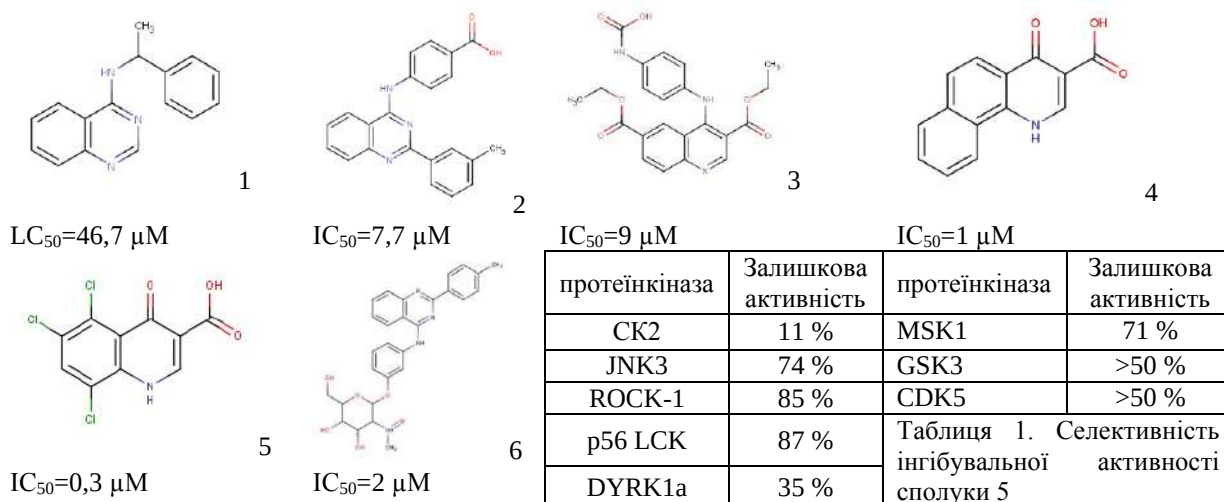
e-mail: leo_rambler@ukr.net

Серед похідних хіноліну досить багато фармакологічно активних синтетичних і природних сполук. На сьогодні в протираковій терапії застосовують похідні 4-амінохіназоліну та 4-амінохіноліну (гефітініб і пелітиніб відповідно), фармакодинамічна дія яких базується на інгібуванні протеїнкіназ.

З огляду на високу активність препаратів на основі похідних хіноліну метою нашої роботи стали синтез та оцінка біологічної активності нових похідних 4-амінохіназолінів і 3-карбоксихінолінів.

Сполуки перевіряли на інгібувальну активність щодо протеїнкінази СК2 та на цитотоксичну дію на лініях ракових клітин.

Для пошуку потенційних інгібіторів СК2 був проведений молекулярний докінг віртуальної бази похідних 4-амінохіназолінів і 3-карбоксихінолінів. Комплекси похідних із кіназою, отримані за допомогою програми DOCK 4.0, проаналізовано за показниками енергії зв'язування лігандів з рецептором. У результаті скринінгу відібрано 194 сполуки для синтезу та біологічного тестування.



Було встановлено, що сполука **1** проявляє цитотоксичну дію на пухлинну лінію клітин SK-MEL-5 (меланома), знайдено інгібітори протеїнкінази СК2 із мікромольними значеннями IC₅₀ (сполуки **2-6**). Показано, що сполука **5** мала селективну інгібувальну активність щодо протеїнкінази СК2.

Таким чином, знайдено ряд біологічно активних сполук серед похідних 4-амінохіназоліну та 3-карбоксихіноліну. Найактивніші сполуки після хімічної оптимізації можуть бути використані для досліджень сигнальних шляхів клітини, в які залучена СК2.

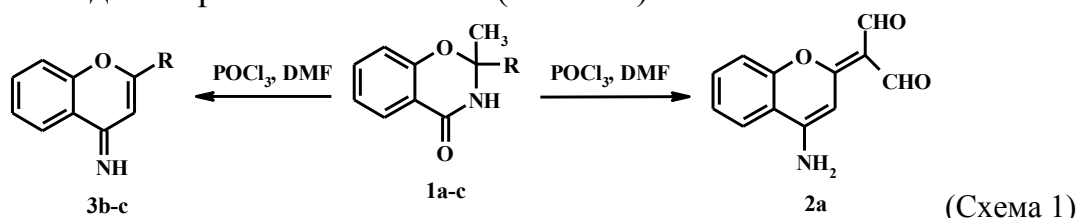
РЕАКЦИИ РЕЦИКЛИЗАЦИИ ПРОИЗВОДНЫХ ХРОМЕНОВ

Загорулько С.П.¹, Варениченко С.А.¹, Фарат О.К.², Марков В.И.¹

¹ГВУЗ «Украинский государственный химико-технологический университет»

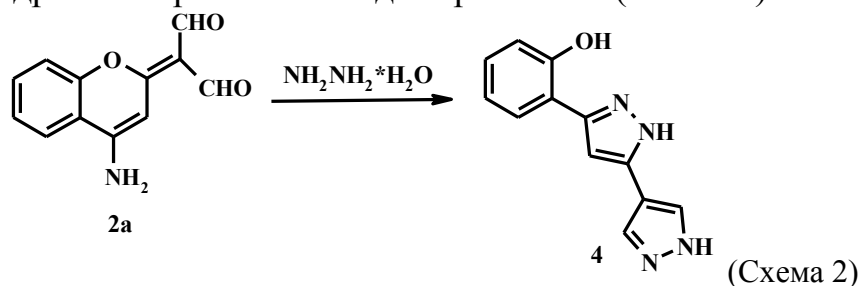
²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
e-mail: 97273782@gmail.com

Реакции трансформации цикла (рециклизации) представляют значительный интерес в современной органической химии. Многокомпонентные химические превращения приводят не только к быстрому образованию сложных молекул, но и обеспечивают возможность получения на их основе множества аналогов. Ранее [1] была найдена новая многостадийная домино-реакция геминальных 1,3-бензоксазинов **1a-c**, которая позволяет получить перспективные полифункциональные синтоны – производные хроменов **2a** и **3b-c** (Схема 1).

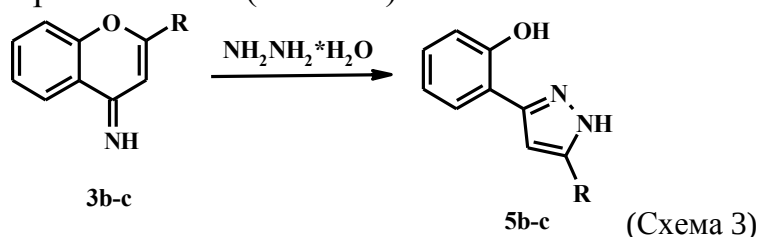


a R = CH₃; b R = Ph; c R = 4-NO₂C₆H₄

При изучении реакционной способности диформилпроизводного хромена **2a** найдена возможность раскрытия хроменового цикла под действием гидразин гидрата с образованием дипиразола **4a** (Схема 2).



В ходе дальнейшего исследования установлено, что имины **3b-c** аналогично реагируют с гидразин гидратом с образованием ожидаемых производных пиразолов **5b-c** (Схема 3).



b R = Ph; c R = 4-NO₂C₆H₄

[1] Farat O.K., Markov V.I., Varenichenko S.A., Dotsenko V.V., Mazepa A.V. // Tetrahedron – 2015.– № 71. – P.5554-5561.

СИНТЕЗ ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ГИДРАЗОНОВ В УСЛОВИЯХ РЕАКЦИИ ЯППА-КЛИНГЕМАННА

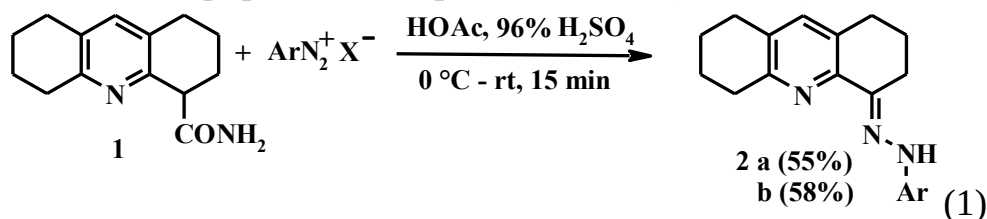
Зализная Е.В.¹, Черевута О.В.¹, Варениченко С.А.¹,

Фарат О.К.², Марков В.И.¹

¹ГВУЗ «Украинский государственный химико-технологический университет»

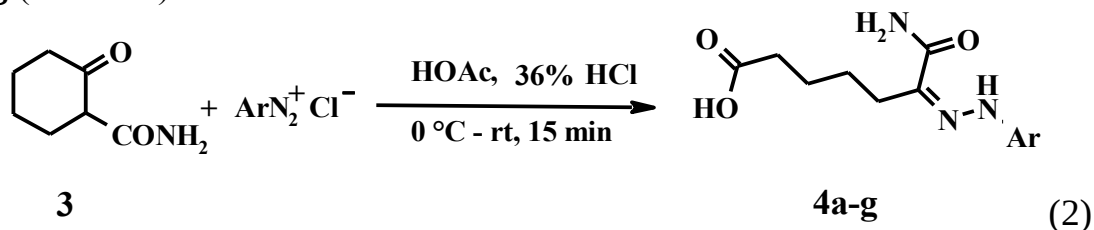
²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
katuysha1989@mail.ru

В данное время значительно количество исследований в области химии гетероциклических соединений связано с разработкой новых подходов к их синтезу. Особый интерес в этом направлении представляют гидразоны, поскольку структурное разнообразие соединений данного класса позволило создать на их основе ряд высокоэффективных и малотоксичных лекарственных препаратов широкого спектра действия. Ранее нами [1] было установлено, что образование арилгидразонов **2a,b** по реакции Яппа-Клингеманна проходит в присутствии значительного количества концентрированной серной кислоты (Схема 1).



2a Ar=2- $\text{NO}_2\text{C}_6\text{H}_4$; **2b** Ar=4- $\text{NO}_2\text{C}_6\text{H}_4$, $\text{X}^- = \text{HSO}_4^-$

В ходе дальнейших исследований реакции Яппа-Клингеманна на примере циклогексанон-2-карбоксамида **3** было установлено, что она протекает с раскрытием цикла и образованием полифункциональных арилгидразонов **4a-g** (Схема 2).



5a Ar=4-Me C_6H_4 ; **5b** Ar=4-Cl C_6H_4 ; **5c** Ar=Ph; **5d** Ar=2- $\text{NO}_2\text{C}_6\text{H}_4$; **5e** Ar=3- $\text{NO}_2\text{C}_6\text{H}_4$;
5f Ar=2-Me-5- $\text{NO}_2\text{C}_6\text{H}_3$; **5g** Ar=4- $\text{NO}_2\text{C}_6\text{H}_4$;

Строение синтезированных соединений установлено на основании анализа данных спектров ЯМР ^1H , ^{13}C и масс-спектров.

[1] E. V. Zaliznaya, O. K. Farat, N. Yu. Gorobets, V. I. Markov, R. I. Zubatyuk, A. V. Mazepa, E. V. Vashchenko. *Chem. Heterocycl. Compd.*, 2015, **51**, 327. [Химия гетероцикл. соединений, 2015, 51, 327.]

ІПСО-ЗАМІЩЕННЯ СУЛЬФОНАМІДНОЇ ГРУПИ В ПРИСУТНОСТІ КИСЛОТНИХ КАТАЛІЗАТОРІВ

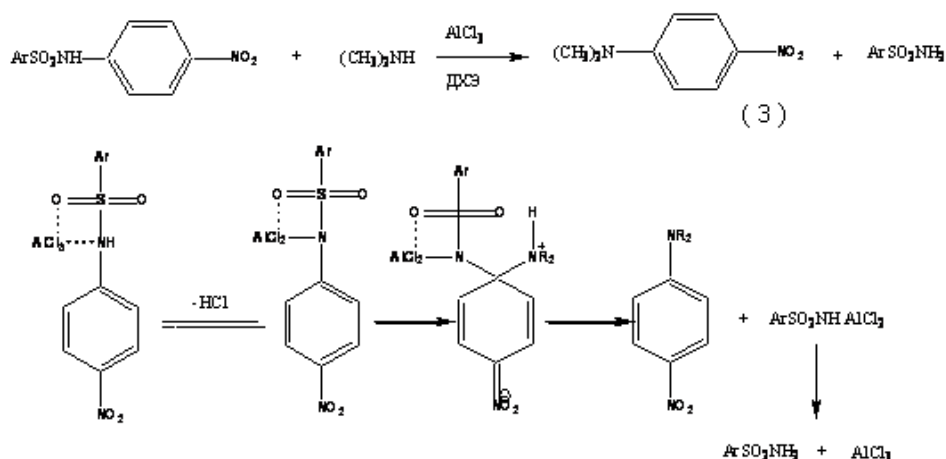
Івасик А.Р.

*Дніпропетровський національний університет ім. Олеся Гончара
49010, Дніпропетровськ, пр. Гагаріна 72.*

E-mail: ivasik94@mail.ru

Інтерес до реакцій перегрупування або заміщення сульфонамідної групи має практичну та теоретичну складові. Біарильний скелетон, який можна отримати в цих реакціях, викликає значний інтерес у фармакологів – з одного боку, а з другого – має важливе значення, як будівельний блок у багатьох органічних синтезах біологічноактивних сполук, природних компонентів, хіральних лігандів у асиметричному синтезі, полімерах, фармацевтичних препаратів. Теоретичні дослідження процесу заміщення або перегрупування сульфонамідної групи поодинокі та мають, в основному, описовий характер.

Нами було встановлено, що у разі змішування при кімнатній температурі в 1,2-дихлоретані 0,01 моль сульфонамідів і 0,015 моль AlCl_3 , та додавання надлишку диметиламіну утворюється N,N-диметил-п-нітроанілін з виходом (58%):



Дослідження дії інших нуклеофільних реагентів призвело до цікавих результатів. Виявилось, що з N-ариламидами сульфоокислот у присутності хлористого алюмінію, взаємодіють лише високоосновні аміни ($\text{pK}_a > 10,0$). Дія інших амінів призводить до гідролізу вихідної сполуки з утворенням п-нітроаніліну. Так, з морфоліном, аніліном, бензиламіном, піридином відповідні продукти не утворюються. Синтез легко відбувається з піперидином, діетиламіном, метиламіном. Продукти іпсо-заміщення сульфонамідної групи в реакції з мета- та орто-нітро анілідами також не спостерігалися.

Нуклеофільне заміщення толуолсульфамідної групи неможливе за відсутності хлористого алюмінію. Вочевидь, його роль зводиться до утворення міцних комплексів за атомом азоту, що сприяє підвищенню електрофільності С-атома та послаблення зв'язку N-C, а також полегшує нуклеофільну атаку високо основним аміном, що витісняє арилсульфамідну групу.

НАПРАВЛЕНИЕ ГЕТЕРОЦИКЛИЗАЦИИ 4-ГИДРАЗИН-5,6,7,8-ТЕТРАГИДРО[1]БЕНЗОТИЕНО[2,3-d]ПИРИМИДИНА

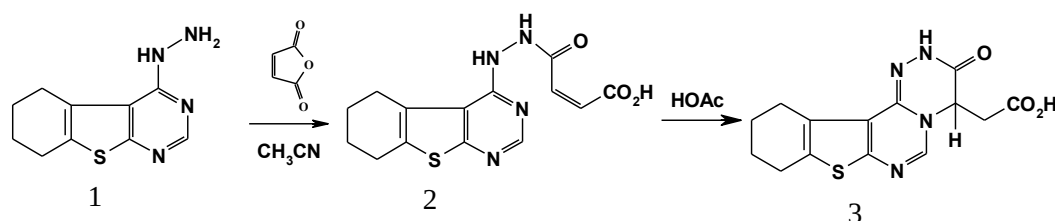
Коломейцев Д.О.¹, Варениченко С.А.¹, Астахина В.О.¹, Марков В.И.¹,
Коваленко С.И.², Харченко А.В.¹

¹ГВУЗ «Украинский государственный химико-технологический университет»

² Запорожский государственный медицинский университет

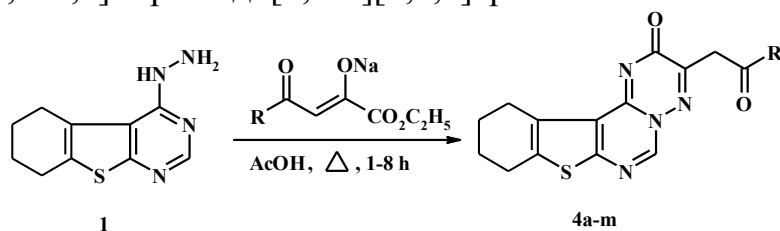
E-mail: dimakolomeicev@gmail.com

Гетероциклизация в представителе ряда бензо[2,3-d]пиримидинов – 4-гидразин-5,6,7,8-тетрагидро[1]бензотиено[2,3-d]пиримидине **1**, благодаря наличию нескольких реакционных центров и в зависимости от природы циклизующих агентов может проходить по разным направлениям. Взаимодействие гидразина **1** с малеиновым ангидридом в кипящем ацетонитриле приводит к образованию соответствующего производного **2** (Схема 1) на первой стадии. Дальнейшая циклизация соединения **2** в уксусной кислоте приводит к образованию 2-(3-оксо-3,4,9,10,11,12-гексагидро-2H-бензо[4',5']тиено[2',3':4,5]пиримидо[6,1-с][1,2,4]триазин-4-ил) кислоты **3**.



(Схема 1)

В результате реакции соединения **1** с 2,4-дикетоэфирами при нагревании в уксусной кислоте проходит внутримолекулярная перегруппировка по механизму реакции Димрота с образованием бензотиено[2',3':4,5]пиримидо[1,6-b][1,2,4]триазинов **4a-m**.



4: a – R = C₆H₄Br; **b** – R = C₆H₄Cl; **c** – R = m-C₆H₃F₂; **d** – R = ; **e** – R = ;
f – R = ; **g** – R = C₆H₄CH₃; **h** – R = C₆H₄CN; **j** – R = C₆H₄CF₃; **k** – R = ;
l – R = ; **m** – R = C₆H₄F.

Строение синтезированных соединений установлено на основании анализа данных спектров ЯМР ¹H, ¹³C и масс-спектров.

6-СПІРОКОНДЕНСОВАНІ ПОХІДНІ [1,2,4]ТРИАЗИНО[2,3-с]ХІНАЗОЛІН-2-ОНУ

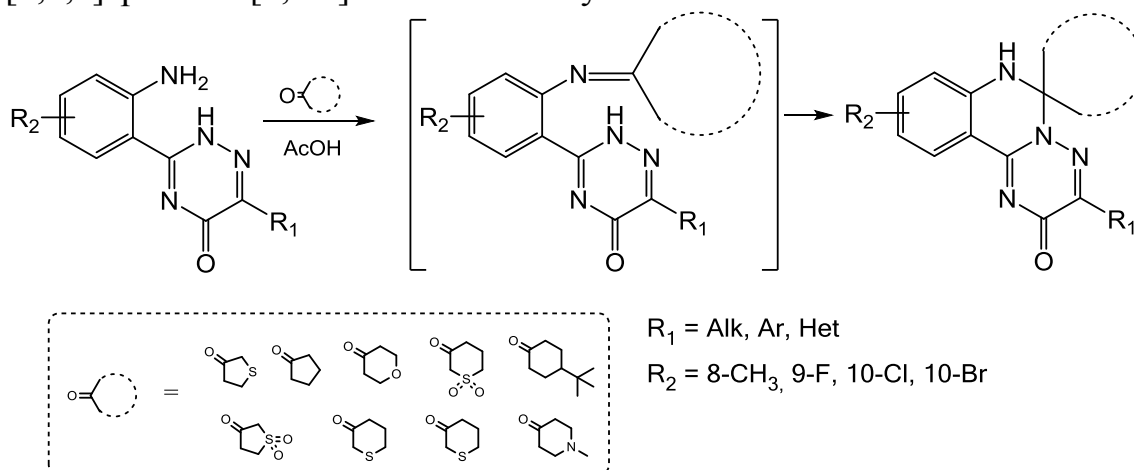
Коломоєць О.С.¹, Пальчиков В.О.², Воскобойнік О.Ю.¹

*Запорізький державний медичний університет, м. Запоріжжя,
пр., Маяковського, 26.*

*Дніпропетровський національний університет ім. О. Гончара,
м. Дніпропетровськ, пр. Гагаріна, 72.*

Сполуки зспіроконденсованим фрагментом завжди були у центрі уваги дослідників, зокрема тих, які працюють у галузях структурної органічної хімії та медичної хімії. Зазначений факт, насамперед пов'язаний зі значними особливостями просторової будови даного класу сполук, що в свою чергу впливає на їх біологічну дію.

Враховуючи зазначене та в продовження досліджень спрямованих на пошук біологічно активних сполук серед анельованих похідних хіназоліну нами здійснено синтез ряду оригінальних 6-спіроконденсованих похідних [1,2,4]триазино[2,3-с]хіназолін-2-ону.



Встановлено, що зазначені сполуки легко утворюються при взаємодії заміщених 3-(2-амінофеніл)-6-R-1,2,4-триазин-5(2H)-онів з циклічними кетонами протягом 3-4 годин у киплячій оцтовій кислоті. Зазначене перетворення вірогідно реалізується через стадію формування відповідного азометинового інтермедіату, який, на жаль, не вдалось виділити. Також нами охарактеризовані ¹H та ¹³C ЯМР-спектри синтезованих сполук. Так, характеристичними у ¹HЯМР-спектрах виявились сигнали NH-фрагментів (8.22-6.64 м.ч.), а у ¹³C ЯМР-спектрах сигнали атомів карбону положення 6 (85.63 - 77.89 м.ч.). Остаточна будова спіроконденсованих сполук встановлена за допомогою РСА.

Проведений попередній скринінг на фармакологічну активність показав, що для них характерна помірна протимікробна та протигрибкова активність, виражена антирадикальна та актопротекторна активність.

ПОШУК ІНГІБІТОРІВ ПРОТЕЇНКІНАЗИ СК2 СЕРЕД ПОХІДНИХ 4-АМІНО-ТІЄНО[2,3-D]ПІРИМІДИНУ

Котей І.М., Протопопов М.В., Баланда А.О.,

Бджола В.Г. та Ярмолюк С.М.

Інститут молекулярної біології і генетики НАН України

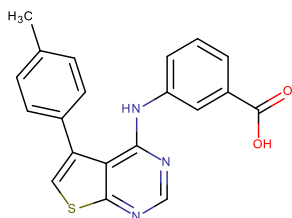
вул. Академіка Заболотного, 150, м. Київ, 03680, Україна

e-mail: im_kotey@ukr.net

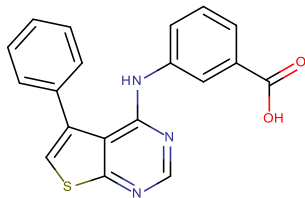
Протеїнкіназа СК2 – серин/треонінова протеїнкіназа, що відіграє важливу роль у життєдіяльності клітини. Надекспресія та гіперактивація цього ензиму спостерігаються під час розвитку низки патологій, зокрема ракових захворювань. Тому інгібітори протеїнкінази СК2 можна розглядати як потенційні лікарські засоби.

Раніше нами були розроблені інгібітори СК2 – похідні тієно[2,3-d]піримідин-4-ілтіо карбонової кислоти. K_i найактивнішого інгібітора становило 40 nM. Мета цієї роботи – розробка 4-аміно-тієно[2,3-d]піримідинів як нових ефективних інгібіторів протеїнкінази СК2. Нами було синтезовано 40 сполук похідних 4-аміно-тієно[2,3-d]піримідину. На перших етапах ми отримували заміщені 2-аміно-3-карбетокситієфени за реакцією Гевальда, далі шляхом конденсації з формамідом та взаємодією з п'ятихлористим фосфором було синтезовано низку 4-хлоро-тієно[2,3-d]піримідинів. Кінцеві сполуки одержували заміщенням хлору на аміногрупу відповідної амінокислоти.

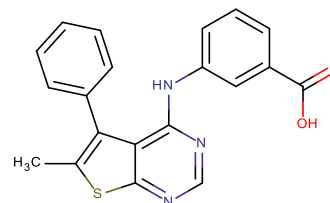
Біохімічне тестування показало, що сполуки NHTP23, NHTP25 та NHTP33 інгібують активність протеїнкінази СК2 у наномолярних концентраціях. Проведене дослідження кінетичних властивостей цих сполук довело АТФ-конкурентний тип інгібування СК2.



NHTP23
 $IC_{50}=10$ nM
 $K_i=4,5$ nM



NHTP25
 $IC_{50}=65$ nM
 $K_i=12,7$ nM



NHTP33
 $IC_{50}=8$ nM
 $K_i=4$ nM

Селективність інгібіторів досліджували в реакціях *in vitro* з протеїнкіназами Aurora A, СК2, JNK3, FGFR1, HGFR1, Tie2.

Інгібітор	Залишкові активності протеїнкіназ, %							
	СК2	ASK1	JNK3	FGFR1	c-Met	Aurora A	Tie2	ROCK1
NHTP23	1,14 %	122 %	85,7 %	60,5 %	53,7 %	36,2 %	109 %	105,8 %
NHTP25	1,51 %	122 %	89,5 %	78,9 %	71,5 %	38,9 %	119,7 %	88,6 %
NHTP33	0,91 %	112 %	70,3 %	73,9 %	87,2 %	15,3 %	84,2 %	101,5 %

Уперше знайдено інгібітори протеїнкінази СК2 серед похідних 4-аміно-тієно[2,3-d]піримідину. Найактивніші сполуки NHTP23, NHTP25 і NHTP33 мали константи інгібування 4,5, 12,7 та 4 nM відповідно. З огляду на отримані результати ці сполуки можна вважати перспективними для подальшої розробки лікарських засобів на їх основі.

МУЛЬТИКОМПОНЕНТНИЙ СИНТЕЗ НОВИХ ТІОПІРАН-1,1-ДИОКСИДНИХ ПОХІДНИХ

Крещик С.В.¹, Горак Ю.І.², Пальчиков В.О.¹

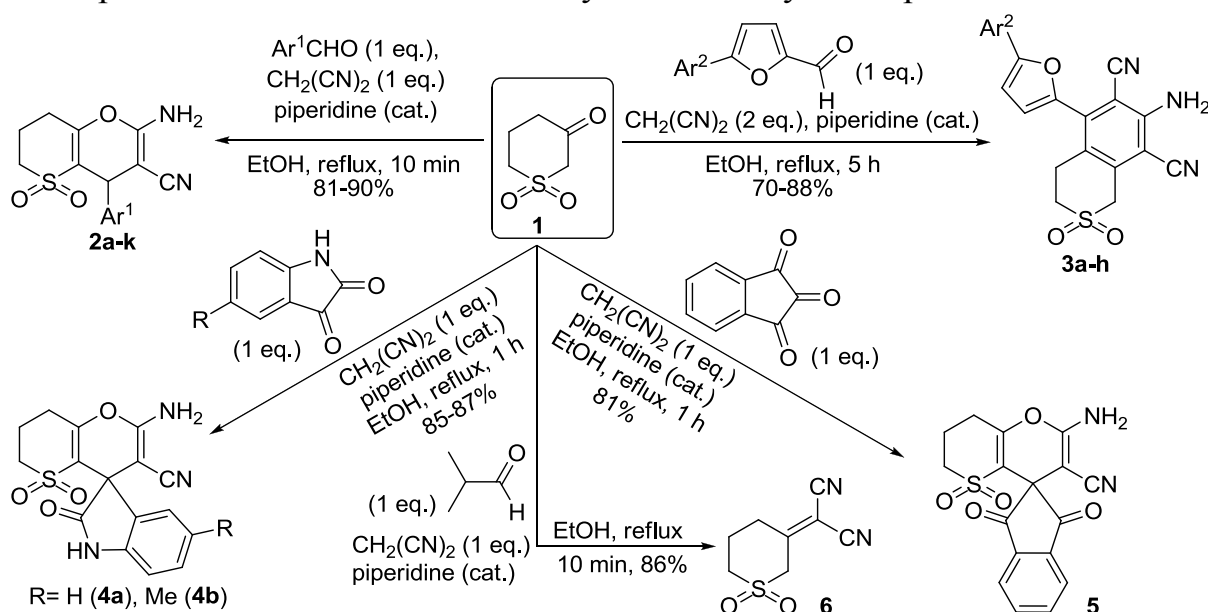
*Дніпропетровський національний університет ім. Олеся Гончара
49010, Дніпропетровськ, пр. Гагаріна 72.*

Львівський національний університет ім. Івана Франка

E-mail: k-sergey@i.ua

Враховуючи високий синтетичний потенціал β -кетосульфонів в реакціях конденсації [*J. Sulfur Chem.* **2014**, 35, 188], їх доступність та різноманітну біологічну активність багатьох похідних, нами досліджено різні варіанти трьохкомпонентних реакцій 3-кето-тетрагідро-2*H*-тіопіран-1,1-діоксиду **1** з малонодинітрилом та карбонільними похідними.

Встановлено, що реакція кетону **1** з ароматичними альдегідами та малонодинітрилом у співвідношенні 1:1:1 дає сполуки **2a-k**, а використання реагентів у співвідношенні 1:1:2 призводить до відповідних амінодинітрилів **3a-h**. Ізатінові та інденові похідні прогнозовано утворюють нові спіросполуки **4a-b**, **5**. При заміні ароматичного альдегіду на аліфатичний (ізобутиральдегід) реакція зупиняється на стадії утворення динітрилу **6**. В роботі обговорено особливості хімічної поведінки кетону **1** та запропоновано схеми механізмів усіх досліджуваних реакцій.



$\text{Ar}^1 = \text{Ph}$ (**a**), 3- $\text{NO}_2\text{C}_6\text{H}_4$ (**b**), 4- $\text{NO}_2\text{C}_6\text{H}_4$ (**c**), 4- MeOC_6H_4 (**d**), 4- FC_6H_4 (**e**), 3,4-(MeO) $_2\text{C}_6\text{H}_3$ (**f**), 2- Cl -6- FC_6H_3 (**g**), 2,6- $\text{Cl}_2\text{C}_6\text{H}_3$ (**h**), 2,6- $\text{F}_2\text{C}_6\text{H}_3$ (**i**), 2-furyl (**k**)
 $\text{Ar}^2 =$ 4- ClC_6H_4 (**a**), 2,4- $\text{Cl}_2\text{C}_6\text{H}_3$ (**b**), 4- $\text{NO}_2\text{C}_6\text{H}_4$ (**c**), 2- $\text{NO}_2\text{C}_6\text{H}_4$ (**d**), 2- NO_2 -4- MeC_6H_3 (**e**), 4- BrC_6H_4 (**f**), 4- $\text{CO}_2\text{HC}_6\text{H}_4$ (**g**), 4- $\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_4$ (**h**)

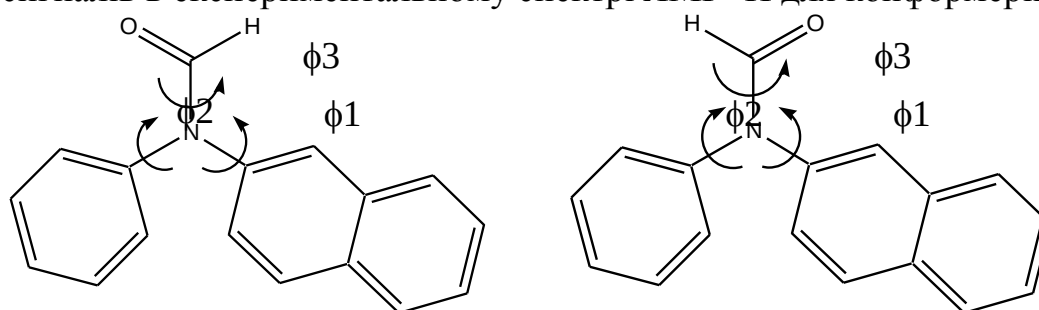
Структуру цільових сполук встановлювали та вивчали використовуючи інфрачервону спектроскопію (ІЧ), LCMS-аналіз та ядерний магнітний резонанс (ЯМР), включаючи методи COSY, NOESY, HSQC та HMBC.

ТЕОРЕТИЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ КОНФОРМАЦІЙНИХ ТА МАГНІТНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ N-(2-НАФТИЛ)-N-ФЕНІЛ-ФОРМАМІДА

Кузьменко О., Капуста К.

*Дніпропетровський національний університет ім. Олеся Гончара
49010, Дніпропетровськ, пр. Гагаріна 72*

У випадку коли можливе вільне обертання груп або фрагментів в молекулі експериментальний спектр ЯМР може показати усереднене значення величин хімічних зсувів. Теоретичне моделювання спектрів таких молекул потребує дослідження їх конформаційних властивостей та розрахунків заселеності конформерів. В даній роботі проведено квантово-хімічне дослідження магнітних властивостей молекули N-(2-нафтил)-N-фенілформаміда з урахуванням внеску енергетично вигідних конформерів. В молекулі N-(2-нафтил)-N-фенілформаміда можливе обертання навколо одинарних зв'язків, що зумовлює зміну торсійних кутів ϕ_1 , ϕ_2 та ϕ_3 . Згідно розрахунків, обертання ароматичних фрагментів відбувається зі значенням активаційного бар'єру 11.29-23.29 кДж/моль. На противагу цьому, енергія активації для обертання карбонільної групи має значення 72.41 кДж/моль. Таким чином загальний процес конформаційного перетворення може бути розділений на швидке обертання ароматичних кілець та ускладнене обертання карбонільної групи, що узгоджується з наявністю двох наборів сигналів в експериментальному спектрі ЯМР ^1H для конформерів 1 та 2.



Для конформаційного аналізу була просканована поверхня потенційної енергії та розрахована заселеність кожної конформації за формулою Больцмана. Для подальшого розрахунку тензорів ядерного магнітного екранування було відібрано певну кількість конформацій, які мали заселеність більшу за 0,5 %. Розрахунки були виконані за теорією функціоналу густини (функціонал BP86) з використанням базисних наборів 6-31G(d), 6-31G^{##} та STO^{##}-3G, вплив розчинника (дейтерохлороформ) враховувався в наближенні PCM.

Розраховані за наведеною методикою величини хімічних зсувів ядер ^1H добре узгоджуються з експериментальними даними.

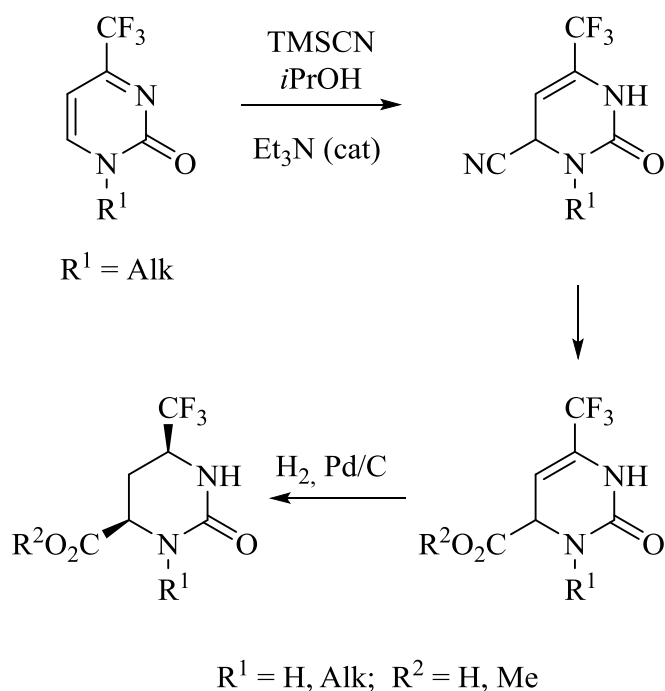
*Робота виконана під керівництвом проф. Оковитого С.І. та доц. Коптевої С.Д.

РЕГІОСЕЛЕКТИВНА ФУНКЦІОНАЛІЗАЦІЯ 4-ТРИФТОРМЕТИЛПІРИМІДИНІВ ДЛЯ СИНТЕЗУ НОВИХ ФТОРОВАНИХ БІЛДИНГ БЛОКІВ

Курганська О.О., Сукач В.А., Ткачук В.М., Вовк М.В.

*НАН Інститут органічної хімії, 02660, м. Київ, вул. Мурманська, 5;
kurganskaya01@gmail.com*

4-(Трифторметил)піримідин-2-(1H)-они реагують з триметилсилілціанідом в присутності третинного аміна, що виступає в якості каталізатора, для забезпечення утворення 1,4-спряженого адукту гідроціанування по Міхаелю у 3,6-положеннях. Отримані таким чином 2-оксо-6-(трифторметил)-1,2,3,4-тетрагідропіримідин-4-карбонітрили були використані для синтезу нових аналогів трифторметильованої 4,5-дигідрооротової кислоти та їх естерів як у рацемічній, так і в енантімерно чистій формах за допомогою хірального підходу. Для цієї мети ми використовували препаративно зручну ціано-групу через її здатність перетворюватись в естерну або карбоксильну групи, з подальшим діастереоселективним гідруванням ендоциклічного зв'язку C=C в м'яких умовах.



Виявлено, що ортогональна внутрішньомолекулярна C–F $\cdots$ C=O взаємодія між атомом фтору групи CF₃ і атомом вуглецю естерної групи, що спостерігається в кристалічному стані, може стабілізувати просторово несприятливу конформацію молекули метил 2-оксо-6-(трифторметил)-гексагідро-піримідин-4-карбонової кислоти з аксіально-орієнтованими замісниками.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ N-(4-ГИДРОКСИФЕНИЛ)СЕМИКАРБАЗИДОВ С АЦИЛ- И АРИЛСУЛЬФОНИЛ ХЛОРИДАМИ

Лысенко Е.Н., Коновалова С.А., Авдеенко А.П.

Донбасская государственная машиностроительная академия, г.

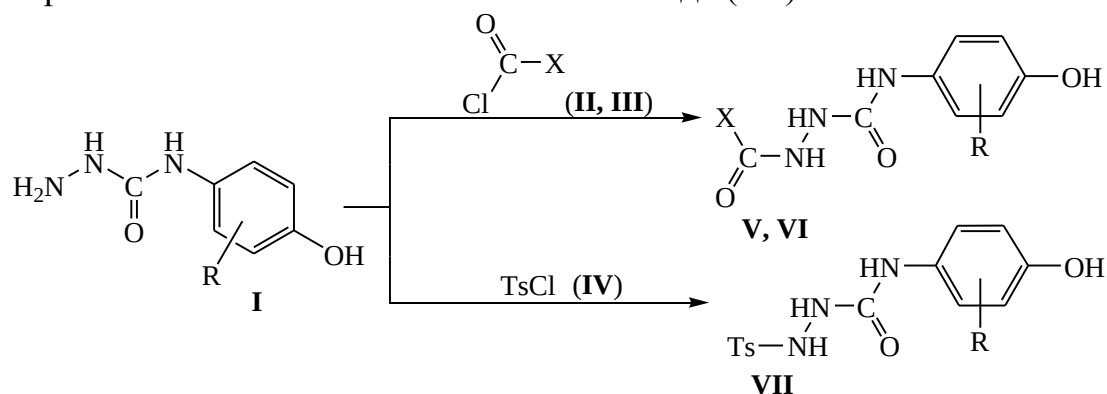
Краматорск

chimist@dgma.donetsk.ua

Гетероциклические соединения находят широкое применение вследствие активного воздействия на биологические системы. Поэтому актуальной является разработка простых и доступных методов их синтеза. В качестве синтонов при синтезе азотсодержащих гетероциклов широко используются производные семикарбазида.

В настоящей работе производные семикарбазида получены на основе 4-(4-гидроксифенил)семикарбазидов **I** и хлорангидридов уксусной, бензойной и 4-толилсульфоновой кислот **II–IV**. 1-Ацетил-4-(4-гидроксифенил)семикарбазида **V** и 1-бензоил-4-(4-гидроксифенил)семикарбазида **VI** получали при взаимодействии 4-(4-гидроксифенил)семикарбазидов **I** с ацетилхлоридом **II** и бензоилхлоридом **III**, соответственно, в среде осушенного ацетонитрила и эквимольного количества триэтиламина при комнатной температуре и перемешивании в течение 30 минут. Раствор упаривали и осаждали водой. Образовавшийся продукт не требовал перекристаллизации.

4-(4-Гидроксифенил)-1-тозилсемикарбазида **VII** синтезировали в результате реакции 4-(4-гидроксифенил)семикарбазидов **I** и 4-толилсульфохлаорида **IV** в осушенном метаноле при комнатной температуре и перемешивании в течение двух часов. Раствор упаривали и осаждали водой. Образовавшийся осадок отфильтровывали, перекристаллизовывали из смеси метанол–вода (1:1).



R=2,6-(Me)₂, 3,5-(Me)₂; X=Me (**II**, **V**), Ph (**III**, **VI**).

Строение производных 4-(4-гидроксифенил)семикарбазида **V**, **VI**, **VII** доказано на основании данных ЯМР ¹H, ИК-спектров и элементного анализа. Таким образом, в результате эксперимента подобраны оптимальные условия синтеза производных семикарбазида.

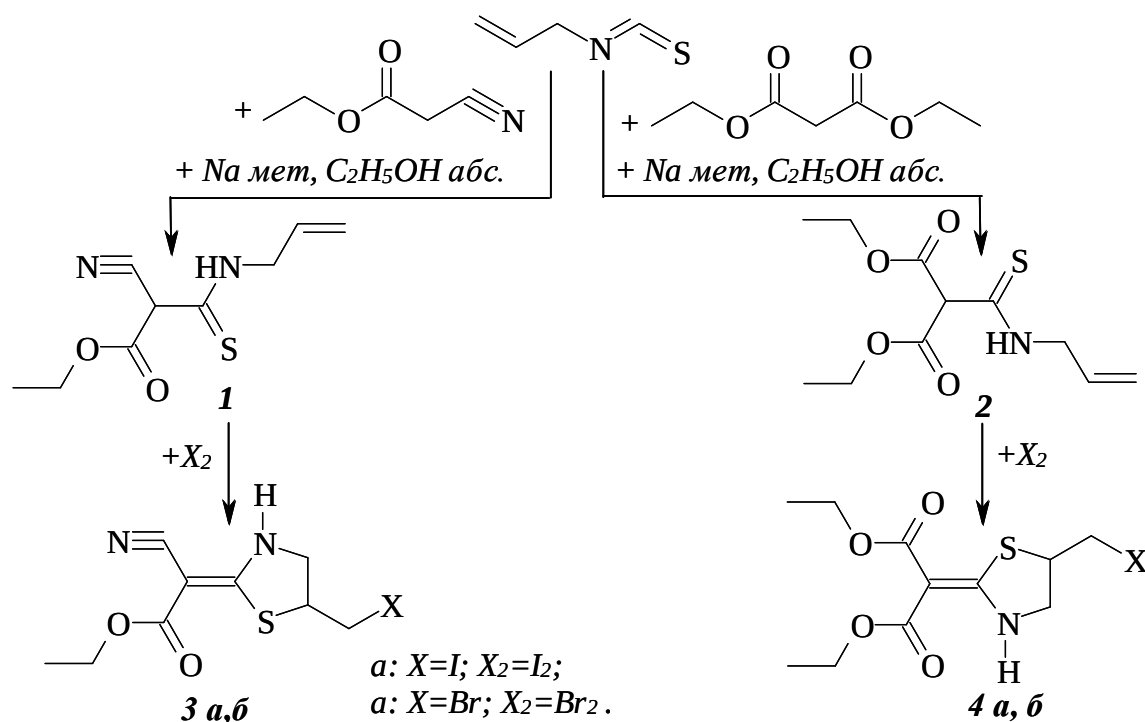
ЕЛЕКТРОФІЛЬНА ВНУТРІШНЬОМОЛЕКУЛЯРНА ЦИКЛІЗАЦІЯ ЕТИЛ-3-(АЛІЛАМІНО)-2-ЦІАНО-3-ТІОКСОПРОПАНОАТУ ТА ДІЕТИЛ-2-(АЛІЛКАРБАМОТІОЇЛ)-ПРОПАНДІОАТУ ПІД ДІЄЮ ГАЛОГЕНІВ

Літвінчук М.Б.¹, Сливка Н.Ю.¹, Бентя А.В.², Вовк М.В.²

¹*Східноєвропейський національний університет ім. Лесі Українки, пр. Волі, 13, 43025 Луцьк, Україна*

²*Інститут органічної хімії НАН України, вул. Мурманська 5, 02660 Київ, Україна; e-mail: mari4kalit@gmail.com*

Похідні тiazолідинів завдяки своїй різноманітній біологічній дії, зокрема протибактеріальній, протигрибковій, антипроліферативній, протизапальній, протималярійній, гербіцидній, протитуберкульозній, протираковій, є перспективними попередниками для синтезу нових біоактивних сполук. У даному повідомленні показана можливість використання N-алілзаміщених пропаноатів як перспективних реагентів для подальшої електрофільної циклізації.



Ключові об'єкти дослідження, N-алілзаміщені похідні **1** та **2** отримані конденсацією ціанооцтового та діетилмалонового естерів із алілізотіоціанатом у присутності натрій етилату.

Сполуки **1** та **2** під дією галогенів (Br₂ або I₂ в CHCl₃) зазнають внутрішньомолекулярної циклізації з утворенням похідних тiazолідину **3 а, б** та **4 а, б**. Отримані результати засвідчують, що циклізація N-алілзаміщених похідних пропаноатів під дією вивчених реагентів відбувається у відповідності до правила Марковнікова.

ПОШУК ПОТЕНЦІЙНИХ АНТИВІРУСНИХ СПОЛУК В РЯДУ МОДИФІКОВАНИХ АЗАКРАУН-ЕТЕРІВ

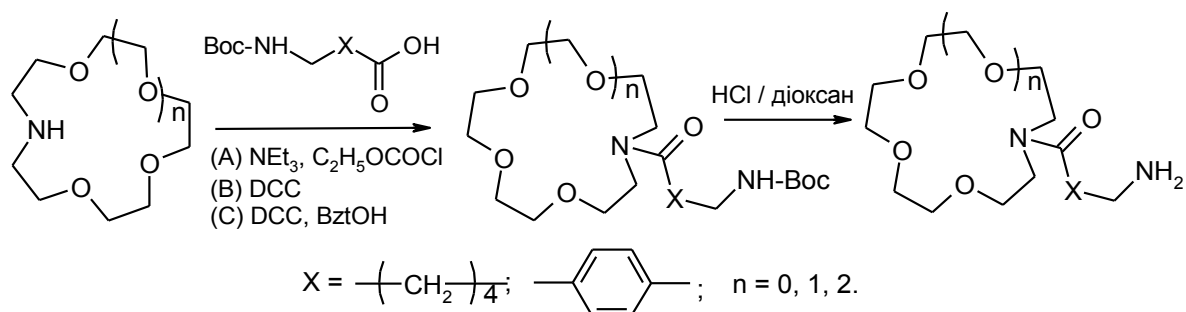
Лоскутова Ю. О.^{1,2}

¹Фізико-хімічний інститут ім. О. В. Богатського НАН України,
Люстдорфська дорога, 86, 65080, Одеса, Україна

²Одеський національний університет ім. І. І. Мечникова, хімічний
факультет, вул. Єлисаветинська, 14, 65082, Одеса, Україна
e-mail: karnauchovay@mail.ru

Однією з найбільш цікавих характеристик синтетичних рецепторів (краун-етерів, азакраун-етерів, криптандів та каліксаренів), яка має біологічне значення, є їх здатність переносити іони металів і деякі органічні молекули (аміни, амінокислоти) через біологічні мембрани. У зв'язку з цим азакраун-етери, які мають в боковому ланцюгу фармакофорні групи, викликають особливу зацікавленість, оскільки, активність «традиційних» біологічно-активних сполук може бути значно посилена завдяки їх більш легкому проникненню через гемато-енцефалічний бар'єр.

Тому, з метою пошуку нових ефективних антивірусних сполук нами синтезовано моноазакраун-етери, досліджено їх взаємодію з *n*-амінометилбензойною та ϵ -амінокапроною кислотами та вивчено протигрипозну активність отриманих сполук.



В доповіді наведені умови синтезу вихідних моноазакраун-етерів, способи їх ацилювання – метод змішаних ангідридів (А), карбодіімідний (В) і карбодіімідний із застосуванням N-гідроксибензотріазолу (С). Обговорюються дані з антивірусної активності отриманих сполук.

Структура синтезованих сполук підтверджена методами ПМР-спектроскопії та мас-спектрометрії БША. Протигрипозна активність по відношенню до вірусу грипу H3N2 вивчена *in vitro* на культурі тканини хоріон-алантоїсних оболонок.

* Робота виконана під керівництвом к.х.н. Баска С. С.¹

ОСОБЛИВОСТІ СИНТЕЗУ (3H-ХІНАЗОЛІН-4-ІЛІДЕН)ГІДРАЗИДІВ

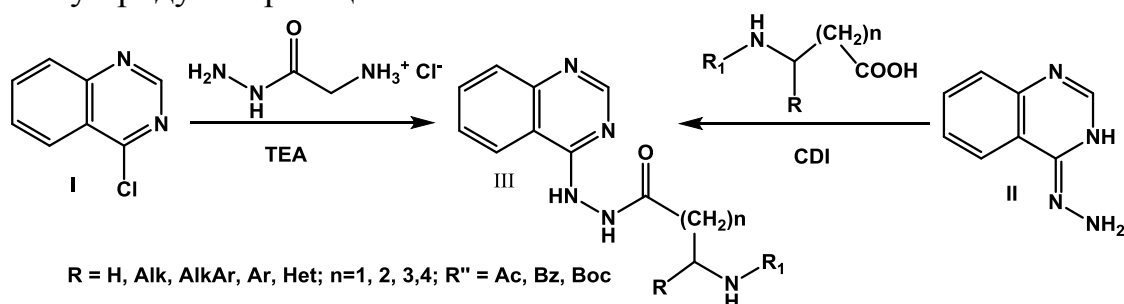
З АМІНОКИСЛОТНИМИ ЗАЛИШКАМИ ТА ЇХ АНТИБАКТЕРІАЛЬНА ДІЯ

Мартиненко Ю.В., Казунін М.С., Коваленко С.І.

*Запорізький державний медичний університет, 69035 м. Запоріжжя
пр. Маяковського, 26*

Сучасна стратегія спрямованого синтезу потенційних лікарських засобів передбачає вибір базового структурного блоку для пошуку високоактивних молекул. В цьому плані, на нашу думку, привертають увагу (3H-хіназолін-4-іліден)гідразида з різноплановими амінокислотними залишками. Комбінування в одній структурі зазначених фармакофорних фрагментів через «лінкерні» алкіл-(алкіларил-, арил-, алкгетарил-)-групи сполучених декількома амідними зв'язками може бути цікавим з точки зору вивчення біологічної активності.

Реалізації мети дослідження, а саме синтез (3H-хіназолін-4-іліден)-гідразидів аміноалкіл-(алкіларил-, арил-, алкгетарил-)карбонових кислот, вирішувалась за двома напрямками. Перший, полягав у взаємодії 4-хлорохіназоліну (I) з солянокислими гідразидами амінокислот в присутності триетиламіну. Проте, він є малоефективним за рядом причин: невисока препаративна доступність гідразидів, наявність декількох реакційних центрів у молекулі, яка приводить до утворення суміші продуктів. Другий метод, оснований на взаємодії 4-гідразинохіназоліну (II) з N-ацил-(бензоїл-, третбутоксикарбоніл-)-захищеними амінокислотами в карбонілдіімідазольному синтезі, є виправданим з огляду на виходи та чистоту продуктів реакції.



Будову синтезованих сполук підтверджено за допомогою даних хроматомас-спектрометрії та ^1H ЯМР-спектроскопії.

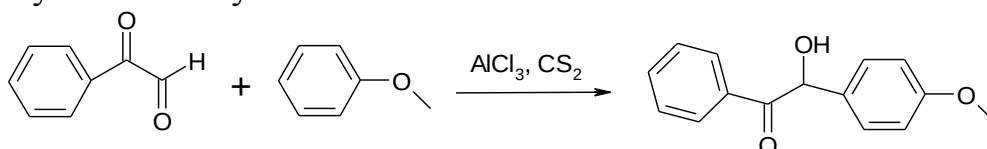
Первинний фармакологічний скринінг отриманих сполук, показав наявність у них протимікробної та протигрибкової дії. Синтезовані сполуки, згідно прогнозу PASS, представляють певний інтерес для подальшого вивчення їх нейротропної активності.

ГЕМІНАЛЬНІ ДІГІДРОКСИКЕТОНИ ЯК ПЕРСПЕКТИВНІ ЕЛЕКТРОФІЛНІ РЕАГЕНТИ

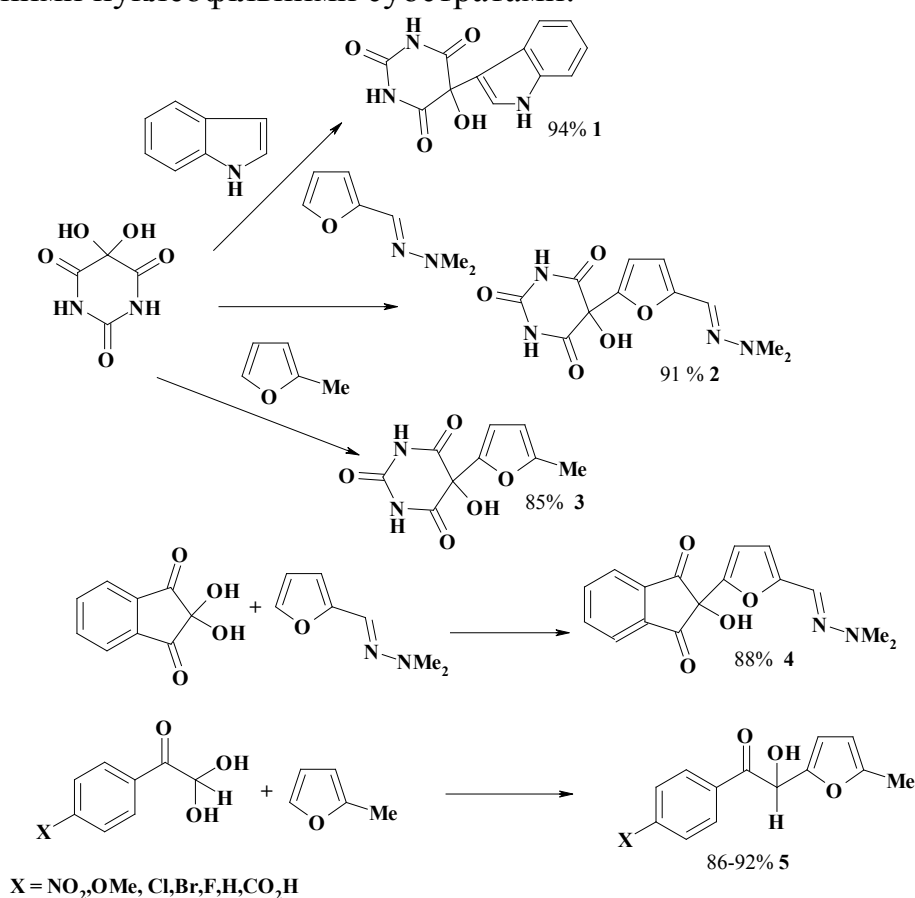
Нагурна А.С.¹ Аманова А.Б.¹

¹ Дніпропетровський національний університет ім. Олеся Гончара
carbonium@ua.fm

Електрофільні властивості арилглюксалів, за літературними даними є достатньо слабкими [1] Взаємодія фенолглюксалу з анізолом можлива лише за умов каталізу L-кислотами.



В той самий час реакційна здатність гідратів арилглюксалів навіть не розглядається. Нами показано, що арилглюксальгідрати, аллоксангідрат, які можна розглядати як гемінальні α -дігидроксикетони, є досить ефективними електрофільними реагентами, які здатні реагувати активованими нуклеофільними субстратами.



1. Lombardino, J.G.; Wiseman, E.H.; JMC MAR; Journal of Medicinal Chemistry; English; 17; 1974; 1182 - 1188;

СИНТЕЗ ПОХІДНИХ 4'-КАРБОКСИ- ТА 4'-ГІДРОКСИФЛАВОНІВ І ОЦІНКА ЇХ БІОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ

Приходько А.О., Остринська О.В., Бджола В.Г. та Ярмолук С.М.

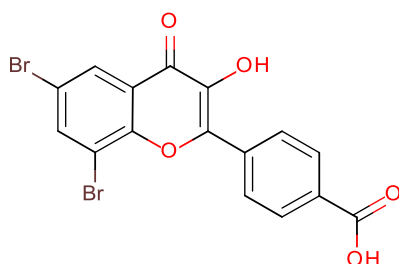
Інститут молекулярної біології і генетики НАН України

вул. Академіка Заболотного, 150, м. Київ, 03680, Україна

e-mail: o.v.sovetova@gmail.com

Хромони – перспективний клас природних сполук, що мають широкий спектр біологічної активності. Для похідних хромонів досліджено антиоксидантну, протизапальну, протипухлинну, протівірусну та протимікробну дії. Вивчено інгібувальну активність на такі класи ферментів, як протеїнкінази, оксидази, глюкозидази і фосфорилази.

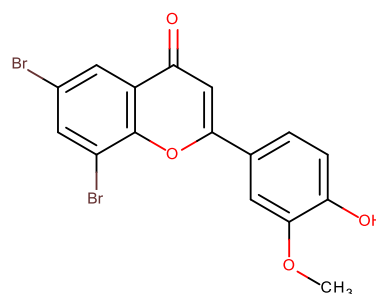
Метою нашої роботи був синтез 4'-карбоксифлавононів та 4'-гідроксифлавононів, їх дослідження як потенційних інгібіторів протеїнкінази CK2. Був проведений рецепторно-орієнтовний віртуальний скринінг комбінаторної бібліотеки сполук. За результатами скринінгу для проведення біологічного тестування було відібрано 62 сполуки похідних 4Н-4-хроменонів. За результатом дослідження *in vitro* було проведено аналіз залежності «хімічна структура – інгібувальна активність» і на його основі запропоновано синтез 45 сполук, який проводили за класичною двостадійною методикою з орто-гідроксиацетофенонів та бензальдегідів. Серед отриманих сполук знайдено два інгібітори протеїнкінази CK2 – FLC26 та FNH79, що мали наномольні значення IC_{50} – 9 та 4 nM відповідно.



FLC26

$IC_{50}=9$ nM

$K_i=1,8$ nM



FNH79

$IC_{50}=4$ nM

$K_i=2,5$ nM

Встановлено, що FLC26 і FNH79 є конкурентними інгібіторами CK2, та розраховано їх константи інгібування. Також проведено дослідження селективності цих сполук на панелі з 8 кіназ (див. табл.).

Інгібітор	Залишкові активності протеїнкіназ (%)							
	CK2	ASK1	FGFR1	Aurora A	Jnk3	Tie2	ROCK1	Met
FLC26	1	101	71	42	102	90	105	31
FNH79	0,8	126	74	55	103	85	89	87

У результаті дослідження нами знайдено похідні 4Н-4-хроменонів – 4'-карбокси- та 4'-гідроксифлавонони, інгібувальна активність яких значно перевищує активність природних сполук цього ж класу (фізетину) щодо протеїнкінази CK2. Знайдені сполуки можуть бути використані як основа для створення лікарських препаратів.

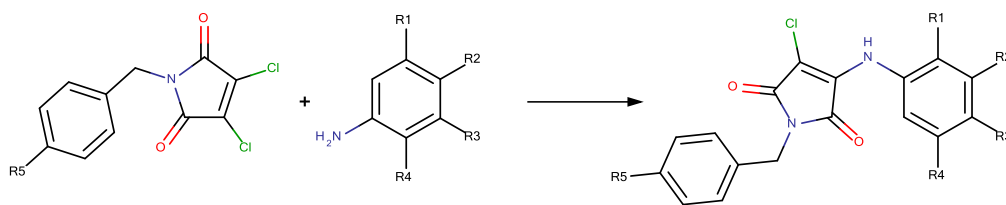
СИНТЕЗ РЯДУ ПОХІДНИХ 1-БЕНЗИЛ-3-ХЛОРО-4-ФЕНІЛАМІНО-2,5-ДИГІДРО-1Н-2,5-ПІРОЛДІОНУ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ЇХ ПРОТИПУХЛИННОЇ ДІЇ

Тарнавський С.С., Протопопов М.В., Остринська О.В., Бджола В.Г. та Ярмолюк С.М.

*Інститут молекулярної біології і генетики НАН України
вул. Академіка Заболотного, 150, м. Київ, 03680, Україна
e-mail: mykola.protopopov@gmail.com*

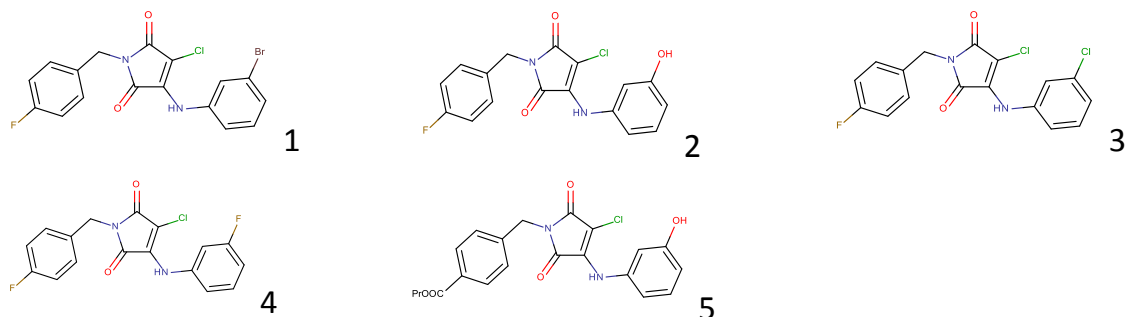
Перспективними сполуками для розробки протипухлинних засобів є похідні малеїміду. У наших попередніх роботах показано, що синтезовані нами похідні малеїміду проявляють цитотоксичну дію на клітинні лінії раку яєчників, молочної залози та легень.

Метою цієї роботи був синтез похідних 1-бензил-3-хлоро-4-феніламіно-2,5-дигідро-1Н-2,5-піролдіону та їх тестування на протипухлинну активність. Для оптимізації загальної структури 1-бензил-3-хлоро-4-феніламіно-2,5-дигідро-1Н-2,5-піролдіону нами було синтезовано 20 похідних з різними замісниками у фенільному та аніліновому кільцях. Загальна схема синтезу:



Біологічну активність 20 синтезованих похідних визначали на 6 пухлинних лініях клітин людини в діапазоні концентрацій від 10^{-5} до 10^{-9} М.

Найкращі результати показали 5 сполук, у яких замісник R1= галоген, або гідроксил, а R5=фтор, або карбоксиметил. Інші замісники в аніліновому залишку, а також замісник R5=CH₃O значно зменшували цитотоксичну активність. Сполуки 1, 3, 4 і 5 знижували загальну життєздатність ракових клітин на 50 % в діапазоні концентрацій від $1 \cdot 10^{-5}$ до $5 \cdot 10^{-6}$ М. Проте сполуки 1, 2, 3 та 5 проявляли активність і в найнижчих із досліджуваних концентрацій – $1 \cdot 10^{-9}$ М.



Отже, у ході дослідження знайдено нові похідні 1-бензил-3-хлоро-4-феніламіно-2,5-дигідро-1Н-2,5-піролдіону, що проявляють цитотоксичну дію на лініях пухлинних клітин людини: Hs683 та 373MG – пухлини мозку, HCT-15 та LoVo – рак кишечника, A549 – рак легень, MCF-7 – рак молочної залози. Сполуки 1-5 обрано для подальшого дослідження та оптимізації.

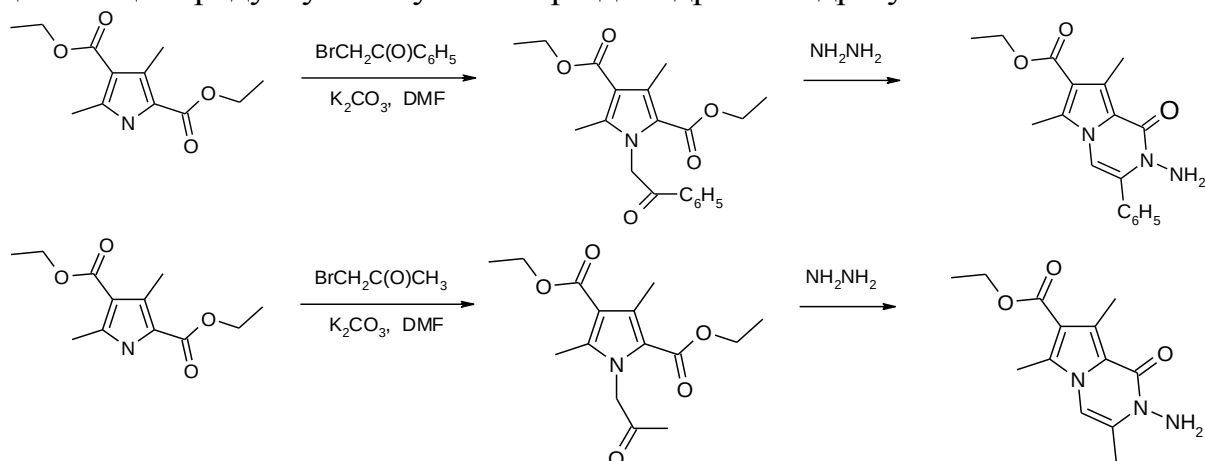
РЕАКЦІЇ ЦИКЛІЗАЦІЇ НА ОСНОВІ 2,4-ДИМЕТИЛ-3,5-ДИКАРБОЕТОКСИ-1Н-ПІРОЛУ

Рибакова І.Є.

*Дніпропетровський національний університет ім. О.Гончара,
м. Дніпропетровськ, вул. Казакова, 22
rybakova1309@mail.ua*

Піролопіразини і їх гідрогенізовані аналоги привертають велику увагу хіміків та біологів в якості потенційних біологічно активних речовин. Інтенсивне вивчення заміщених піролодієнопіразинів показали їх високу протипухлинну активність. Алкалоїди, такі як Brevianamide, Barretin, Cambines, та ін. містять фрагменти заміщених гідрогенізованих піролопіразинів. Багато з цих сполук проявляють антимікробну та противірусну активність, в тому числі активні проти вірусу імунодефіциту людини. Конкретні фітотоксини і селективні гербіциди також знайдені серед цих речовин. Але до останнього часу цей клас гетероциклів залишається слабо вивченим, ймовірно, через обмежену кількість методів їх синтезу.

В даній роботі запропоновано двохстадійний синтез нових раніше невідомих похідних піролопіразинів на основі доступного 2,4-диметил-3,5-дикарбоетокси-1Н-піролу. На першій стадії - проведено алкілювання 2,4-диметил-3,5-дикарбоетокси-1Н-піролу бромацетофеноном та бромацетоном у присутності K_2CO_3 в DMF при $60^\circ C$. Друга стадія – циклізація продукту алкілювання при дії гідразин гідрату.



*Робота виконана під керівництвом к.х.н., доц.. Петухової О.І.

ІДЕНТИФІКАЦІЯ ТЕТРАЗОЛО[1,5-А]ХІНОЛІН-4-КАРБОНОВИХ КИСЛОТ ЯК НОВОГО КЛАСУ ІНГІБІТОРІВ ПРОТЕЇНКІНАЗИ СК2.

А.Р. Синюгін, М.О. Чеканов та Ярмолук С.М.

Інститут молекулярної біології і генетики НАН України

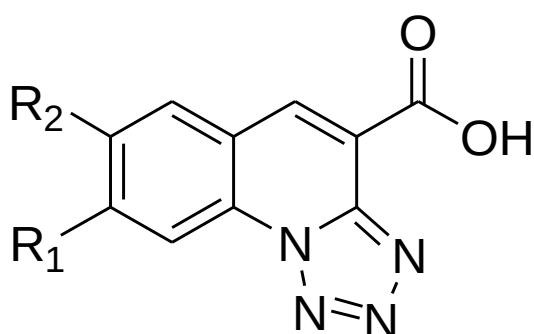
вул. Академіка Заболотного, 150, м. Київ, 03680, Україна

e-mail: asinugin@gmail.com

Протеїнкіназа СК2 належить до загальних регуляторів апоптозу та бере участь у стресових сигнальних шляхах клітини. Здатність фосфорилувати низку субстратів, які задіяні у процесі онкогенезу та підвищена активність цього ензиму у клітинах, які інтенсивно діляться, дозволяє розглядати її як суттєвий фактор пухлиноутворення. Отже протеїнкіназа СК2 є перспективною молекулярною мішенню, а її високоактивні та селективні інгібітори можуть бути основою для розробки лікарських засобів.

Використовуючи методологію раціонального драг-дизайну (rational drug design), ми вперше провели пошук нових інгібіторів протеїнкінази СК2 серед 3-заміщених похідних хінолін-2-ону [1].

За допомогою *in vitro* тестування було знайдено 4 інгібітори СК2 зі значенням IC_{50} у межах 20-50 μM . Для покращення інгібувальної активності сполук-хітів (hit compounds) було проведено додаткову хімічну оптимізацію та синтезовано похідні, що містять конденсований тетразольний цикл в 1, 2 положенні хінолінового фрагменту. Метою оптимізації було вивчення впливу додаткового гетероциклу, який би збільшив стабільність комплексу «інгібітор-СК2» шляхом утворення стекинг взаємодії з Phe113 в АТФ-акцепторній кишені СК2.



№	R ₁	R ₂	IC ₅₀ (μM)
1	H	-OCH ₃	>30
2	-OCH ₃	H	1.3
3	-OCH ₃	-OCH ₃	>30
4	H	-OPh	>30
5	Br	-OCH ₃	>30
6	H	Br	>30
7	Br	H	12.6
8	H	Ph	15.1
9	H	3-MeO-Ph-	13.2
10	H	3-Cl-Ph-	2.5

Найкращим інгібітором виявилася **8-метокси[1,5-а]хінолін-4-карбонова кислота 2** із значенням IC_{50} 1.3 μM .

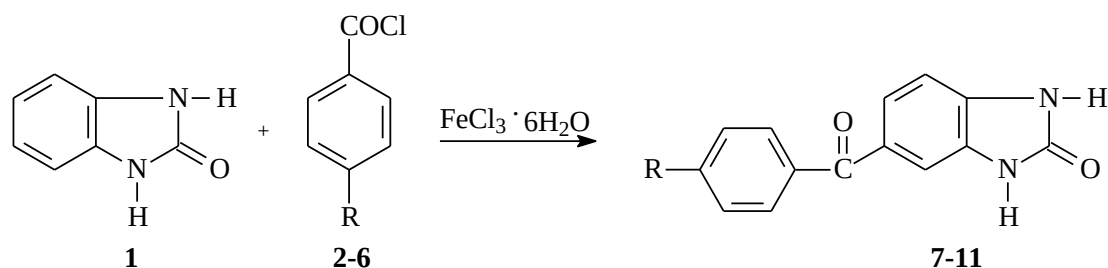
1. Syniugin A.R., Chekanov M.O., Nyporko O.Yu., Ostrynska O.V., Yarmoluk S.M. // *Ukrainica Bioorganica Acta*. – 2012. – Т. 10, № 1. – С. 51-60.

КАТАЛИТИЧЕСКИЕ АЦИЛИРОВАНИЕ БЕНЗИМИДАЗОЛИН-2-ОНА ХЛОРАНГИДРИДАМИ АРОМАТИЧЕСКИХ КИСЛОТ

Бабаджанова Доно Давронбековна, Тахиров Юлдаш Раджабович, Атауллаев Закир Махсудович, Курязов Рустамхон Шоназарович
*Ургенский Государственный университет им Ал-Харезми,
Факультет естественных наук, Ургенч, Узбекистан
E-mail: yuldash_78@mail.ru*

Ранее нами была показана возможность ацилирования бензотиазолин-2-онов [1,2], бензимидазолин-2-онов [3] хлорангидридами ароматических кислот с использованием малых количеств катализаторов в нитробензоле. Однако данные реакции проводятся при температуре 200-210⁰С и отгонка нитробензола очень затруднена, что приводит к осмолению продуктов. Поэтому представлялось интересным осуществить эти реакции и в без растворителя и сопоставить полученные данные.

Реакции бензимидазолин-2-она (**1**) с хлорангидридами ароматических кислот (**2-6**) в присутствии 1•10⁻² молей FeCl₃•6H₂O проводили в без растворителя при температуре 150-160⁰С. В результате реакций синтезированы соответствующие 5(6)-ароилбензимидазолин-2-оны.



2,7 R=H, **3,8** R=CH₃, **4,9** R=OCH₃, **5,10** R=Br, **6,11** R=NO₂;

Выявлены оптимальные условия реакции ацилирования и определена граница применения малого количества катализатора. Как показали наши исследования, реакции проведенные при мольном соотношении реагентов 1:2-6:FeCl₃•6H₂O =1:1,5:1•10⁻² в без растворителя протекают при более низкой температуре (150-160⁰С). По данному методу выходы соединений **7-11** выше, чем проведенных с использованием нитробензола.

Строение синтезированных соединений доказана методами ИК-спектроскопии, масс-спектрометрии. Температура плавления соединений **7-11** идентичны с приведенными в литературах [3], но полученных другим способом.

Литература

1. Мухамедов Н.С., Душамов Д.А., Алиев Н.А., Бобокулов Х.М., Левкович М.Г., Абдуллаев Н.Д. *ХГС*. **2002**, 3, 380.
2. Душамов Д.А., Мухамедов Н.С., Алиев Н.А., Бобокулов Х.М., Левкович М.Г., Абдуллаев Н.Д. *ХГС*. **2002**, 4, 503.
3. У. Х. Якубов, Ю. Р. Тахиров, Д. А. Душамов, Н. С. Мухамедов, *Узб. хим. журн*, 8 (2008).

ЕЛЕКТРОФІЛЬНА ЦИКЛІЗАЦІЯ ПОХІДНИХ 2-АЛІЛТІО-1,3,4-ОКСАДІАЗОЛУ

Тегза А.В., Кривов'яз А.О., Лендел В.Г.

ДВНЗ «Ужгородський національний університет»,

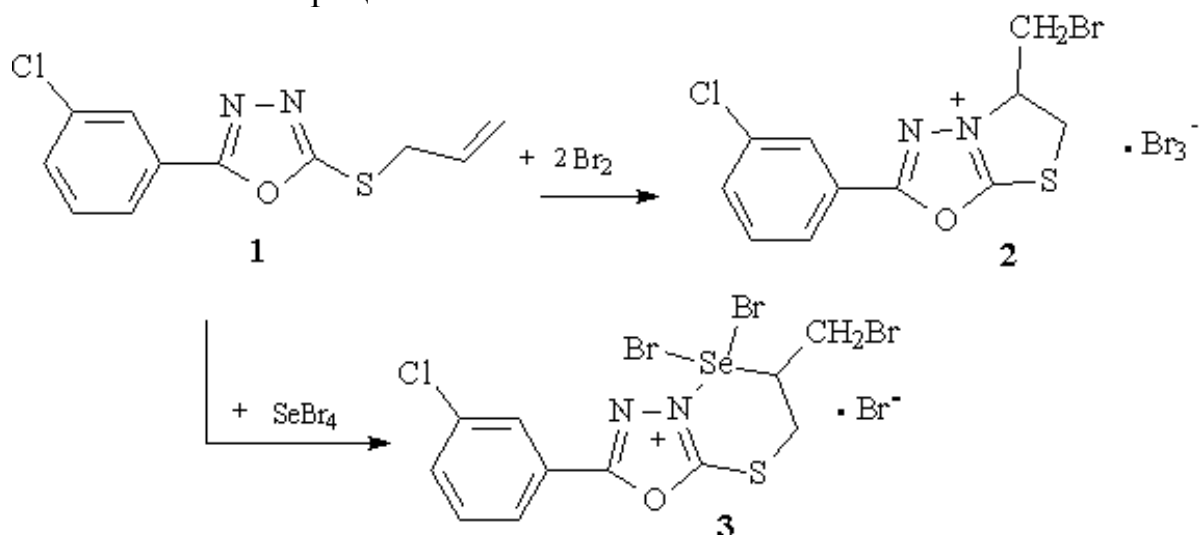
e-mail: tehza_anhelina@mail.ru, 1977andr13@mail.ru м. Ужгород, вул.

Підгірна, 46, Україна

Похідні 2-меркапто-1,3,4-оксадіазолу заслуговують значну увагу хіміків завдяки не тільки прогресом у вивченні різних циклізацій з їх участю, але і їх унікальною здатністю проявляти біологічну активність.

Вивчення реакцій гетероциклізацій з участю ненасичених похідних 2-меркапто-1,3,4-оксадіазолу визначається їх важливим значенням для синтетичної і теоретичної органічної хімії, а також широким спектром практично корисних властивостей їх похідних. В медичній практиці широко використовуються заміщені оксадіазоли у вигляді таких препаратів, як «бексин», «оксоламін», «проксодолол», «ірригор». Унікальність цих сполук пов'язана також з наявністю в їх молекулі кількох реакційних центрів, що дозволяє їм брати участь у численних перетвореннях, з утворенням цікавих за структурою поліфункціональних продуктів.

Дією аліл броміду на калієву сіль похідного 1,3,4-оксадіазолу нами отримано вихідну сполуку **1**, яку далі зациклізували надлишком бромів та тетрабромідом селену. Так, при дії надлишку бромів, в середовищі хлороформу, виділено стійкий продукт **2**. При еквімолярній взаємодії вихідної сполуки **1** з тетрабромідом селену виділено нестійкий селеновмісний гетероцикл **3**.



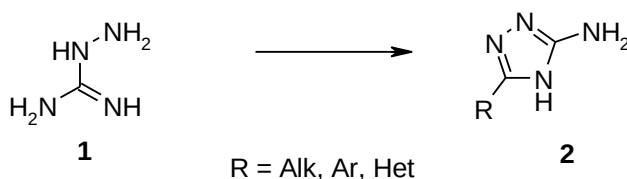
Будову сполук **1-3** підтверджено даними елементного аналізу та ЯМР ^1H спектрами.

ОДЕРЖАННЯ 1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-АМІНІВ З АМІНОГУАНІДИНІВ

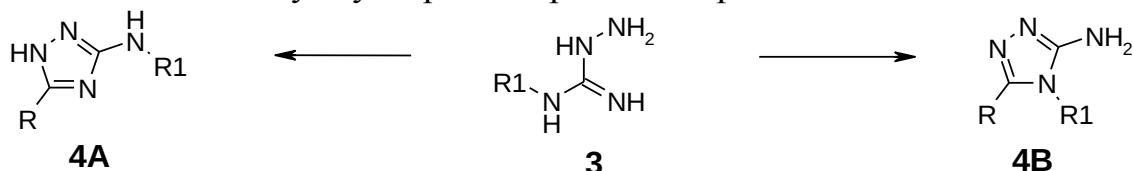
Ходаченко О.М.

*Чернігівський національний педагогічний університет імені Т.Г. Шевченка
м. Чернігів, вул. Гетьмана Полуботка 53*

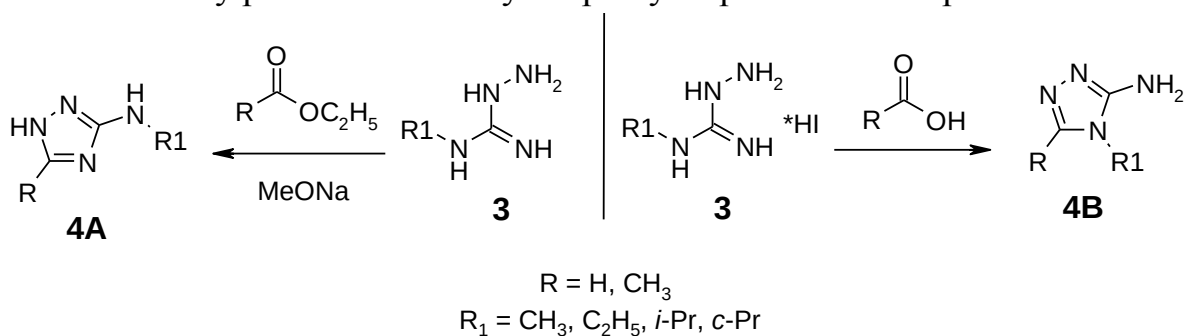
Синтез 5-заміщених 1,2,4-триазол-3-амінів **2** на основі аміногуанідину **1** відомий давно і досить детально описаний в науковій літературі. Циклізацію найчастіше проводять за допомогою відповідних карбонових кислот або їх похідних – естерів, хлорангідридів, іміноестерів, амідинів тощо.



Труднощі виникають при використанні N-заміщених аміногуанідинів типу **3**. Такі речовини, вступаючи в реакцію з карбоновими кислотами або їх похідними можуть утворювати різні ізомери **4A** або **4B**.



На ряді алкілзаміщених аміногуанідинів нами було показано, що напрямок реакції циклізації залежить від рН реакційної суміші та природи циклізуючого агента. Так при реакції гідройодиду відповідного аміногуанідину в мурашиній або оцтовій кислоті утворюється ізомер **B**. А при конденсації аміногуанідинів з етилформіатом або етилацетатом в метанольному розчині метилату натрію утворюється ізомер **A**.



Структура всіх синтезованих сполук була доведена результатами ПМР-спектроскопії та мас-спектрометрії.

ВЗАЄМОДІЯ 5,6,7,8-ТЕТРАГІДРО[1,2,4]ТРИАЗОЛО[4,3-А]ПІРИДИН-3-ІЛАЦЕТОНІТРИЛУ З АЦИЛЮЮЧИМИ АГЕНТАМИ

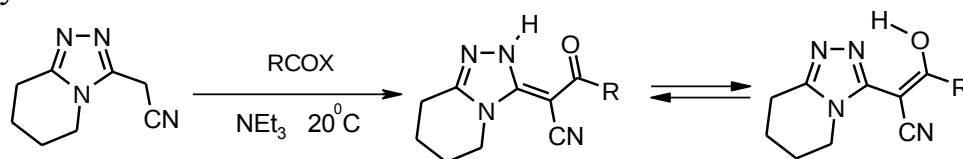
Чередніченко А.С., Капелюха А.О.¹, Макей Ю.М.¹, Макей О.П.

*Чернігівський національний педагогічний університет імені Т.Г. Шевченка,
вул. Гетьмана Полуботка, 53*

¹*Чернігівський колегіум № 11, проспект Миру, 137
mk-alex@mail.ru*

У переважній більшості описаних у літературі випадків взаємодії гетарилацетонітрилів з ацилагентами були виділені продукти ацилювання по атому Карбону активної метиленової групи. Взаємодія ацилюючих агентів з 5,6,7,8-тетрагідро[1,2,4]триазоло[4,3-а]піридин-3-ілацетонітрилом не досліджувалася. Тому нашим завданням було здійснити синтез та дослідити взаємодію вказаного гетарилацетонітрилу з ацилюючими агентами і встановити будову отриманих продуктів.

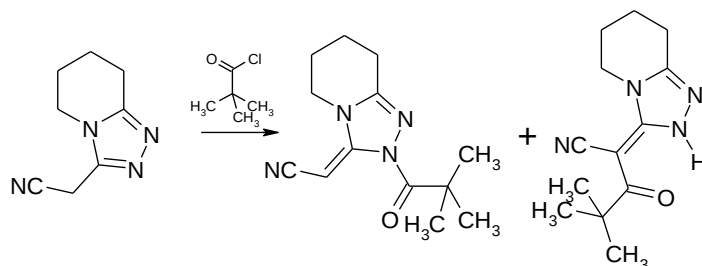
Синтез триазолопіридилацетонітрилу було здійснено шляхом взаємодії валеролактимного етеру з гідразидом ціаноцтової кислоти при кип'ятінні у ДМФА. За результатами досліджень взаємодії 5,6,7,8-тетрагідро[1,2,4]триазоло[4,3-а]піридин-3-ілацетонітрилу з ацилюючими агентами було встановлено, що у переважній більшості випадків утворюються продукти реакції по метиленовій групі ацетонітрильного залишку.



X = Cl, RCOO;

R = CH₃, C₆H₅, 4-NO₂C₆H₅, 4-CH₃C₆H₅, 4-ClC₆H₅, 4-CH₃OC₆H₅, 4-FC₆H₅

Лише у випадку взаємодії з хлороангідридом третбутанкарбонової кислоти було отримано суміш продуктів ацилювання атома Нітрогену триазольного циклу та атома Карбону ацетонітрильного залишку.



У спектрі ЯМР ¹H суміші продуктів наявний синглет атома Гідрогену метинової групи при 5.4 м.ч., що є типовим для N-ацилпохідних. Також має місце широкий синглет при 13.9 м.ч., що належить хелатованому протону, спостерігається подвійний набір мультиплетних сигналів при 2.7 та 4.0 м.ч., що відповідають атомам Гідрогену насиченого фрагменту гетероциклу.

ФУНКЦІОНАЛІЗАЦІЯ ТРИАДАМАНТАНУ

Черниш Л.В.

Національний технічний університет України “Київський політехнічний інститут”

*03056, Київ, пр. Перемоги, 37
lesya@xtf.kpi.ua*

Наразі існує тенденція до зменшення розмірів механічних та електронних пристроїв, що привело до зростання уваги до алмазів нанометрових розмірів завдяки їх унікальним властивостям. Алмазні частинки різних розмірів доступні синтетично, однак практичне застосування їх обмежене через неоднорідність форм та розмірів.

Альтернативою промисловим наноалмазам можуть стати природні діамондоїди. Вони являють собою гомогенний матеріал із визначеними фізичними і хімічними властивостями, що відкриває широкі можливості для використання їх у нанoeлектроніці.

Нижчі діамондоїди – адамантан, діамантан та триамантан містяться у нафті у суттєвих кількостях та можуть бути виділені з неї препаративно. Однак селективне виділення вищих, які є сумішами ізомерів, утруднене. Це робить актуальною розробку методів поєднання нижчих діамондоїдів із метою одержання частинок більшого розміру, дозволяючи таким чином регулювати розмір і топологію одержаних олігомерів.

Для використання у нанoeлектроніці необхідні функціональні групи, які забезпечать зв'язок діамондоїдів із різними поверхнями. Бромовання триадамантану (**1**) проведено згідно схеми 1, у результаті був виділений та охарактеризований 1-бромтриадамантан (**2**), тоді як Br-Ad-Ad-Ad-Br (**3**) та Ad-Ad(Br)-Ad (**4**) були отримані у вигляді суміші.

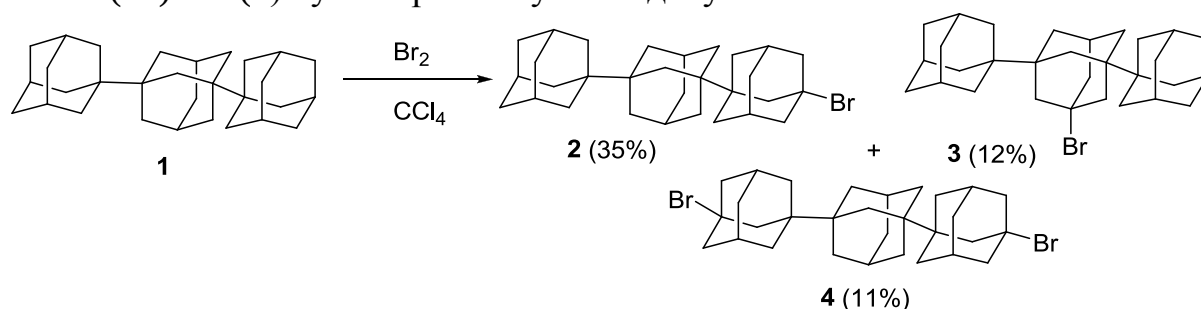


Схема 1. Бромовання триадамантану (**1**).

Структура 1-бромотриадамантану (**2**) підтверджена спектральними методами. У спектрі ЯМР ^{13}C спостерігається 24 сигнали та зсув, характерний для атома вуглецю, заміщеного бромом (72.0 м.д.). У мас-спектрі наявні піки 403, 269, 135 (100%) та 134.

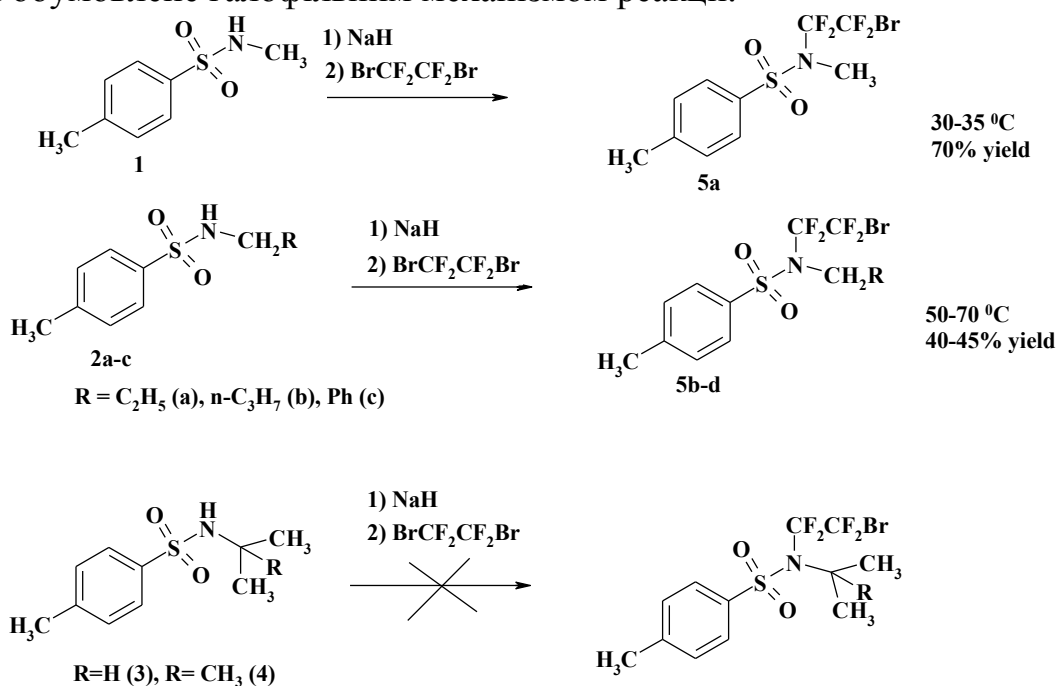
Сполука **2** надалі буде використана для одержання тіолу, який може утворювати самоорганізовані моношари на поверхнях благородних металів.

ВЗАЄМОДІЯ N-АЛКІЛ-*n*-ТОЛУОЛСУЛЬФАМІДІВ З ФРЕОНОМ-114Б2

Алексієнко Ярослава*

Київський національний університет технологій та дизайну, кафедра промислової фармації. Київ, вул. Немировича-Данченка, 2

Досліджено взаємодію натрієвих похідних N-алкіл-*n*-толуолсульфамідів з 1,2-дибромотетрафтороетаном (фреоном-114Б2). Отримано перші гідролітично стійкі нециклічні сполуки з бромотетрафтороетильним фрагментом біля атому азоту. Реакції проводили в розчині диметилформаміду при температурах 30-80 °С. Показано, що N-метил-*n*-толуолсульфамід (**1**) реагує без нагрівання з високим виходом. N-алкіл-*n*-толуолсульфаміди (**2a-c**), що мають нерозгалужений вуглеводневий радикал біля атому азоту реагують при нагріванні та з дещо меншими виходами. N-ізопропіл-*n*-толуолсульфамід (**3**) реагує тільки при кип'ятінні суміші з дуже низьким виходом (2-4%). N-*трет*-Бутил-*n*-толуолсульфамід (**4**) взагалі не реагує в умовах що досліджувалися. В усіх випадках отримано N-бромотетрафтороетил-N-алкіл-*n*-толуолсульфаміди (**5a-d**). У випадку сполуки **5d** спектрально зафіксовано домішку 2,2-дибромотрифтороетильного похідного, що може бути обумовлене галофільним механізмом реакції.



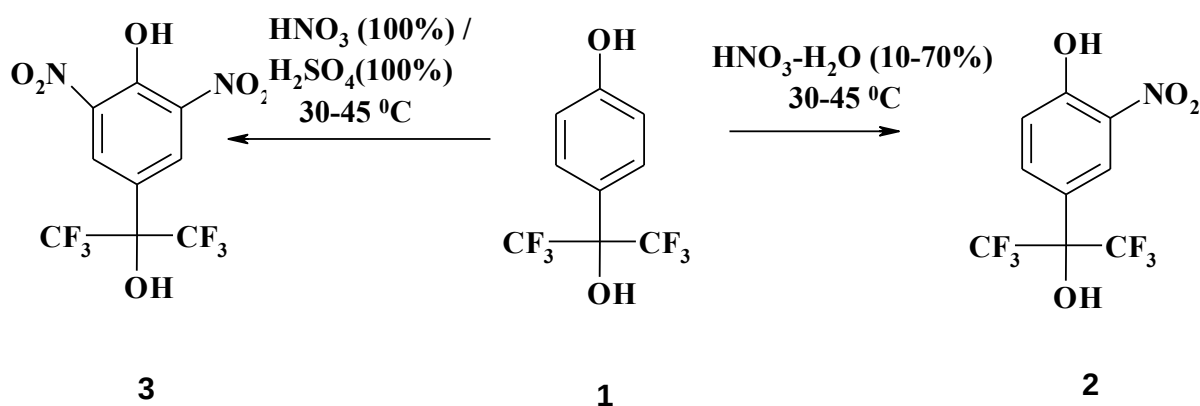
*Науковий керівник: Петко Кирил Ігорович, с.н.с., Інститут Органічної хімії НАН України, Київ, вул. Мурманська, 5. E-mail: kirpet@ukr.net

НІТРУВАННЯ п-(ГЕКСАФТОРОІЗОПРОПІЛ-2-ОКСИ)-ФЕНОЛУ

Мануель Антонио Марія*

Кафедра промислової фармації, Київський національний університет технологій та дизайну, Київ, вул. Немирвicha-Данченка, 2

Досліджено умови нітрування п-(гескафтороізопропіл-2-окси)-фенолу (**1**), з отриманням невідомих раніше мононітропохідного (**2**) та динітропохідного (**3**) – аналогу пікринової кислоти. Отримані сполуки можуть бути цінними прекурсорами для синтезу різних гетероциклічних систем з гескафтороізопропіл-2-окси групою в ядрі, виходячи з відповідного амінофенолу що може бути отриманий відновленням сполуки **2**, а також нових фторовмісних комплексів Мейзенгеймера що можуть бути отримані зі сполуки **3**.



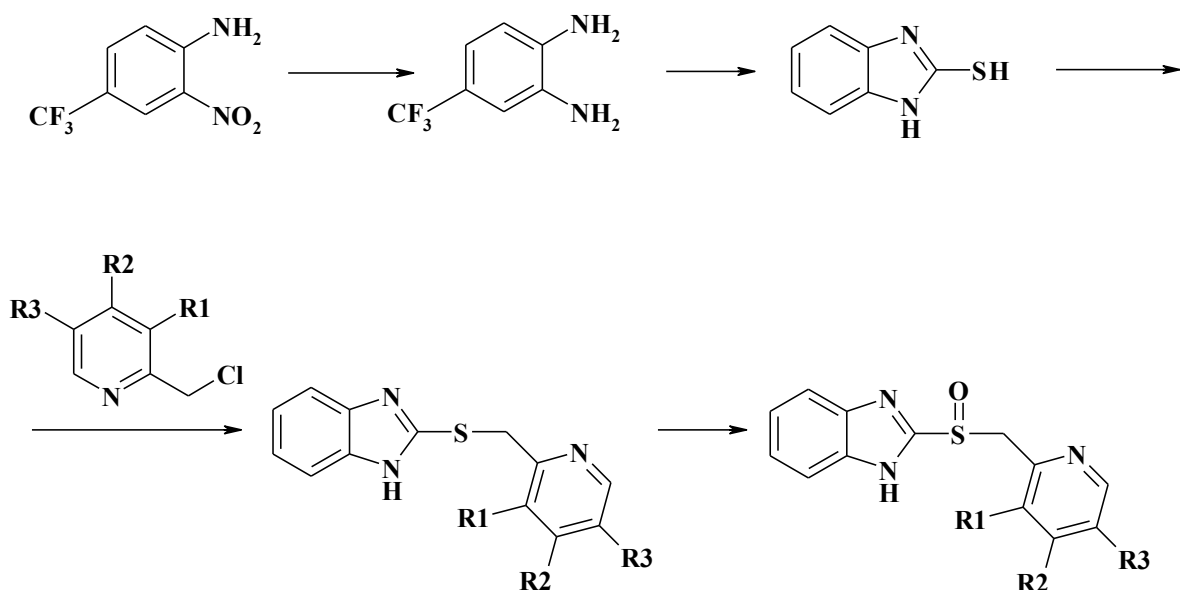
**Науковий керівник: Петко Кирил Ігорович, с.н.с., Інститут Органічної хімії НАН України, Київ, вул.Мурманська, 5. E-mail: kirpet@ukr.net*

СИНТЕЗ АНАЛОГІВ ОМЕПРАЗОЛУ З ТРИФТОРОМЕТИЛЬНОЮ ГРУПОЮ

Шовкун Ярослав*.

Кафедра промислової фармації, Київський національний університет технологій та дизайну, Київ, вул. Немирвicha-Данченка, 2

Омепразол є, широко відомий лікарський засіб для лікування виразкової хвороби шлунка. Важливою характеристикою противиразкових препаратів є їх ліпофільність. Введення до молекули лікарського засобу атому фтору чи фторовмісної групи призводить до значного підвищення ліпофільності, при цьому біологічна активність як правило не зменшується а іноді зростає. Серед аналогів Омепразолу, що вже використовуються як лікарські засоби, є молекули з дифторометокси- та трифторометоксильними групами. Нами було проведено синтез невідомих раніше аналогів Омепразолу, з трифторометильною групою. При розрахунках фармакологічних та токсикологічних властивостей отримано досить цікаві результати.



*Науковий керівник: Петко Кирил Ігорович, с.н.с., Інститут Органічної хімії НАН України, Київ, вул. Мурманська, 5. E-mail: kirpet@ukr.net

АРЕНТРИКАРБОНІЛЬНІ КОМПЛЕКСИ ХРОМУ У РЕАКЦІЯХ ПЕРФЛЮОРОАЛКІЛЮВАННЯ ТА ДЕАРОМАТИЗАЦІЇ

Храпач Г.Ю., Кирій Н.В., Ягупольський Ю.Л.

Інститут органічної хімії НАН України,

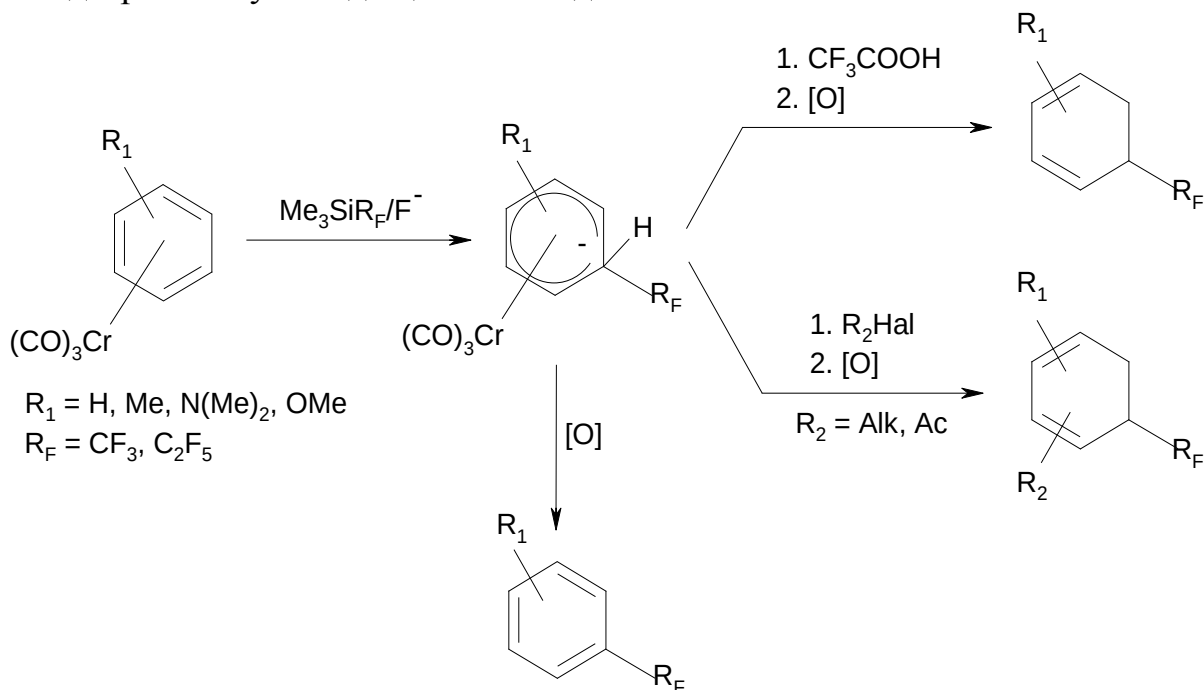
02660, м. Київ, вул. Мурманська, 5

Email: khrapach.g@gmail.com

Циклогексادیєни з перфлюороалкільними замісниками досі не описані. Попри те, що аренкарбонільні комплекси перехідних металів нині є предметом інтересу багатьох наукових груп, у літературі не міститься жодних свідчень про синтетичні можливості аренкарбонільних комплексів перехідних металів у реакціях перфлюороалкілювання та деароматизації, і, відповідно, про властивості одержаних таким чином перфлюороалкільованих циклогексادیєнів.

Тому метою нашої роботи є синтез перфлюороалкільованих циклогексادیєнів шляхом деароматизації аренів за дуже м'яких умов через арентрикарбонільні комплекси хрому.

Нами встановлено, що арентрикарбонільні комплекси хрому реагують з триметил(перфлюороалкіл)силанами в присутності тетраметиламоній флюориду виключно за ареновим лігандом з утворенням σ -комплексів, які можна окиснити до заміщених перфлюороалкіларенів, або деароматизувати до циклогексادیєнів.



У такий спосіб нами вперше одержано ряд заміщених циклогексادیєнів з трифлюорометильною групою.

**ТЕОРЕТИЧНЕ ТА СПЕКТРАЛЬНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ
ПРОДУКТІВ АМІНОЛІЗА І ГІДРАЗИНОЛІЗА
4,5-ЕПОКСИБІЦИКЛО[6.2.1.0^{2,7}]УНД-9-ЕЦ-3,6-ДІОНА**

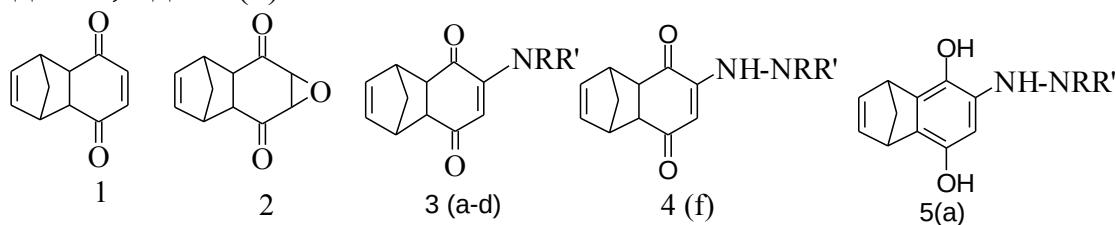
Іванчикова Л.*, Капуста К.

*Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара
49010, Дніпропетровськ, просп. Гагаріна, 72*

lil-ivanchikova@mail.ru

Хінони з різними функціональними групами - важливі інтермедіати в тонкому органічному синтезі, які використовують у виробництві вітамінів і лікарських препаратів. Наявність в молекулі різних функціональних груп (оксиранової, олефінової та інших) збільшує синтетичний потенціал цих сполук.

В даній роботі проведені спектральні та теоретичні дослідження продуктів амінолізу та гідразінолізу епоксиду (2) біцикло[6.2.1.0^{2,7}]ундека-4,9-дієн-3,6-діона(1).



R, R': -CH₃, -CH₃ (a); -H, -CH₂Ph (b); -H, C₃H₇ (c);
-(CH₂)₅- (d); -(CH₂)₂O(CH₂)₂- (e); H, Ph (f)

Епоксид (2) синтезовано на базі моно-адукта циклоконденсації циклопентадієна-п-бензохінона (1) і подальшим його селективним епоксидуванням за допомогою гідропероксиду в лужному середовищі.

Було вивчено реакційну здатність оксирана (2) в реакціях з аліфатичними, жирноароматичними, гетероциклическими амінами і гідразинами. Продуктами амінолізу є вініламіни (3), гідразіноліз призводить до утворення вініл- (4f) і феніл-(5a) гідразинів. Будову продуктів встановлено за даними ІЧ-, ¹H і ¹³C ЯМР-спектральних досліджень і підтверджено квантовохімічними розрахунками.

Описані вище реакції амінолізу і гідразінолізу є прикладом незвичайного перебігання розкриття оксиранового циклу з утворенням аномального продукту – супряженого аміно(гідразіно)-вінілдикетону. Його утворення, можливо, внаслідок розкриття епоксидного цикла та послідовної дегідратації оксиаміна. Ми здійснили квантовохімічний розрахунок теплових ефектів реакції відщеплення води в процесі амінолізу епоксидикетона (2) та його аналога з епоксидциклогексановим фрагментом методом M062X/6-31++G**. Отримані результати свідчать, що для епоксиду (4) реакція екзотермічна, а у випадку аналога без карбонільних груп процес незначно ендотермічний, що відповідає експериментальним даним переважного утворення ненасиченого аміну.

**Робота виконана під керівництвом доцента, канд. хім. наук Сефєровою М.Ф.*

СЕКЦІЯ

ХІМІЯ ТА ХІМТЕХНОЛОГІЯ

ВИСОКОМОЛЕКУЛЯРНИХ ТА

ПРИРОДНИХ СПОЛУК

Керівник: Варлан Константин Єлисейович, зав. каф. високомолекулярних
сполук ДНУ, к.х.н., доц.

Секретар: Косіцина Олена Сергіївна, ст. викладач каф.
високомолекулярних сполук ДНУ

ОЦЕНКА РЕОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАПОЛНЕННЫХ КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ОЛИГОМЕРНЫХ КАУЧУКОВ

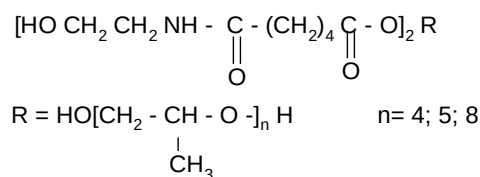
Грицай Т.Ю.,¹ Суровцев А.Б.,¹ Кузменко С.Н.²

¹Днепропетровский национальный университет имени Олеся Гончара
49010, г. Днепропетровск, пр. Гагарина, 72

²Украинский Государственный химико-технологический университет
49000, г. Днепропетровск, пр. Гагарина, 8

Перспективным направлением развития ракетной техники является разработка и применение пастообразных топлив, имеющих ряд преимуществ в сравнении с традиционными твердыми и жидкими видами топлив, основные из которых – это возможность широкого варьирования состава композиций; более высокая, чем для твердых топлив (в $2 \div 10$ раз) скорость горения; отсутствие требований по прочности заряда, что позволяет реализовать конструкцию двигателя с зарядом торцевого горения и получить близкий к единице коэффициент объемного заполнения камеры; повышенная плотность; возможность создания зарядов любых форм и размеров; сокращенный по времени цикл изготовления заряда ПТ и отсутствие формирующей оснастки; простая и безопасная утилизация двигателя после окончания срока эксплуатации [1].

В работе оценено влияние на реологические свойства высоконаполненных (70 мас.%) полимерных композиций на основе низкомолекулярных каучуков СКДН-н или СКД-ГТР в качестве связующего и хлорида калия (дисперсность частиц $63 \div 100$ мкм) в качестве наполнителя (модельное соединение взамен реального окислителя перхлората аммония), введенных в количестве до 2 мас.% добавок модифицированных олигомерных продуктов следующей формулы:



Добавки вводились в массу композиции в процессе смешения или путем предварительного нанесения на поверхность дисперсного наполнителя. Получены экспериментальные данные по вязкости рассмотренных композиций в интервале напряжения сдвига $1 \div 30$ кПа при температурах $20 \div 50^\circ\text{C}$. Показано существенное влияние рассмотренного ряда добавок на снижение вязкости исследованных композиций. По полученным результатам определена наиболее эффективная добавка с точки зрения химической природы, ее содержания и способа введения.

І.Іванченко, А.Н. Состояние разработки дросселируемых ракетных двигательных установок на унитарном пастообразном топливе / А.Н. Иванченко, С.Г. Бондаренко // Проблемы высокотемпературной техники. – Д: РИО ДНУ, 2007. – С.40–50.

МОНОМЕРИЗАЦІЯ ДИЦИКЛОПЕНТАДІЄНУ

Дороган В.В.

*Дніпропетровський національний університет ім.Олеса Гончара,
пр.Гагаріна 72, Дніпропетровськ, Україна, 49010*

E-mail: kafedra_vms@mail.ru

Фероцен – це унікальна хімічна сполука, яка з одного боку є комплексом Феруму (II) з циклопентадієном (ЦПД), з другого боку є ароматичною системою. Модифікація фероценом різних сполук досить проста і часто призводить до появи у продуктів корисних властивостей. Оскільки фероцен має поширене застосування в різних сферах хімічної технології, зокрема для підвищення експлуатаційних характеристик ракетного палива, було розглянуто особливості однієї з стадій його отримання: мономеризації дициклопентадієну (ДЦПД).

Один з методів отримання ЦПД оснований на реакції термічного розкладу ДЦПД за температури 160 – 165 °С, яка проходить в скляному реакторі з мішалкою. До реакційної суміші додають стабілізатор. Отримана пара ЦПД потрапляє на очистку до колони ректифікації. Контактні пристрої колони обрані з урахуванням технологічних особливостей процесу. Однак до недоліків даного методу слід віднести утворення олігомерних смол в реакторі. Це зумовило до вдосконалення технологічного процесу і формування нової технологічної схеми.

При вивченні особливостей процесу було знайдено, що небажана полімеризація циклопентадієну зменшується, якщо мономеризація проходить у інертному розчиннику. Тому було запропоновано проводити мономеризацію за температури 200°C з поступовим додаванням димеру (ДЦПД) з певною швидкістю до розчинника, що усуває здатність ЦПД до полімеризації і утворення смол в мономеризаторі внаслідок його швидкого випаровування. Утворений ЦПД потрапляє до дефлегматора, який попередньо нагрівають водяною парою для легкого проходження мономеру. Дефлегматор запобігає забрудненню ЦПД розчинником. Після цього ЦПД надходить до холодильника, де конденсується та потрапляє в збірник дистиляту.

Вихід становить 95% від теоретичного значення. Після проведення процесу в мономеризаторі не залишається олігомерних смол, а розчинник можна використовувати повторно. До переваг даного методу слід віднести також відсутність потреби в очищенні продукту, застосуванні мішалки та стабілізатора. Показник заломлення отриманого ЦПД задовольняє умовам щодо його чистоти.

Науковий керівник к.х.н., доцент Нестерова О.Ю.

СПОСІБ ОТРИМАННЯ FeCl_2 ДЛЯ ВИРОБНИЦТВА ФЕРОЦЕНУ

Є.В.Сьора

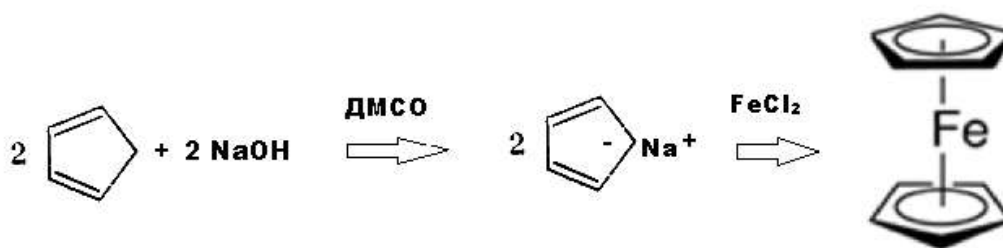
Дніпропетровський національний університет ім. О. Гончара

пр.Гагаріна, 72, м. Дніпропетровськ, 49010 .

sera_94@mail.ua

Фероцен – металоорганічна сполука заліза з пентагональною антипризматичною «сендвічевою» структурою. Завдяки своїй високосиметричній будові, фероцен володіє рядом незвичайних хімічних і фізичних властивостей. Існує декілька методів синтезу фероцену. Найпоширенішим з яких є засіб з використанням солей циклопентадієну (ЦПД) та лужного металу. Зазвичай реакцію проводять із циклопентадієнілом Натрію, який взаємодіє з хлоридом заліза з утворенням фероцену (схема 1). Якщо замість FeCl_2 використовувати FeCl_3 то отримують солі фероценію, які потім відновлюють до фероцену.

Схема 1



Отже, для виробництва фероцену потрібно ЦПД і хлорне залізо (II). Промисловий метод отримання $\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ базується на отриманні спочатку безводного FeCl_3 із феруму та хлору з подальшим його відновленням сухим воднем у електричній печі за температури 300-350⁰ С.

Нами, на основі вивчених промислових та лабораторних методів виробництва Ферум (II) хлориду, був запропонований спосіб отримання $\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ електрохімічним розчиненням залізних електродів, яке здійснюється у солянокислому розчині при поляризації електродів змінним струмом промислової частоти 50 – 500 А/м² і концентрації соляної кислоти 0,5 – 5М. Процес інтенсивного розчинення електродів із появою іонів двохвалентного заліза ведуть за кімнатної температури.

Електрохімічне розчинення проходить у результаті окиснення металу на анодному півперіоді змінного струму: $\text{Fe} - 2\text{e}^- \rightarrow \text{Fe}^{2+}$. На катодному півперіоді проходить реакція відновлення водню: $2\text{H}^+ + 2\text{e}^- \rightarrow \text{H}_2$.

На катодному півперіоді іони Fe^{2+} не можуть відновлюватися через те, що вони мають більш від'ємний потенціал ($E^0 = 0,41$ В) ніж потенціал виділення водню. Крім того у кислих розчинах катодне відновлення заліза проходить із сильною перенапрягою. У об'ємі розчину утворюється і випадає осад $\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, який фільтрують і висушують.

ВЛИЯНИЕ КАТАЛИЗАТОРА К1 НА РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТОПЛИВА

Шурыберко К. В., студент; Нестерова Е. Ю., к.х.н. доцент
Днепропетровский национальный университет им. О. Гончара
k-shyruberko@rambler.ru

Целью данного исследования является определение физико-химических свойств катализатора К-1 (Соединение дигидразида 2,6-диметил-3,5-пиридиндикарбоновой кислоты (ДГ) с нитратом меди), а также возможности добавления его в топливо свыше 1%.

Ракетное топливо (РТ) и смесевое твердое ракетное топливо (СТРТ), в частности, является одной из важнейших составляющих для обеспечения движущей силы ракет. СТРТ выполняет одновременно две функции – источника рабочего тела и энергии в виде выделяемого при горении тепла. Скорость горения РТ играет центральную роль в работе двигателя. Оптимальное СТРТ должно иметь стабильную скорость горения и низкий показатель экспоненты давления, что, обычно, достигается добавлением в топливо катализатора горения.

Так как, комплекс К-1 является твердым порошком, его введение в состав топлива несколько ухудшает реологические характеристики модельного СТРТ. Мы хотим проверить как будет смачиваться катализатор веществом. Это можно определить весовым методом. Для начала взвесим сухой катализатор, затем засыпим его в бюретку и зальем веществом, оставим на день, а после сольем жидкость и взвесим катализатор, по разнице массы можно будет судить, как он впитал жидкость.

Характеристики смачиваемости порошковых материалов играют важную роль и используются для оценки эффективности таких процессов, как мокрое пылеулавливание, пылеподавление, флотация, фильтрование, комкование порошковых материалов, формование керамических композиций, пропитка, дорожное строительство, производство порохов.

Есть несколько методов определения смачиваемости порошков. К величинам, связанным с этим процессом, измерение которых позволяет количественно оценить смачивание, относятся: 1) скорость всасывания жидкости в брикет из порошка; 2) давление на границе жидкость — газ в слое порошка, препятствующее дальнейшему проникновению жидкости в этот слой; 3) высота подъема жидкости в слое порошка.

Смачивание зависит от соотношения между силами сцепления молекул жидкости с молекулами смачиваемого тела и силами взаимного сцепления молекул жидкости. Степень смачивания характеризуется углом смачивания. Угол смачивания — это угол, образованный касательными плоскостями к межфазным поверхностям, ограничивающим смачивающую жидкость, а вершина угла лежит на линии раздела трёх фаз. Измеряется методом лежащей капли. В случае порошков предложено весовой метод определения степени смачивания.

**ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСУ ОТРИМАННЯ
ПАРА-ТРЕТ-БУТИЛФЕНОЛФОРМАЛЬДЕГІДНОГО ОЛІГОМЕРУ**

Балацька Т.Л., Зубенко А.Е., Северенчук І.М. *

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара

пр.Гагаріна 72, м.Дніпропетровськ, Україна

E-mail: Balatska_Tetyana@mail.ru

Сучасний розвиток авіаційної, ракетної, автомобільної галузей накладає жорсткі вимоги на властивості конструкційних матеріалів, що використовують у відповідних видах техніки. Серед завдань, які при цьому потребують вирішення, є підвищення стійкості вузлів і механізмів до впливу агресивних середовищ. Для цього переважно використовують захисні покриття на полімерній основі. Серед найбільш стійких полімерних покриттів зараз визначають такі, що містять у якості плівкоутворювальних складових маслорозчинні олігомери на основі заміщених фенолів, наприклад *пара-трет*-бутилфенолу. Так, вітчизняна промисловість (СП «Софрахім») випускає ефективний засіб на основі модифікованої *пара-трет*-бутилфенолформальдегідної смоли, що має підвищені змочувальні і захисні властивості, під маркою R-101. Але таке виробництво пов'язано з використанням імпоротної сировини, а створення власного виробництва фенольних смол стикається з проблемою утворення у значних обсягах шкідливих відходів (надсмольні води), що потребують затрат на утилізацію.

З метою розробки безвідходної технології синтезу *пара-трет*-бутилфенолформальдегідної смоли проведені дослідження, які були спрямовані на з'ясування можливості використання параформу замість формаліну, а також аміаку замість лугу у якості каталізатору. За цих умов показано, що для складання реакційної суміші можливо використання надсмольної води попередніх синтезів з додаванням в неї потрібної кількості параформу, а також видалення з продукту каталізатора без промивки. Це вказує на реальну можливість створення маловідходної екологічно прийнятної технології.

Попередні випробування отриманого за запропонованою методикою зразка смоли у якості інгредієнта засобу R-101 дали обнадійливі результати.

** Робота виконана під керівництвом к.х.н., доц. Варлана К.Є.*

ВИРОБНИЦТВО ПОРОШКУ ПЕРХЛОРАТУ АМОНІЮ ЗАДАНОГО ГРАНУЛОМЕТРИЧНОГО СКЛАДУ

Л.В.Коцюруба

Дніпропетровський національний університет ім. О.Гончара, пр.

Гагаріна 72, Дніпропетровськ, Україна, 49010

E-mail: sweetblood@ukr.net

Перхлорати металів та неметалів містять велику кількість активного кисню, що забезпечує згоряння багатьох речовин з високим перетворенням твердих компонентів в газоподібні продукти. Тому їх використовують у виробництві вибухових речовин, піротехнічних сумішей та ракетних палив.

Перхлорат амонію, як ефективний компонент сумішевого твердого ракетного палива посідає особливе місце. Тому існує необхідність в розробці сучасних технологій виробництва порошку перхлорату амонію.

Виробництво перхлорату амонію базується на реакції обмінного розкладу між перхлоратом натрію та хлоридом амонію. Після проходження реакції та розділення, шляхом фракціонованої кристалізації, перхлорату амонію та хлориду натрію, потрібно отримати кристали перхлорату амонію необхідних розміру та форми, що важливе для його застосування у складі твердого палива.

Для цього за певних умов проводять процес перекристалізації. Ці умови покладені в основу розрахованої нами вдосконаленої промислової технологічної схеми. Вона дозволяє отримувати партії порошку регенованого перхлорату амонію заданого фракційного складу з кристалами формою, що близька до сферичної. Схема містить каскад вакуумних кристалізаторів, обладнання для дозування маткових розчинів, відділення та сушки кристалів.

Проведений технологічний розрахунок окремих апаратів та схеми в цілому. Розрахунки проводилися за оригінальною методикою, розробленою для цієї технології.

На даний час дана технологія регенерації перхлорату амонію у складі виробництва з утилізації твердого ракетного палива впроваджується на Державному підприємстві «Науково-виробничому об'єднанні «Павлоградський хімічний завод».

** Робота виконана під керівництвом к.т.н., доцента Поджарського М.А.*

ВПЛИВ СУМІСНОГО ВВЕДЕННЯ ГАЗОУТВОРЮЮЧИХ ДОБАВОК НА СТРУКТУРУ ТА ВЛАСТИВОСТІ ПОРИСТИХ СКЛОКРИСТАЛІЧНИХ МАТЕРІАЛІВ(ПСКМ)

Антіпов В.І., Петух С.І., Кольцова Я.І.

Державний вищий навчальний заклад

“Український державний хіміко-технологічний університет”

49005, м. Дніпропетровськ, пр. Гагаріна, 8

Сучасний стан промисловості і цивільного будівництва передбачає широке використання теплоізоляційних матеріалів. Одним з таких матеріалів є піноскло, яке володіє цілим рядом цінних властивостей: високою міцністю, водостійкістю, морозостійкістю, досить низькою теплопровідністю, але його недоліком є порівняно висока вартість. Перспективним напрямком сучасних досліджень є використання промислових та інших відходів для отримання різних видів будівельних матеріалів, зокрема, пористих склокристалічних матеріалів, які характеризуються високими фізико-механічними властивостями.

Нами для проведення досліджень з урахуванням оптимальної температури випалу ПСКМ було обрано два комплекси газоутворюючих добавок: для температури 750° С комплекс добавок, який містив бій бесто-цементних виробів(БАЦВ), мартенівський шлак та суглинок, а для температури 850° С - комплекс добавок, що містив доменний шлак, золу-пеласу ТЕС та пил газо-аспіраційних систем (ГАС) заводу проєктивів.

Аналізуючи сукупність властивостей дослідних ПСКМ було встановлено, що найбільше значення коефіцієнта конструктивної якості ККЯ (відношення межі механічної міцності на стиск до значення середньої пористості матеріалу), який дорівнює 6, мали зразки з вмістом 15мас.% БАЦВ, а також зразки із вмістом комплексу добавок БАЦВ, мартенівського шлаку та суглинка по 5 мас.%, випалені при температурі 0° С. Структура вищезазначених дослідних матеріалів - дрібнопориста. Зразки середньопористої структури з вмістом пилу ГАС та доменного шлаку в кількості по 7,5 мас.%, випалені при температурі 850° С, характеризувалися ККЯ, що дорівнював 10.

Таким чином, в результаті проведених досліджень встановлено можливість використання відходів виробництва в якості комплексу газоутворюючих добавок для одержання ПСКМ з високими показниками якості. Введення таких відходів буде сприяти частковому вирішенню питань їх утилізації та зниженню собівартості виробів.

ЕПОКСИ-ФЕНОЛФОРМАЛЬДЕГІДНА СМОЛА НА ВІДНОВЛЮВАНІЙ СИРОВИНІ ДЛЯ ЗАСОБУ СОФЕЇЗАЦІЇ

Лавриченко І.В., Северенчук І.М.*

Дніпропетровський національний університет ім. О. Гончара

49010, м. Дніпропетровськ, пр. Гагаріна, 72

lavrichenko.irina@mail.ru

Під терміном «софеїзація» розуміють процес нанесення антикорозійного покриття на металеву поверхню с залишкамиіржі і окалини. Для цього використовують лакофарбові склади з високими змочувальною здатністю і поропроникністюна основі синтетичних смол. Серед таких матеріалів широкого розповсюдження отримав, наприклад, засіб R-101, який має високі антикорозійні властивості в різних середовищах, завдяки чому його використовують у газонафтодобувній, нафтохімічній, суднобудівній та судноремонтній та інших галузях.

Основними інгредієнтами засобу софеїзації є епоксифенолформальдегідна смола, модифікована рослинними висихаючими оліями. У якості епоксидної складової використовують синтетичну епоксидіанову смолу, а у якості модифікатора – тунгову олію. Обидві сполуки є імпортованими продуктами.

З метою розширення сировинної бази та спрощення технології отримання плівкоутворювальної основи антикорозійного засобу проведені дослідження, спрямовані на з'ясування можливості заміни епоксидіанової смоли і частини тунгової олії на епоксидовану соєву олію (ЕСО). Виробництво останньої налагоджено в Україні, до того ж держава має для цього значні відновлювані сировинні ресурси.

У ході дослідження апробована спрощена методика епоксидування соєвої олії сумішшю перекису водню і мурашиної кислоти для отримання продукту з регульованим вмістом епоксидних груп. Під час епоксидування вивчена залежність вмісту епоксидних груп від кількості доданого перекису і часу процесу. За даними лабораторних аналізів складений матеріальний баланс і сформульовані вихідні дані для розробки пілотного технологічного процесу отримання епоксифенолформальдегідної смоли з використанням ЕСО. Результати попередніх випробувань дослідного складу для софеїзації на основі синтезованої ЕСО вказали на доцільність проведення подальших досліджень у цьому напрямку.

**Робота виконана під керівництвом к.х.н., доц. Варлана К.Є.*

СТРУКТУРА И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ

Дорофеева А. Г.

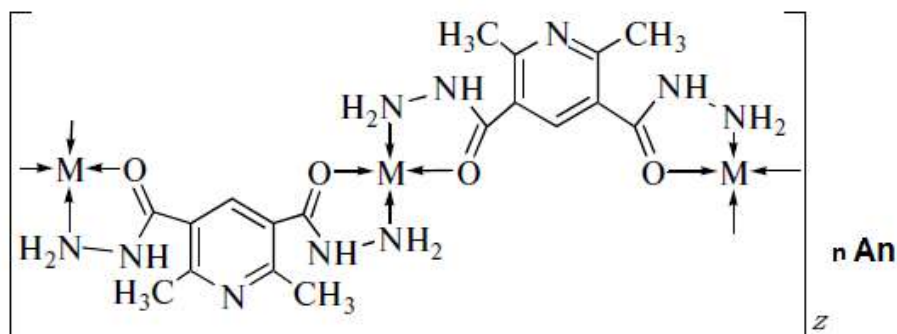
Днепропетровский национальный университет им. О. Гончара

49010, г. Днепропетровск, пр. Гагарина, 72

annamiel9@mail.ru

В последнее время координационные соединения привлекают значительное внимание исследователей в качестве энергонасыщенных материалов, а также эффективных катализаторов горения. На их основе можно получить высокоэнергетические соединения, у которых координационная сфера выполняет роль горючего и связана с атомом металла, выполняющего функции матрицы. В качестве лигандов могут быть использованы азотсодержащие соединения, такие как триазолы, гидразиды, этилендиамин и др. В состав данных координационных соединений также входят анионы-окислители, такие как перхлорат- или нитрат-анионы. В качестве металлов-комплексобразователей чаще всего используются медь, кобальт, никель и хром.

Нами были получены полимерные комплексные соединения на основе дигидразида 2,6-диметил-3,5-пиридиндикарбоновой кислоты общей формулы:



$M = Cu^{2+}, Co^{2+}, Ni^{2+}$; $An = NO_3^-$; z -степень полимеризации; n -число анионов

Проведены исследования термической стабильности полученных комплексов методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК), а также проведены расчеты теплоты образования данных комплексов.

Научный руководитель, к.х.н., доцент Нестерова Е.Ю.

ОТВЕРЖДЕНИЕ ЭПОКСИДСОДЕРЖАЩИХ ОЛИГОМЕРОВ

Смольникова Т. Ю.

*Днепропетровский национальный университет им. О. Гончара
пр.Гагарина, 72, Днепропетровск, Украина,49010*

smolntatyana@yandex.ru

В качестве регуляторов скорости горения смесового твердого ракетного топлива (СТРТ) наиболее широко используются жидкие производные ферроцена, такие как диэтилферроцен (ДАФ-2), н-бутилферроцен, катацен и др. Однако, недостатком жидких ферроценсодержащих катализаторов является выделение их с течением времени из СТРТ (экссудация), которая приводит к изменению физико-химических свойств системы, ухудшению баллистических показателей ракеты.

Одним из путей решения этой проблемы является использование производных ферроцена как в качестве катализатора горения, так и, одновременно, отверждающего агента. Поскольку катализаторы горения и отвердители входят в состав топлива в количестве 1-2 %, то их совмещение приведет к уменьшению количества компонентов и упрощению процесса смешения.

Нами предложено в качестве отверждающего компонента для горюче-связующего и катализатора скорости горения СТРТ использовать гидразон 1,1'-диацетилферроцена.

Синтез дигидразона диацетилферроцена осуществлялся в два этапа: на первом этапе ацилированием ферроцена получали 1,1'-диацетилферроцен, из которого на втором этапе синтезировали гидразон 1,1'-диацетилферроцена при кипячении в спиртовом растворе гидразин гидрата.

Нами была исследована реакция отверждения эпоксидной смолы гидразоном диацетилферроцена в качестве модельной, чтоб проверить способность полученного гидразона раскрывать с эпоксидную группу. Нужно отметить, что гидразон диацетилферроцена хорошо растворяется в эпоксидной смоле, а также в пластификаторах, которые применяются в составе ракетного топлива, а именно, в диоктилсебагинате и дибутилфталате.

Нами было найдено, что смесь ЭД-20 и гидразона в соотношении 2:1 отверждается в течение 1 часа при $T=100\text{ }^{\circ}\text{C}$, в то же время при 60°C наблюдается постепенное увеличение вязкости композиции в течение 6 часов.

Научный руководитель, к.х.н., доцент Нестерова Е.Ю.

СЕКЦІЯ

ХАРЧОВА ХІМІЯ ТА СУЧАСНІ ХАРЧОВІ ТЕХНОЛОГІЇ

Керівник: Колісниченко Тетяна Олександрівна, зав. каф. харчових технологій ДНУ, к.т.н., доцент.

Секретар: Применко Владислав Геннадійович, асистент каф. харчових технологій ДНУ

ВИКОРИСТАННЯ ТОПІНАМБУРУ У ВИРОБНИЦТВІ НИЗЬКОКАЛОРІЙНИХ БОРОШНЯНИХ ВИРОБІВ

Грецька О.В.

*Дніпропетровський національний університет
імені Олеся Гончара*

Пошук нових рішень в напрямку створення харчових продуктів з лікувальними властивостями привів до запозичення народами різних видів сировини. Останнім часом, в ресторанному господарстві та харчовій індустрії стали досить часто використовувати топінамбур. Французькі кулінари вперше запропонували суспільству гідну альтернативу картоплі. Топінамбур має досить високу харчову та біологічну цінність, оскільки до його складу входять пектини, вітаміни (В1, В2, В6, С, РР, каротиноїди тощо); білки містять незамінні амінокислоти: аргінін, валін, лізин, лейцин. Однак, особливістю даного коренеплоду вважають значний вміст інуліну, гідроліз якого в організмі призводить до отримання нешкідливого для діабетиків цукру – фруктози, що дозволяє проводити лікування і профілактику цукрового діабету.

Інулін також сприяє виведенню з організму багатьох токсичних речовин і виводить баластні речовини з кишечника. Крім того, інулін стимулює розвиток нормальної мікрофлори, після чого організм стає більш стійким до інфекцій і вірусів.

Слід зазначити, що термічна обробка топінамбура не зменшує його харчової та біологічної цінності, тому його використовують у складі багатьох страв. Проте, поза увагою залишаються борошняні вироби, оскільки їх калорійність занадто висока для рекомендації споживання у лікувально-дієтичному харчуванні.

Нами було вирішено цю проблему шляхом заміни пшеничного борошна на вівсяне з порошком топінамбуру (1%), цукру – на фруктозу, а молока – на знежирений кефір. Порівняльний аналіз енергетичної, харчової цінності та деяких мікронутрієнтів у тістових напівфабрикатах наведено у таблиці.

Таблиця - Порівняльний аналіз хімічного складу напівфабрикату (тіста)

Показники	Традиційна рецептура	Розроблена рецептура
Енергетична цінність, ккал	232,5	170,1
Жири, білки, вуглеводи, г	12,3; 6,1; 26	9,2; 5,2; 17,7
Холестерин, мг	7,1	4,56
Крохмаль, г	18,9	11,0
Вітамін В ₁ , В ₂ , В ₅ , мг	0,1; 0,1; 0,3	0,3; 0,5; 0,4
Вітамін В ₉ , РР, мкг	7,7; 1,16	25; 1,71
Mg, K, Cl, Fe, Zn, мг	13,6; 129; 428,6; 0,6; 0,5	34,8; 161,9; 611,9; 1,2; 0,9

Науковий керівник – к.т.н., доцент Кондратюк Н.В.

ПЕРСПЕКТИВИ ВИКОРИСТАННЯ КАПСУЛЬОВАНИХ ФОРМ АЦИДОФІЛЬНОЇ ПАЛИЧКИ У СКЛАДІ КРУП'ЯНИХ ДЕСЕРТІВ

Падалка А.М.

*Дніпропетровський національний університет
імені Олеся Гончара*

Останні десятиліття характеризуються різким погіршенням екології, зростанням стресових факторів, антропогенних навантажень, які негативно впливають на здоров'я населення. Наслідком дії цих факторів є збільшення частоти виникнення дисбактеріозів та захворювань імунної системи у людей різних вікових груп.

Фундаментально доведена визначна роль для здоров'я людини ацидофільної палички. Нажаль, термін придатності існуючих ацидофільних продуктів не достатньо тривалий, оскільки одним з продуктів метаболізму є молочна кислота, що скорочує життєвий цикл ацидофільних бактерій і досить погіршує органолептичні показники готових продуктів. Дана проблема була вирішена шляхом капсулювання мікроорганізмів у полімерні оболонки на основі альгінату натрію, які надійно захищають ацидофільну паличку від дії продуктів власного метаболізму, тому що до складу інкапсулянту стало можливим без особливих змін технологічного процесу та органолептичної привабливості введення сольових компонентів, що регулюють кислотно-лужний баланс у вмісті капсули. У зв'язку з цим були розроблені нові харчові продукти, які раніше не могли бути збагаченими на пробіотичні мікроорганізми, зокрема на ацидофільну паличку.

У даному дослідженні такими стали солодкі страви на основі рисової крупи – рисові креми, у яких капсульовані пробіотичні мікроорганізми досить гармонійно поєднуються із круп'янистою структурою та консистенцією основної харчової суміші. Завдяки цьому значно зменшується тенденція до розпізнавання капсул у ротовій порожнині чутливими ділянками язика та збільшується ступінь ковтання.

Завдяки ідеї суміщення провареного на молоці рису з капсульованими формами пробіотиків у складі холодних солодких страв (десертів) вдалося розробити асортимент продуктів, додавши до круп'яної основи білки яєць, емульговану систему молочного жиру, вітамінно-мінеральні комплекси у вигляді плодових пюре, горіхові суміші, чим розширити спектр продуктів з пробіотичними мікроорганізмами, які проявляють антагоністичну активність до патогенних мікробів шляхом природного продукування антибіотичних речовин.

Науковий керівник – к.т.н., доцент Кондратюк Н.В.

Науковий консультант – Большакова В.Л. (ДП «Дніпропростандартметрологія»)

ОРГАНОЛЕПТИЧНА ОЦІНКА ЯКОСТІ РИБОРОСЛИННИХ СТРАВ ФУНКЦІОНАЛЬНОГО ПРИЗНАЧЕННЯ

Колісниченко Т. О., Вареник Т. С.

*Дніпропетровський національний університет ім. О. Гончара
м. Дніпропетровськ, просп. Гагаріна, 72*

Асортимент страв із риби постійно розширюється, а технології їх приготування вдосконалюються в напрямку розробки та виробництва страв, здатних збагатити раціон людини продуктами з високою харчовою цінністю. Останнім часом в нашій країні посилився інтерес до функціональних продуктів і перспективним напрямком виробництва даних продуктів є їх виготовлення на основі поєднання рибної та рослинної сировини.

Нами було розроблено ряд рецептур на страви, а також проведено органолептичну оцінку їх якості (таблиця 1).

Таблиця 1 - Органолептична оцінка якості розроблених страв

Назва страви	Органолептичні показники			
	Зовнішній вигляд	Консистенція	Колір	Запах і смак
1	2	3	4	5
Пудинг рибний зі шпинатом	Підрум'янена скоринка, пудинг тримає форму	Ніжна, м'яка	Золотисто-коричневий колір скоринки, на розрізі – світло-сірий з зеленими краплями шпинату	Натуральний, властивий даному виду сировини, без сторонніх ароматів та присмаків
Запиканка рибна з гарбузом	Запиканка зберігає форму, зверху – золотиста сирна скоринка	Соковита, ніжна	Відповідний компонентам страви	Натуральний, властивий даному виду сировини, без сторонніх ароматів та присмаків
Запиканка рибна з броколі	Запиканка зберігає форму, зверху – золотиста сирна скоринка	Неоднорідна, соковита	Відповідний компонентам страви	Натуральний, властивий даному виду сировини, без сторонніх ароматів та присмаків
Кнелі із рибного мусліну з журавлиною	Кнелі відповідають формі, не розварені	Пухка, ніжна, м'яка	Світло-сірий із червоними краплями порошку із журавлини	Натуральний, властивий даному виду сировини, без сторонніх ароматів та присмаків

Розробка функціональних риборослинних страв дозволить задовольнити потреби населення у продуктах здорового харчування та підвищити конкурентоспроможність рибопереробних підприємств.

ОБҐРУНТУВАННЯ МАШИННО-АПАРАТУРНОЇ СХЕМИ ДЛЯ ВИРОБНИЦТВА МАЙОНЕЗУ, ЗБАГАЧЕНОГО СЕЛЕНОМ

Дніпропетровський національний університет ім. О. Гончара

м. Дніпропетровськ, просп. Гагаріна, 72

Применко В.Г., Меркулова О.С., Багалій І.В

Машинно-апаратурна схема комплексу технологічного обладнання для виробництва майонезу безперервним способом наведена на рисунку.

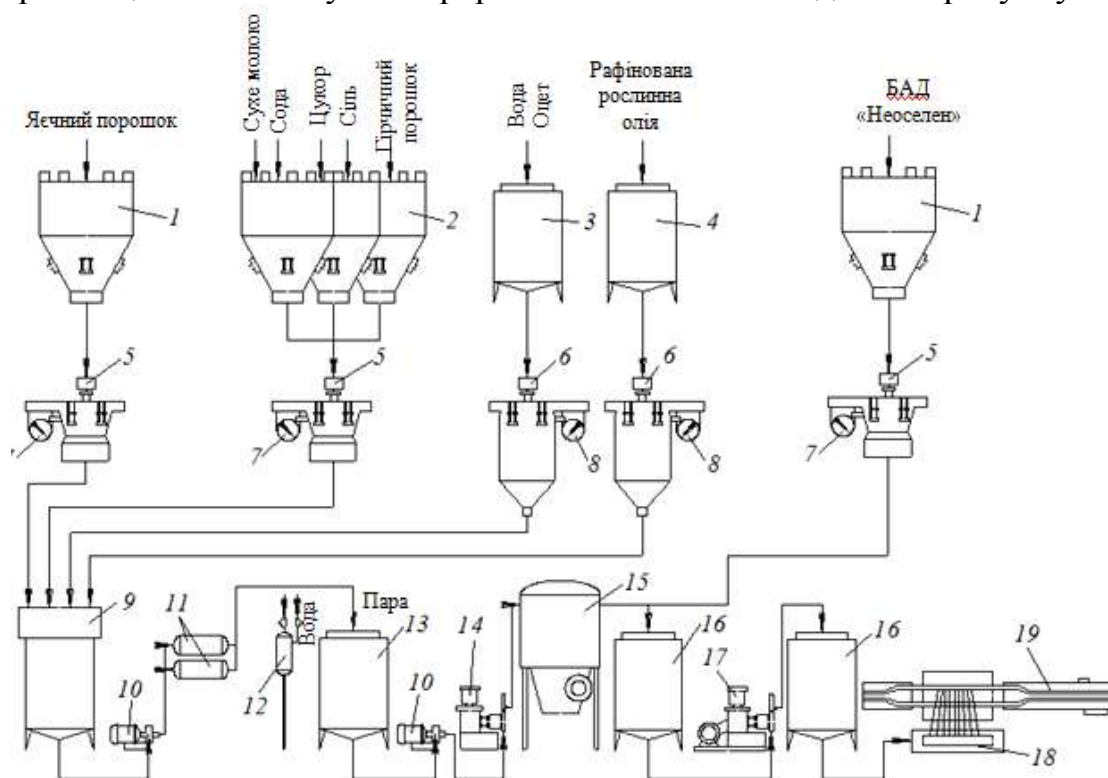


Рисунок – Машинно-апаратурна схема комплексу технологічного обладнання для виробництва майонезу безперервним способом

Сировина надходить в витратні резервуари 1 – 4. Далі за допомогою дозаторів для сухих 5 і рідких 6 компонентів, а також автоматичних вагових станцій для сухих 7 і рідких 8 компонентів відбувається їх набір.

У змішувачі 9 утворюється майонезна емульсія, яку перекачують насосом 10 через фільтри 11 і направляють в деаератор 13, де за допомогою вакуум-насоса 12 відбувається видалення летючих ароматичних речовин гірчиці і повітря. Після цього емульсію ротаційним насосом 10 і плунжерним насосом-дозатором 14 направляють в теплообмінник-охолоджувач 15. Емульсію, охолоджену до температури 0...5°C, подають в проміжну ємність 16, куди додають БАД «Неоселен». Звідти вона самопливом надходить в гомогенізатор 17 для поліпшення її дисперсного стану. Отримана тонкодисперсна емульсія потрапляє в ємність 16, звідки в фасовочно-пакувальну машину 18 і далі в машину 19 для укладання готової продукції в короба.

ОРГАНОЛЕПТИЧНА ОЦІНКА ЯКОСТІ СОУСІВ ЕМУЛЬСІЙНОГО ТИПУ ФУНКЦІОНАЛЬНОГО ПРИЗНАЧЕННЯ

Дніпропетровський національний університет ім. О. Гончара

м. Дніпропетровськ, просп. Гагаріна, 72

Колісниченко Т. О., Сирота А. К.

Одним з ключових чинників поліпшення здоров'я населення України в цілому є раціоналізація харчування, оскільки незбалансований харчовий раціон на тлі екологічних проблем може стати причиною серйозних порушень у роботі організму. Світовий і вітчизняний досвід свідчить, що найбільш ефективним і доцільним шляхом кардинального вирішення зазначеної проблеми являється розробка і створення потужного промислового виробництва таких продуктів харчування, як соуси емульсійного типу.

Нами було розроблено ряд рецептур на соуси, а також проведено органолептичну оцінку їх якості (таблиця 1).

Таблиця 1 - Органолептична оцінка розроблених соусів

Назва страви	Органолептичні показники			
	Зовнішній вигляд	Консистенція	Колір	Запах і смак
1	2	3	4	5
Соус емульсійного типу з вакаме	Однорідна, гладка маса, без плівки на поверхні і без грудочок	Напіврідка, злегка грузька, еластична	Від білого до жовтуватого-кремового з вкрапленням водоростей	Натуральний, властивий даному виду сировини, без сторонніх ароматів та присмаків
Соус емульсійного типу з фукусом	Однорідна, гладка маса, без плівки на поверхні і без грудочок усередині	Напіврідка, злегка грузька, еластична	Від білого до світло-кремового	Натуральний, властивий даному виду сировини, без сторонніх ароматів та присмаків
Соус емульсійного типу з біогелем «Ламідан»	Однорідна маса, без плівки на поверхні і без грудочок усередині	Напіврідка, злегка грузька, еластична	Від білого до світло-кремового	Натуральний, властивий даному виду сировини, без сторонніх ароматів та присмаків

Розробка соусів емульсійного типу функціонального призначення дозволить збагатити продукти харчування функціональними інгредієнтами та задовольнити добову потребу організму людини в мікро-, мікроелементах та вітамінах. Крім того, дана розробка дасть можливість підвищити конкурентну спроможність соусів емульсійного типу.

ВИЗНАЧЕННЯ ЖИРНОКИСЛОТНОГО СКЛАДУ ТА ОЦІНКА ВПЛИВУ ШРОТІВ ГОРІХОВОЇ СИРОВИНИ

Г.В. Новік, С.О. Хмеловська, А.І. Водолазька
Дніпропетровський національний університет, ім. О. Гончара
М. Дніпропетровськ, пр. Гагаріна, 72

Аналіз літературних джерел показав, що для збільшення строку придатності виробів, приватні підприємства вносять добавки синтетичного походження, які не тільки не поліпшують біологічну цінність продукту, але й несуть шкоду для організму людини. Тому пропонуємо добавки природного походження, якими є шроти кедрового (ШКГ) та грецького (ШГГ) горіхів, які є джерелом корисних речовин. З цією метою було визначення жирнокислотного складу вищезазначених шротів, за допомогою хроматографу AgilentTechnologies 6890 з мас-спектрометричним детектором 5973. Для ідентифікації компонентів використовується бібліотека мас-спектрів NIST05 і WILEY 2007. Для кількісних розрахунків використовується метод внутрішнього стандарту.

Проведено дослідження, що підтверджували наявність жирних кислот у сировині. Для цього використовували рослинні екстракти зі шротів кедрового та грецького горіхів. Результати досліджень представлено у табл. 1.

Таблиця 1

Уміст жирних карбонових кислот у шротах горіхової сировини.

$P \geq 0.95$, $n=5$

Кислоти	Уміст, мг/100г	
	ШКГ	ШГГ
Насичені ЖК	877,404	2869,377
Мононенасичені ЖК	320,61	747,388
Поліненасичені ЖК	632,534	1972,972
Багатоосновні насичені ЖК	563,027	1403,439

За результатами проведених досліджень можна зробити висновки стосовно наявності у досліджуваних шротах жирних кислот.

З таблиці 1 встановлено, що шроти в значній кількості містять насичені та ненасичені карбонові кислоти, але ШГГ перевищує ПНЖК та МНЖК більше ніж в два рази у порівнянні зі ШКГ.

Таким чином зазначені шроти можна рекомендувати як джерело незамінних речовин для покращення раціонів харчування людини.

Науковий керівник – к.т.н., доцент Хмеловська С.О.

СЕКЦІЯ

ФІЗИЧНА ТА НЕОРГАНІЧНА ХІМІЯ

Керівник: Деркач Тетяна Михайлівна, зав. каф. фізичної та неорганічної хімії ДНУ, д.п.н., доц.

Секретар: Крамська Ольга Сергіївна, доцент каф. фізичної та неорганічної хімії ДНУ, к.х.н.

АДСОРБЦИОННОЕ ВЫДЕЛЕНИЕ ИОНОВ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ С ПОМОЩЬЮ РАСТИТЕЛЬНЫХ ОТХОДОВ

Балика И. А.

*Одесский национальный университет им. И.И. Мечникова,
Дворянская 2, Одесса, 65082*

В последние годы интенсивно проводятся исследования по применению различных растительных отходов (опилки, кора, кукурузные початки, рисовые отруби и др.) для адсорбционного выделения токсичных ионов тяжелых металлов из сточных вод различных производств (гальванических, металлообрабатывающих, кожевенных, текстильных). Перспективным в этом направлении является применение различных видов соломы и стеблей зерновых культур. Для них характерен лигноцеллюлозный состав, они доступны, ежегодно возобновляемы и являются дешевыми, экологически безопасными материалами.

Цель работы: изучить возможность применения в качестве адсорбентов стеблей кукурузы (СК) и соломы ячменя (СЯ) для адсорбционного выделения ионов Cd^{2+} , Cu^{2+} и Zn^{2+} .

Объектами исследования служили водные растворы сульфатов меди, кадмия и цинка с исходной концентрацией ионов 50 мг/л. СК и СЯ измельчили, промыли водой, высушили и использовали фракцию с размером частиц < 250 мкм.

Адсорбцию ионов тяжелых металлов на СК и СЯ исследовали в статических условиях при температуре 20 °С в течение 30 мин. Концентрацию ионов металлов определяли фотоколориметрически.

Исследования показали, что максимальная степень выделения ионов Cd^{2+} , Cu^{2+} и Zn^{2+} на СК и СЯ наблюдается при $\text{pH}=9$. Однако следует учитывать, что при $\text{pH}>6-6,5$ данные ионы осаждаются в виде гидроксидов. Максимальная степень адсорбционного выделения ионов достигается при $\text{pH}=5-6$ и по значениям степени выделения ионы металлов можно расположить в следующий ряд: $\text{Cd}^{2+} \sim \text{Cu}^{2+} > \text{Zn}^{2+}$. Исследования влияния расхода адсорбента на степень адсорбционного выделения показали, что оптимальный расход СК и СЯ при выделении ионов Cd^{2+} и Cu^{2+} составляет 12 г/л.

Таким образом, проведенные исследования показали, что целесообразно применять СК и СЯ для очистки сточных вод от ионов Cu^{2+} и Cd^{2+} .

СИСТЕМА $Y_2S_3 - Ga_2S_3 - SiS_2$ ЗА ТЕМПЕРАТУРИ 770 К

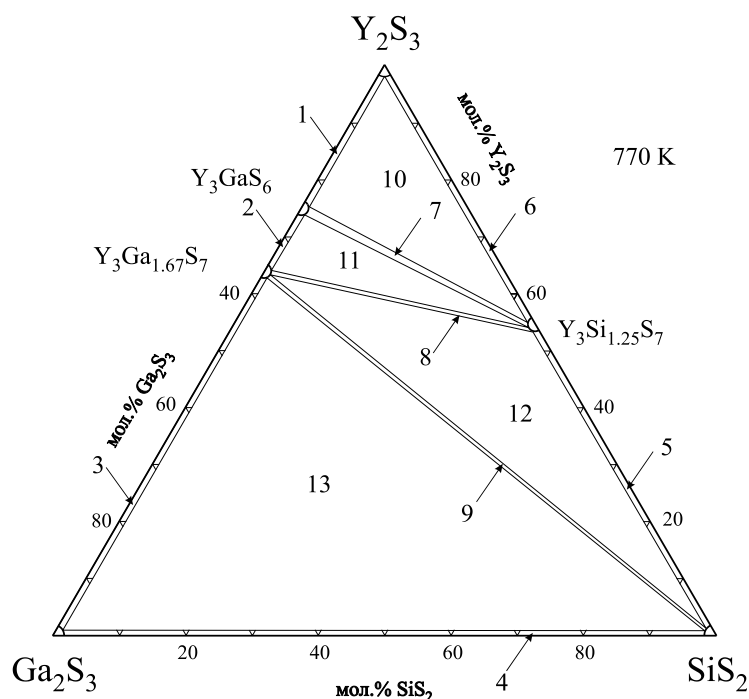
Блашко Н.М., Марчук О.В., Олексеюк І.Д., Гулай Л.Д.

*Східноєвропейський національний університет імені Лесі Українки
43025, м. Луцьк, пр. Воли 13*

Вступ. З погляду на унікальні властивості сполук, сплави та композити на основі рідкісноземельних металів є одними із об'єктів напівпровідникового матеріалознавства. Метою даної роботи є вивчення фазових рівноваг у системі $Y_2S_3 - Ga_2S_3 - SiS_2$ за температури 770 К.

Експериментальна частина. Синтез сплавів системи здійснювали в електричній муфельній печі. Максимальна температура синтезу становила 1370 К. Гомогенізуючий відпал за температури 770 К проводили на протязі 500 годин. Рентгенофазовий аналіз здійснювали за дифрактограмами, які були зняті на дифрактометрі ДРОН-4-13 в межах $2\Theta = 10-80$ ($CuK\alpha$ – випромінювання, крок сканування – 0,05, експозиція у кожній точці – 4 с). Обробку даних здійснювали за допомогою пакету програм Powder Cell.

Результати дослідження. У дослідженій системі за температури 770 К нами підтверджено існування трьох тернарних сполук: $Y_3Si_{1,25}S_7$ (ПГ. $P6_3$) $Y_3Ga_{1,67}S_7$ (ПГ $P6_3$) та Y_3GaS_6 (ПГ $Cmc2_1$). Комплекс проведених досліджень дав змогу побудувати ізотермічний переріз дослідженої системи за температури 770 К (рис. 1).



Ізотермічний переріз системи $Y_2S_3 - Ga_2S_3 - SiS_2$:
 1 – $Y_2S_3 + Y_3GaS_6$; 2 – $Y_3GaS_6 + Y_3Ga_{1,67}S_7$; 3 – $Ga_2S_3 + Y_3Ga_{1,67}S_7$; 4 – $Ga_2S_3 + SiS_2$; 5 – $SiS_2 + Y_3Si_{1,25}S_7$; 6 – $Y_2S_3 + Y_3Si_{1,25}S_7$; 7 – $Y_3GaS_6 + Y_3Si_{1,25}S_7$; 8 – $Y_3Ga_{1,67}S_7 + Y_3Si_{1,25}S_7$; 9 – $SiS_2 + Y_3Ga_{1,67}S_7$; 10 – $Y_2S_3 + Y_3GaS_6 + Y_3Si_{1,25}S_7$; 11 – $Y_3GaS_6 + Y_3Ga_{1,67}S_7 + Y_3Si_{1,25}S_7$; 12 – $SiS_2 + Y_3Si_{1,25}S_7 + Y_3Ga_{1,67}S_7$; 13 – $Ga_2S_3 + SiS_2 + Y_3Ga_{1,67}S_7$.

Висновок. Методом РФА встановлено характер фазових рівноваг і побудовано ізотермічний переріз системи $Y_2S_3 - Ga_2S_3 - SiS_2$ за температури 770 К.

КІНЕТИЧНІ ЗАКОНОМІРНОСТІ СОРБЦІЇ СПОЛУК УРАНУ (VI) ІЗ РОЗЧИНІВ РІЗНОГО СКЛАДУ КАТІОНІТАМИ, МОДИФІКОВАНИМИ ГІДРОФОСФАТОМ ЦИРКОНІЮ

Галуцька І.Ю., Панчина Г.Л.

*Одеський національний університет імені І.І. Мечникова,
65082, м. Одеса, вул. Дворянська, 2
e-mail: iren_galutskaya@ukr.net*

На сьогодні перспективним є пошук нових сорбентів для вилучення високотоксичних речовин, в тому числі, сполук урану (VI). Одними з ефективних сорбентів є модифіковані органічні катіоніти. Для їх використання та впровадження в практику необхідна інформація про кінетику процесу сорбції. Кінетичні моделі псевдопершого та псевдодругого порядку, а також дифузійні моделі є найбільш поширеними для вивчення кінетики сорбції та встановлення механізму цього процесу.

Мета роботи – встановити кінетичні закономірності сорбції сполук урану (VI) із розчинів різного складу катіонітами, модифікованими гідрофосфатом цирконію (ГФЦ).

Кінетика сорбції сполук урану (VI) досліджуваними катіонітами вивчалася при різних значеннях витрати сорбентів, складу розчину та температури. В роботі використовували розчини ураніл ацетату ($2 \cdot 10^{-4}$ М) у присутності хлороводневої кислоти (0,02 М) та складні розчини, що містили також Fe (III) хлорид ($4,5 \cdot 10^{-3}$ М). Сорбентами слугували зразки КС-0 (вихідний сильноокислотний катіоніт КУ-2-8), КС-1, КС-2, КС-3 (катіоніт, за різних умов модифікований ГФЦ). Значення рН розчинів складало 2,0-2,5. Сорбцію проводили в статичному режимі.

Встановлено, що процес сорбції сполук урану із однокомпонентних (за металом) розчинів протікає у змішанодифузійному режимі та описується кінетичним рівнянням псевдопершого порядку. При підвищенні температури від 283 до 303 К константи швидкості сорбції різко зростають, а час встановлення сорбційної рівноваги та час напівобміну зменшуються. Чисельні значення енергії активації процесу, розраховані з використанням рівняння Ареніуса (57,8 (КС-0), 62,0 (КС-1), 34,4 (КС-2) та 82,1 (КС-3) кДж/моль) свідчать про те, що даний процес є переважно хемосорбційним. При сорбції сполук урану із розчинів, що містили також іони Fe^{3+} , спостерігалася зміна кінетичного рівняння на рівняння псевдодругого порядку (для зразків КС-2 і КС-3) та помітне зменшення коефіцієнтів дифузії, ймовірно, внаслідок витиснення Fe^{3+} йонами уранілу з недисоційованих йонних пар. В цьому випадку кінетичні характеристики сорбції суттєво залежать від витрати сорбентів, оскільки відбувається сумісна сорбція йонів Fe^{3+} та ураніл-йонів.

*Робота виконана під керівництвом к.х.н., доцента О.В.Перлової.

ЕЛЕКТРОПРОВІДНІСТЬ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ НА ОСНОВІ LaF_3 ДОПОВАНОГО НАТРІЙ ТА КАЛЬЦІЙ ФЛУОРИДАМИ

Т.А. Герасимець¹, Ю.В. Погоренко², Р.М. Пшеничний¹

¹ Сумський державний педагогічний університет імені А.С. Макаренка
40002, Україна, м. Суми, вул. Роменська 87

² Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського НАН України
03680, Україна, Київ, просп. Палладіна 32/34
e-mail: pshenychnyi@gmail.com

В даному повідомленні представлені результати синтезу та досліджень електропровідних властивостей твердих електролітів з флуорид-іонною провідністю на основі лантан трифлуориду допованого натрій та кальцій флуоридами. Дані сполуки представляють науковий та прикладний інтерес для створення нових електрохімічних пристроїв на їх основі, таких як сенсори для визначення фтору, джерела струму тощо.

Синтез нестехіометричних сполук в системі $\text{NaF} - \text{CaF}_2 - \text{LaF}_3$ проводили в два етапи. На першому етапі методом сумісного осадження флуоридів кальцію та лантану синтезували тверді розчини складу $\text{Ca}_x\text{La}_{1-x}\text{F}_{3-x}$, де $0,03 \leq x \leq 0,7$. На другому етапі проводили спікання утворених твердих розчинів з натрій флуоридом в вакуумі при температурі 850°C та отримували нестехіометричні сполуки в системі $\text{yNaF} - (1-y)\text{Ca}_x\text{La}_{1-x}\text{F}_{3-x}$, де $0,03 \leq y \leq 0,07$.

Методом рентгенофазового аналізу встановлено, що утворені сполуки кристалізуються у тісонітовому (LaF_3) структурному типі. Розраховані параметри елементарних комірок синтезованих зразків в зазначеному інтервалі концентрацій задовільно апроксимуються правилом Вегарда.

Мостовим методом на змінному струмі досліджені електропровідні властивості синтезованих сполук.

Температурні залежності питомої провідності твердих розчинів задовільно апроксимуються рівнянням Арреніуса в координатах $\lg \sigma - 1/T$. Для зразків складу $\text{Ca}_x\text{La}_{1-x}\text{F}_{3-x}$ характерні майже прямолінійні температурні залежності провідності, а в зразках, що містять NaF простежуються дві прямолінійні ділянки (рис. 1). Більшими значеннями електропровідності характеризуються тверді розчини, що не містять натрій флуориду. Для даних зразків провідність тим більша, чим більший вміст кальцію в ньому. Величина питомої електропровідності сполук, що містять у своєму складі NaF практично не залежить від його кількості в утворених фазах.

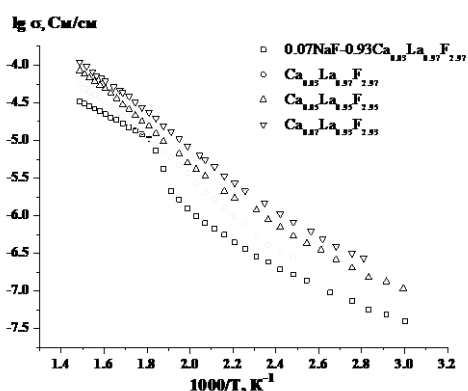


Рис. 1. Температурні залежності питомої електропровідності синтезованих зразків

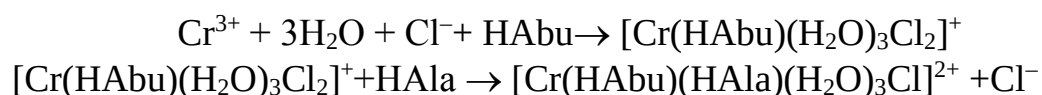
БУДОВА КОМПЛЕКСІВ ХРОМУ (III) З ЕТИЛГЛІЦИНОМ ТА АЛАНІНОМ

Жулковська Е.І., Чернушенко О.О.

*Дніпропетровський національний університет ім. Олеса Гончара,
пр. Гагаріна 72, м. Дніпропетровськ 49010, Україна*

Вивчення комплексних сполук металів з біологічно активними лігандами має великий науковий і прикладний інтерес. Найважливіша біологічна роль хрому полягає в регуляції синтезу жирів, вуглеводного обміну та рівня глюкози в крові. Хром входить до складу низькомолекулярного комплексу ФГТ, що забезпечує підтримку нормального рівня глюкози в крові і разом з інсуліном діє як регулятор рівня цукру в крові.

Комплексні сполуки хрому (III) з монодентатно координованим етилгліцином та аланіном були отримані відповідно:



Формули виведені на підставі елементного аналізу, електронної та ІЧ спектроскопії, даних кондуктометричних вимірювань. Монодентатна координація амінокислот за допомогою Оксигену карбоксильної групи, при незв'язаній аміногрупі підтверджена даними ІЧ спектроскопії: В ІЧ спектрах комплексів відсутні смуги поглинання валентних коливань протонованої карбоксильної групи $\nu(\text{COOH}) \sim 1730 \text{ см}^{-1}$; відмічається значна різниця $\nu_{\text{as}}(\text{COO}^-) - \nu_{\text{s}}(\text{COO}^-)$: 220 см^{-1} для сполуки $[\text{Cr}(\text{HAbu})(\text{H}_2\text{O})_3\text{Cl}_2]^+$ та 244 см^{-1} для сполуки $[\text{Cr}(\text{HAbu})(\text{HAla})(\text{H}_2\text{O})_3\text{Cl}]^{2+}$, з'являється смуга $\sim 580 \text{ см}^{-1}$, що відповідає валентним коливанням Cr-O, яка відсутня у спектрі вільних амінокислот. У спектрах комплексних сполук спостерігається набір частот, що характерні для протонованої та незв'язаної з металом аміногрупи $-\text{NH}_3^+$ групи: $\nu(\text{NH})$ $2800 - 3210 \text{ см}^{-1}$ для сполуки $[\text{Cr}(\text{HAbu})(\text{H}_2\text{O})_3\text{Cl}_2]^+$ та $2900-3110 \text{ см}^{-1}$ для сполуки $[\text{Cr}(\text{HAbu})(\text{HAla})(\text{H}_2\text{O})_3\text{Cl}]^{2+}$, та деформаційним коливанням $\delta_{\text{a}}(\text{NH}_3^+) \sim 1580 \text{ см}^{-1}$, підсилюється смуга симетричного деформаційного коливання $\delta_{\text{s}}(\text{NH}_3^+)$ при $\sim 1480 \text{ см}^{-1}$.

Октаєдричне оточення хрому(III) встановлено на підставі даних електронної спектроскопії. Для комплексів розраховані параметри кристалічного поля.

Комплекси	Перехід	$\nu, \text{см}^{-1}$	Dq	B	β	$\beta^0, \%$
$[\text{Cr}(\text{HAbu})(\text{H}_2\text{O})_3\text{Cl}_2]^+$	${}^4\text{A}_{2g} \rightarrow {}^4\text{T}_{1g}(\text{F})$	22700	1640	627	0.61	39.10
	${}^4\text{A}_{2g} \rightarrow {}^4\text{T}_{2g}(\text{F})$	16400				
$[\text{Cr}(\text{HAbu})(\text{HAla})(\text{H}_2\text{O})_3\text{Cl}]^{2+}$	${}^4\text{A}_{2g} \rightarrow {}^4\text{T}_{1g}(\text{F})$	22700	1700	553	0.54	46.32
	${}^4\text{A}_{2g} \rightarrow {}^4\text{T}_{2g}(\text{F})$	17000				

ЭЛЕКТРОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА PbO_2 -ЭЛЕКТРОДОВ, ОСАЖДЕННЫХ ИЗ АЦЕТАТНЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ

Крутоголова Т.В.

ГВУЗ «Украинский государственный химико-технологический университет»

49005, г. Днепропетровск, пр. Гагарина, 8

e-mail: tkrutogolova@gmail.com

Реакции, протекающие при высоких анодных потенциалах (выделение кислорода, озона и др.) представляют значительный интерес как для развития теории электрокатализа, так и электрохимического синтеза сильных окислителей и окислительного разрушения токсичных органических веществ. Известно, что на электрокаталитическую активность анодного материала оказывает влияние природа кислородсодержащих частиц, адсорбированных на поверхности электрода. Природа и количество этих частиц зависит от структурных и химических факторов, которые определяются химическим и фазовым составом, физико-химическими свойствами электрокатализаторов.

В настоящей работе в качестве электрокатализатора были выбраны материалы на основе диоксида свинца, полученные из электролитов с различным содержанием ацетат-ионов, а в качестве модельной реакции, протекающей с участием кислородсодержащих радикалов – реакция выделения кислорода (РВК). Диоксидносвинцовые электроды получали при анодной плотности тока 5 мА/см^2 из электролита следующего состава: $0,1 \text{ моль/л Pb(NO}_3)_2 + 1 \text{ моль/л HNO}_3 + X \text{ моль/л NaAc}$, где $X = 0,1 \div 1,2 \text{ моль/л}$. Реакцию выделения кислорода исследовали в перхлоратном электролите (1 моль/л HClO_4).

Показано, что при введении в электролит осаждения ацетат-ионов диоксид свинца кристаллизуется исключительно в виде β -фазы, в отличие от нитратных и метансульфонатных электролитов. Для изучения реакции выделения кислорода на PbO_2 -электродах были получены квазистационарные поляризационные кривые выделения кислорода. Установлено, что при увеличении концентрации ацетат-ионов в электролите с 0 до $\sim 0,8 \text{ моль/л}$ перенапряжение выделения кислорода уменьшается. Поскольку при использовании PbO_2 -анода РВК контролируется стадией переноса второго электрона, уменьшение перенапряжения указывает на уменьшение прочности связи кислородсодержащих радикалов с поверхностью электрода. При постоянстве фазового состава электрокатализатора, полученный эффект может быть вызван как изменением текстуры диоксида свинца, так и его химического состава за счет внедрения в растущий осадок ацетат-ионов в процессе его электроосаждения. К сожалению, в данном случае выделить один фактор в чистом виде не представляется возможным из-за их взаимосвязи.

ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ SnCl_4 С АНТРАНОИЛГИДРАЗОНОМ 2-ОН-БЕНЗАЛЬДЕГИДА В CH_3OH

Линенко И.С., Бугор Л.Н.

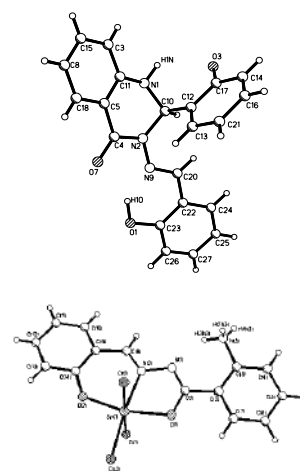
Одесский национальный университет имени И.И. Мечникова
ул. Дворянская, 2, 65062 Одесса, Украина

Ранее нами взаимодействием SnCl_4 с пиридинойилгидразонами 2-гидроксиарилальдегидов (H_2L) в метаноле (ацетонитриле) были получены и структурно охарактеризованы цвиттер-ионные соединения состава $[\text{SnCl}_3(\text{HL} \cdot \text{H})]$ с октаэдрическим $\{\text{SnCl}_3\text{O}_2\text{N}\}$ полиэдром и $\text{O}_{(\text{C}-\text{O})}-\text{N}_{(\text{CH}=\text{N})}-\text{O}_{(\text{Ph}-\text{O})}$ - координацией енольной формы гидразона с протонированным пиридиновым атомом азота и отрицательным зарядом, делокализованным на оксиазинном фрагменте [1, 2]. Интерес предстояло выяснить сохранится ли закономерность структурообразования олова (IV) при переходе от пиридинойил- к аминобензоилгидразону.

В настоящей работе обнаружено, что в результате реакции SnCl_4 с 2-аминобензоилгидразоном салицилового альдегида ($2\text{-NH}_2\text{-H}_2\text{Bs}$) в метаноле независимо от их мольных соотношений (1:3 – 3:1) образуются два продукта: **I** – 3-((2-гидроксибензилиденамино)-2-(2-гидроксифенил)-2,3-дигидрохиназолин-4(1H)-он ($\text{C}_{21}\text{N}_3\text{O}_2\text{H}_{17}$), выход 25% и **II** – комплекс $[\text{SnCl}_3(2\text{-NH}_2\text{-Bs} \cdot \text{H})] \cdot 2\text{CH}_3\text{OH}$. Строение **I**, **II** установлено РСА. В масс-спектре **I** присутствует пик с m/z 359 $[\text{M}]^+$. Его фрагментация под действием электронного удара протекает, в основном, с образованием осколочных ионов с m/z 239 $[\text{C}_{14}\text{N}_2\text{O}_2\text{H}_{11}]^+$ и m/z 120 $[\text{C}_7\text{NOH}_6]^+$.

Вовлечение в координацию азометинового азота, по-видимому, приводит к разрыву ($\text{CH}=\text{N}$)-связи, а дальнейшее взаимодействие образующегося фрагмента с некоординированными молекулами 2- $\text{NH}_2\text{-H}_2\text{Bs}$ приводит к образованию **I**.

В комплексе **II** сохраняется цвиттер-ионная форма лиганда с протонированием R-NH_3^+ и локализацией отрицательного заряда аминогруппы на оксиазинном фрагменте $\text{N}=\text{C}-\text{O}$. По результатам РСА комплекса **II** в нём происходит выравнивание длин связей $\text{N}(1)-\text{C}(1)$ (1,307 Å) и $\text{C}(6)-\text{O}(1)$ (1.305 Å).



1. N. V. Shmatkova, I. I. Seifullina, Z. A. Starikova // Russian Journal of Coordination Chemistry, 2015, Vol. 41, No. 5. p. 293–299.

2. N. V. Shmatkova, I. I. Seifullina, A. A. Korlyukov. // Russian Journal of Inorganic Chemistry, 2015, Vol. 60, No. 7, p. 879–885.

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА СПОЛУКИ $\text{La}_3\text{Mn}_{0.5}\text{SiSe}_7$

Х. О. Мельничук¹, О. В. Марчук¹, І. Д. Олексюк¹, Л. Д. Гулай²

¹*Кафедра неорганічної та фізичної хімії,*

²*Кафедра екології та охорони навколишнього середовища,
Східноєвропейський національний університет імені Лесі Українки,
пр. Воли 13, 43025 м. Луцьк, Україна.
E-mail: Oleg_M_1974@i.ua*

Халькогеніди складу $\text{R}_3\text{M}_{0.5}\text{B}^{\text{IV}}\text{X}_7$ (R – РЗМ, M – d-елемент, B^{IV} – Si, Ge, Sn, X – S, Se), що кристалізуються у структурному типі $\text{La}_3\text{Mn}_{0.5}\text{SiSe}_7$ (ПГ P6_3), в останні роки інтенсивно досліджуються, як перспективні напівпровідникові матеріали [1], [2] та ін.

Зразок складу $\text{La}_3\text{Mn}_{0.5}\text{SiSe}_7$ готували сплавлянням ($T_{\text{max}} = 1420 \text{ K}$) високочистих компонентів у вакуумованих кварцевих контейнерах. Розрахунок кристалічної структури тетрарної сполуки здійснювали за дифрактограмою, яка була отримана на дифрактометрі ДРОН 4-13 ($2\Theta = 10 - 100^\circ$, випромінювання – $\text{CuK}\alpha$, крок сканування – 0.05° , експозиція у кожній точці – 20 с). Обробку даних та визначення кристалічної структури здійснювали за допомогою пакету програм CSD.

Проведені дослідження дозволили нам вивчити кристалічну структуру нової тетрарної сполуки. $\text{La}_3\text{Mn}_{0.5}\text{SiSe}_7$ кристалізується у гексагональній сингонії із параметрами елементарної комірки: $a = 10.7242(0) \text{ \AA}$, $c = 6.0086(0) \text{ \AA}$. У структурі цієї сполуки (рис. 1) атоми La розміщені у тригональних призмах з двома додатковими атомами $[\text{La1Se}_4\text{Se}_2\text{3Se}_3]$, атоми Mn – у центрах октаедрів $[\text{Mn6Se}_2]$ а атоми Si – у тетраедрах $[\text{Si1Se}_3\text{Se}_3]$.

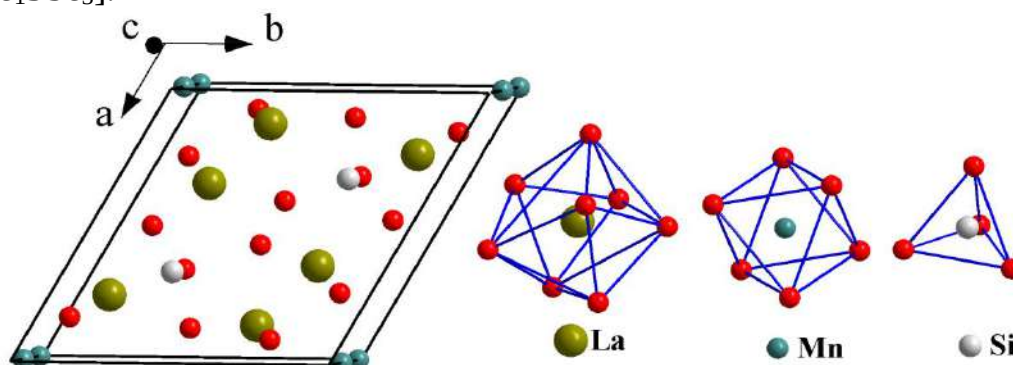


Рис. 1. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів La, Mn та Si у структурі сполуки $\text{La}_3\text{Mn}_{0.5}\text{SiSe}_7$

1. Crystal structure and magnetic properties of $\text{R}_3\text{Fe}_{0.5}\text{GeS}_7$ ($\text{R} = \text{Y, La, Ce, Pr, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho, Er}$ and Tm) / Daszkiewicz M., Pashynska Yu. O., Marchuk O. V. at al. // J. Alloys and compounds. – 2014. – V.616. – P.243-249.

2. Crystal structure and magnetic properties of $\text{R}_3\text{Co}_{0.5}\text{GeS}_7$ ($\text{R} = \text{Y, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho, Er}$ and Tm) and $\text{R}_3\text{Ni}_{0.5}\text{GeS}_7$ ($\text{R} = \text{Y, Ce, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho, Er}$ and Tm) / Daszkiewicz M., Pashynska Yu. O., Marchuk O. V. at al. // J. Alloys and compounds. – 2015. – V.647. – P.445-455.

КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЕЛЕКТРОХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ ЗА УЧАСТІ ІОНІВ КУПРУМУ У ПРИСУТНОСТІ МАЛЕЇНОВОЇ КИСЛОТИ

Осокін Є.С., Щукін А.І., Крамська О.С.*

*Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара
49625, м. Дніпропетровськ, пр. Гагаріна, 72, тел. (056) 373-12-56
osokin@cf.dnu.dp.ua*

Серед методів отримання металевих покриттів із заданими властивостями можна виділити електроліз у присутності окремих речовин органічного та неорганічного походження. Цілеспрямований підбір таких добавок неможливий без розуміння механізму їх впливу на електрохімічні процеси. Через суттєву нестійкість інтермедіатів зафіксувати та дослідити їх експериментально достатньо важко, а часто і взагалі неможливо. Тому перспективним є поєднання класичних електрохімічних методик із методами квантово-хімічного моделювання.

У попередніх дослідженнях було виявлено, що під час електролізу розчину (катод — сталева пластинка, анод — мідний стрижень), який містив 0,1 моль/л CuSO_4 та еквімолярну кількість малеїнової кислоти (МК, цис-бутендіова кислота), у анодному просторі накопичувалися жовті комплекси Cu^+ , які змішуючись із вихідним електролітом давали зелене забарвлення. У катодному просторі зміни кольору не спостерігалось. Метою даної роботи було теоретичне дослідження механізму впливу МК на електродні процеси за участі іонів Купруму.

Моделювання структури ймовірних комплексних сполук проводилось з використанням функціоналу B3LYP. Сольватаційні ефекти враховувалися за допомогою моделі поляризаційного континууму. Атоми міді описувалися за допомоги набору Wachters+f, для атомів Карбону, Кисню та Гідрогену використовували набір 6-311G (d,p). Розрахунки проводили за допомогою програми WinGAMESS.

За результатами квантово-хімічного моделювання встановлено принципovu можливість утворення σ - та π -комплексів катіонів Cu^+ та атомів Cu^0 з МК. Тобто центрами комплексоутворення можуть виступати як атоми Оксигену карбоксильних груп, так і $\text{C}=\text{C}$ -фрагмент молекули МК. Однак у першому випадку суттєвим ускладненням є, вочевидь, гідрофільність COOH та COO^- груп, які у розчині оточені декількома шарами молекул води. З огляду на експериментальні спостереження можна запропонувати наступний механізм анодного процесу: на першому етапі відбувається хемосорбція МК на мідному електроді за рахунок утворення π -зв'язків між поверхневими атомами Купруму та $\text{C}=\text{C}$ -фрагментом МК. На другому етапі відщеплення електрону спричиняє утворення π -комплексу Cu^+ в якому зберігається цей зв'язок. Утворені π -комплекси Cu^+ з МК виявляються достатньо стабільними, що їх можна зафіксувати візуально.

* Робота виконана під керівництвом проф. Варгалюка В.Ф. та доц. Полонського В.А.

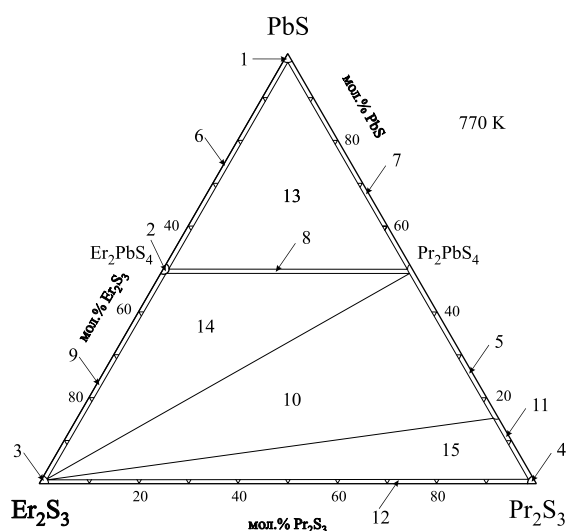
ФАЗОВІ РІВНОВАГИ В СИСТЕМІ $\text{PbS} - \text{Er}_2\text{S}_3 - \text{Pr}_2\text{S}_3$ ЗА ТЕМПЕРАТУРИ 770 К

О. В. Смітюх¹, О. В. Марчук¹, І. Д. Олексеюк¹, Л. Д. Гулай²

¹ Кафедра неорганічної та фізичної хімії,

² Кафедра екології та охорони навколишнього середовища,
Східноєвропейський національний університет імені Лесі Українки,
пр. Волі 13, 43025 м. Луцьк, Україна.
Oleg_M_1974@i.ua

У роботі представлено результати дослідження фазових рівноваг у квазіпотрійній системі $\text{PbS} - \text{Er}_2\text{S}_3 - \text{Pr}_2\text{S}_3$ (рис. 1) за температури 770 К з метою пошуку нових матеріалів та тетрарних сполук. В обмежуючих бінарних системах досліджуваної квазіпотрійної системи за температури відпалу сплавів підтверджено існування тернарної сполуки Er_2PbS_4 (ПГ $\text{Cmc}2_1$) [1] та твердого розчину $\text{Pr}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0-0.78$) [2], що локалізований вздовж системи $\text{PbS} - \text{Pr}_2\text{S}_3$. У бінарній системі $\text{Er}_2\text{S}_3 - \text{Pr}_2\text{S}_3$ сплави із компонентним вмістом 25, 50 та 75 мол. % Er_2S_3 є двохфазними.



Ізотермічний переріз системи $\text{PbS} - \text{Er}_2\text{S}_3 - \text{Pr}_2\text{S}_3$:

1 – PbS ; 2 – Er_2PbS_4 ; 3 – Er_2S_3 ; 4 – Pr_2S_3 ; 5 – $\text{Pr}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0 - 0.78$);
6 – $\text{PbS} + \text{Er}_2\text{PbS}_4$; 7 – $\text{PbS} + \text{Pr}_2\text{PbS}_4$;
8 – $\text{Er}_2\text{PbS}_4 + \text{Pr}_2\text{PbS}_4$; 9 – $\text{Er}_2\text{S}_3 + \text{Er}_2\text{PbS}_4$; 10 – $\text{Er}_2\text{S}_3 + \text{Pr}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0 - 0.78$);
11 – $\text{Pr}_2\text{S}_3 + \text{Pr}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0.78$); 12 – $\text{Er}_2\text{S}_3 + \text{Pr}_2\text{S}_3$;
13 – $\text{PbS} + \text{Er}_2\text{PbS}_4 + \text{Pr}_2\text{PbS}_4$;
14 – $\text{Er}_2\text{S}_3 + \text{Er}_2\text{PbS}_4 + \text{Pr}_2\text{PbS}_4$;
15 – $\text{Er}_2\text{S}_3 + \text{Pr}_2\text{S}_3 + \text{Pr}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0.78$).

1. Gulay L. D. Crystal structure of the RE_2PbS_4 ($\text{RE} = \text{Y}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Er}, \text{Tm}$) compounds and a comparison with the crystal structures of other rare earth lead chalcogenides/ L. D. Gulay, M. Daszkiewicz, V. Ya. Shemet // Zeitschrift fuer Anorganische und Allgemeine Chemie – 2008. – V.634. – P.1887-1895.

2. Gulay L. D. Quaternary $\text{R}_2\text{X}_3 - \text{PbX} - \text{ZX}_2$ ($\text{X} = \text{S}, \text{Se}; \text{Z} = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}$) Chalcogenides / L. D. Gulay, M. Daszkiewicz, O. V. Marchuk // Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths. – 2015. – V.48. – P.109-162.

ЭЛЕКТРОВОССТАНОВЛЕНИЕ КАТИОНОВ КОБАЛЬТА(II) ИЗ КИСЛЫХ РАСТВОРОВ

Зацинская Ю.И., Борщевич А.О.

*Днепропетровский национальный университет имени Олеся Гончара
Borandr@i.ua*

Кобальт и его сплавы являются одними из важных ферромагнитных компонентов тонкопленочных материалов, используемых в производстве наномagnetиков. Наиболее часто используемым методом для включения кобальта в такие структуры является электрохимическое осаждение. Исследования электроосаждения кобальта могут быть классифицированы по типу используемых рабочих электродов и растворов. Большинство исследований были выполнены с электродами, изготовленными из стеклоуглерода, золота, никеля и меди. Предпочтение исследователей для изучения электрохимии кобальта отдавалось хлоридным растворам, а также сульфатным системам.

В данной работе проведены исследования кинетических закономерностей процесса электровосстановления ионов Co^{2+} из кислых сульфатных и перхлоратных растворов кобальта. В качестве рабочих электродов использовали платиновый и золотой электроды.

Поскольку препаративный кобальт(II) перхлорат отсутствует, нами была разработана методика приготовления такого электролита с использованием в качестве промежуточного продукта основного карбоната кобальта. Рассмотрена возможность прямого спектрофотометрического определения концентрации кобальт(II) перхлората, поскольку раствор последнего имеет интенсивное окрашивание. Для раствора с концентрацией 0,2 моль/л Co^{2+} был измерен спектр поглощения, на основании которого была выбрана длина волны максимума поглощения (510 нм). При этой длине волны построен калибровочный график для определения концентрации кобальт(II) перхлората.

Кинетические закономерности электровосстановления катионов Co^{2+} в сульфатных и перхлоратных растворах имеют схожий характер. На вольтамперограммах катодных областей выявлены два характерных пика, первый из которых соответствует процессу выделения водорода, а второй – электровосстановлению ионов металла. Критерий Семерано для катодного пика восстановления Co^{2+} в сульфатном (0,31) и перхлоратном растворе (0,29) указывает на диффузионный контроль.

Исследовано влияние кислотности сульфатных растворов на процесс электровосстановления кобальта. Увеличение pH с 2 до 3 приводит к уменьшению высоты второго катодного пика. При значениях $\text{pH} > 3$ катодный пик смещается в область более положительных потенциалов.

**Работа выполнена под руководством д.х.н. Варгалюка В.Ф., к.х.н. Борщевич Л.В.*

XIV всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпропетровськ, 24-26 травня 2016 р.

Andruch V. 19	Грецька О.В. 74	Кривов'яз А.О. 53
Авдеєнко А.П. 43	Грицай Т.Ю. 63	Крутоголова Т.В. 86
Алексієнко Я. 57	Губецька Т.С. 15	Кузьменко О. 41
Алхімова М.М. 12	Гузенко Е.М. 17	Кузменко С.Н. 63
Аманова А.Б. 47	Гулай Л. Д. 82, 88, 90	Кулик Є.Ю. 21
Антіпов В.І. 69	Гурова М.Г. 18	Кулішова Ю. О. 11
Астахіна В.О. 37		Курганська О.О. 42
Атауллаєв З. М. 52	Дороган В.В. 64	Курязов Р. Ш. 52
	Дорофеева А. Г. 71	
Бабаджанова Д. Д. 52	Дробот В. Є. 11	Лавриченко І.В. 70
Багалій І.В. 77		Левчик В.М. 15
Баланда А.О. 39	Жабина О.Н. 10	Лендел В.Г. 53
Балацька Т.Л. 67	Жулковська Е.І. 85	Линенко І.С. 87
Балика І. А. 81		Липка О.О. 22
Балясіна О.О. 13	Загорулько С.П. 34	Літвінчук М.Б. 44
Барабаш А.В. 28, 29, 30	Зализная Е.В. 35	Лоскутова Ю. О. 45
Барбалат Д.А. 16	Заруба С.В. 19, 20	Луценко Н.В. 14
Бахалова Є.А. 31	Зацинська Ю. И. 91	Лысенко Е.Н. 43
Бджола В.Г. 33, 39, 48, 49	Зубенко А.Е. 67	Лябах Ю.В. 29
Безуглий М.Ю. 32		Ляшенко Ю.Ю. 23
Бентя А.В. 44	Івасик А.Р. 36	Макей О.П. 55
Беспалько Ю.М. 31	Іванчикова Л. 61	Макей Ю.М. 55
Бєда О.А. 32		Мануель А.М. 58
Біжко О.М. 14	Кабашна К.В. 20	Марков В.И. 34, 35, 37
Блашко Н.М. 82	Казунін М.С. 46	Мартиненко Ю.В. 46
Борщевич А.О. 91	Капелюха А.О. 55	Марчук О. В. 82, 88, 90
Бугор Л.Н. 87	Капуста К. 41, 61	Маторіна К.В. 6, 21, 25, 26
	Кибальний Н. А. 30	
Вареник Т. С. 76	Кирий Н.В. 60	Мельник Л.О. 8
Варениченко С.А. 34, 35, 37	Климкина А.Ю. 18	Мельничук Х. О. 88
Виграненко К.В. 33	Кобилінська Н.Г. 15	Меркулова О.С. 77
Вовк М.В. 42, 44	Коваленко С.И. 37	Мироняк М.О. 14
Водолазька А.І. 79	Коваленко С.І. 46	Михайлова А.С. 16
Воскобойнік О.Ю. 38	Коломєйцев Д.О. 37	Мойсейченко С.В. 18
	Коломєєць О.С. 38	
Галуцька І.Ю. 83	Кольцова Я.І. 69	Нагурна А.С. 47
Герасимець Т.А. 84	Коновалова С.А. 43	Невмержицкая Е.С. 16
Горак Ю.І. 40	Котей І.М. 39	Николаєнко К.В. 17
Гордон А.В. 6	Коцюрuba Л.В. 68	Новік Г.В. 79
Гордынская В.С. 18	Кравцева А.П. 7	Носікова К.В. 24
	Крамська О.С. 89	
	Крещик С.В. 40	

XIV всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпропетровськ, 24-26 травня 2016 р.

Олексеюк І. Д. 82, 88, 90	Синюгін А.Р. 51	Храпач Г.Ю. 60
Осокін Є.С. 89	Сінельникова М.А. 31	
Остринська О.В. 48, 49	Сирота А.К. 78	Чеботарёв А.Н. 16, 17
Падалка А.М. 75	Сливка Н.Ю. 44	Чеканов М.О. 51
Пальчиков В.О. 38, 40	Смітюх О.В. 90	Чепурна В. О. 28
Панчина Г.Л. 83	Смольникова Т. Ю. 72	Чередніченко А.С. 55
Петух С.І. 69	Снигур Д.В. 16	Черевта О.В. 35
Погоренко Ю.В. 84	Степаненко К.М. 25	Черниш Л.В. 56
Прачова М.С. 12	Сукач В.А. 42	Чернопольська Ю.А. 26
Применко В.Г. 77	Сьора Є.В. 65	
Приходько А.О. 48	Тарнавський С.С. 49	Шовкун Я. 59
Протопопов М.В. 39, 49	Тахиров Ю. Р. 52	Шурыберко К.В. 66
Пшеничний Р.М. 84	Тегза А.В. 53	
	Ткачук В.М. 42	Щукін А.І. 89
Рибакова І.Є. 50	Фарат О.К. 34, 35	Ягупольський Ю.Л. 60
Сапелкін В.Н. 33	Харченко А.В. 37	Ярмолюк С.М. 33, 39, 48, 49, 51
Северенчук І.М. 67, 70	Ходаченко О.М. 54	