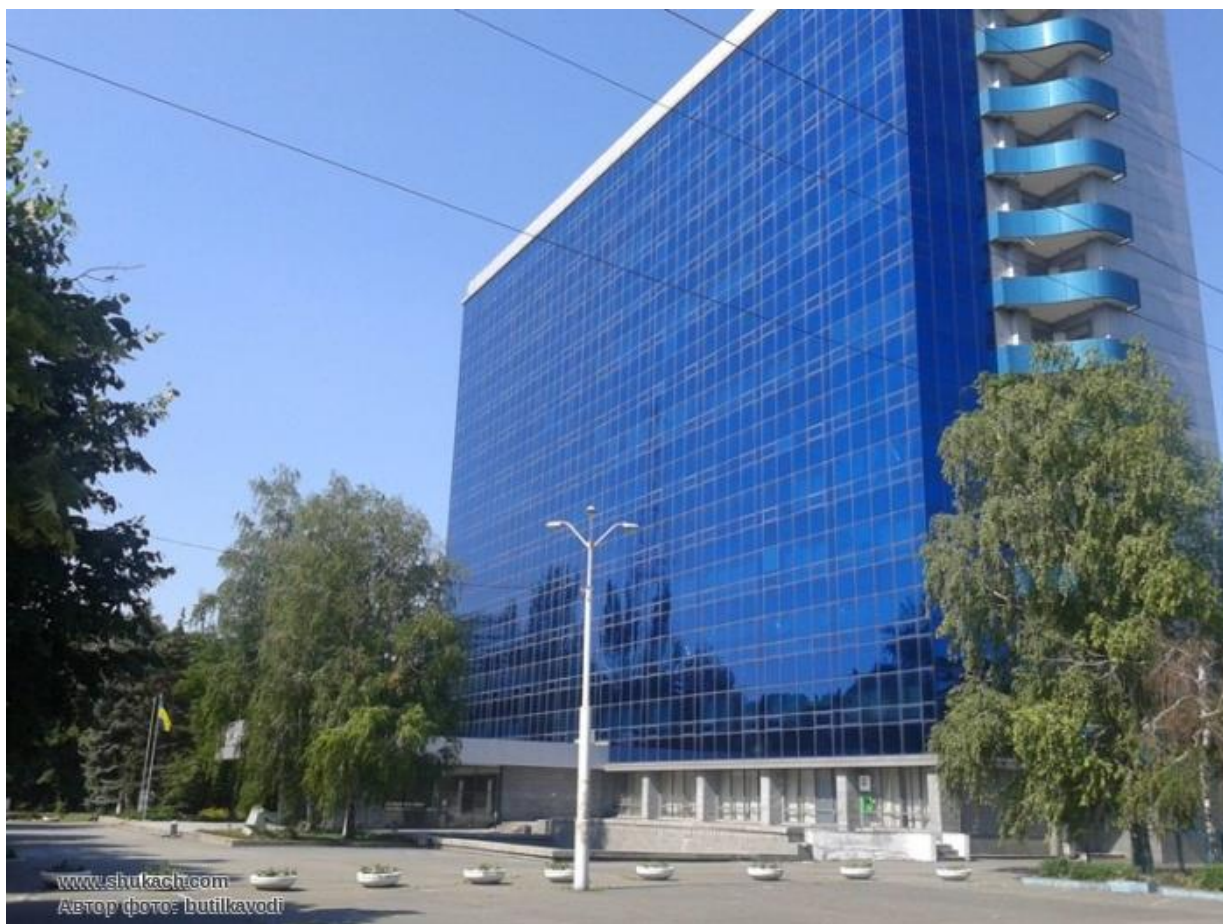


XIX Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 17-20 травня 2021 р.

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

**Інститут органічної хімії
НАН України**

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



МАТЕРІАЛИ КОНФЕРЕНЦІЇ

Дніпро
17-20 травня 2021 р.

XIX Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 17-20 травня 2021 р.

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

**Інститут органічної хімії
НАН України**

XIX ВСЕУКРАЇНСЬКА КОНФЕРЕНЦІЯ
МОЛОДИХ ВЧЕНИХ ТА СТУДЕНТІВ
З АКТУАЛЬНИХ ПИТАНЬ СУЧАСНОЇ ХІМІЇ



Дніпро
17-20 травня 2021 р.

ПРОГРАМНИЙ ОРГАНІЗАЦІЙНИЙ КОМІТЕТ

Голова - *Варгалюк Віктор Федорович*, декан хімічного факультету ДНУ, д-р хім. наук, професор, заслужений діяч науки і техніки України

Відповідальний секретар – *Маторіна Катерина Вячеславівна*, доцент кафедри аналітичної хімії, канд. хім. наук, доцент

Шермолівч Юрій Григорович, заступник директора ІОХ НАН України, д-р хім. наук, професор

Оковитий Сергій Іванович, ректор ДНУ, д-р хім. наук, професор

Вишнікін Андрій Борисович, зав. каф. аналітичної хімії ДНУ, д-р хім. наук, професор

Стець Надія Вікторівна, зав. каф. фізичної, органічної та неорганічної хімії ДНУ, канд. хім. наук, доцент

Варлан Костянтин Єлисейович, зав. каф. хімії та хімічної технології ВМС ДНУ, канд. хім. наук, доцент

Кондратюк Наталія Вячеславівна, заступник декана з наукової роботи, зав. каф. харчових технологій ДНУ, канд. тех. наук, доцент

Петко Кирило Ігорович, с.н.с. ІОХ НАН України, канд. хім. наук

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

Аніщенко Андрій Олександрович, доцент каф. фізичної, органічної та неорганічної хімії ДНУ, канд. хім. наук, доцент

Пальчиков Віталій Олександрович, зав. НДЛ каф. фізичної, органічної та неорганічної хімії ДНУ, ст. наук. співр.

Борщевич Лариса Вікторівна, доцент каф. фізичної, органічної та неорганічної хімії ДНУ, канд. хім. наук, доцент

АДРЕСА ОРГКОМІТЕТУ:

Хімічний факультет (16 корпус),

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

вул. Козакова, 22

Дніпро, 49010, Україна

XIX Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 17-20 травня 2021 р.

УДК 54(063)

ББК 24я431

Т 67

ISBN

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара
Інститут органічної хімії НАН України

Голова оргкомітету

Варгальок Віктор Федорович, декан хімічного факультету ДНУ, д-р хім. наук, професор, заслужений діяч науки і техніки України

Т67 «XIX Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії» Дніпро, 2021. - 97 с.

ISBN

УДК 54(063)

ББК 24я431

Т 67

СЕКЦІЯ

АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ

Керівник: Вишнікін Андрій Борисович, зав. каф. аналітичної хімії ДНУ,
д-р хім. наук, професор

Секретар: Сидорова Лариса Петрівна, доц. каф. аналітичної хімії ДНУ,
канд. хім. наук, доц.

ВЗАЄМОДІЯ БРОМКРЕЗОЛОВОГО ПУРПУРНОГО З НАТАМІЦИНОМ ТА ФЛОКУЛЯНТОМ FO 4800

Баланенко А.Д.¹, Жук Л.П.¹, Могильна І.О.²

¹*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара*

49010, м. Дніпро, просп. Гагаріна, 72

² *ТОВ «Компанія Біо Ресурси» м. Дніпро, вул. Д. Галицького, 53/21*

hanna.balanenko@ukr.net

Сучасне застосування натаміцину, як полієнового антибіотику широкого спектра дії, не обмежується виключно медичною сферою. Сьогодні це перспективний консервант у харчовій промисловості (харчова добавка E235), та сільському господарстві. Оброблені натаміцином посівні зерна, ферментоване м'ясо, кисломолочні продукти значно подовжують свій строк зберігання. Тривалий час природний консервант антимікотичної дії вважався нетоксичним, однак, доведено його мутагенну дію і у ряді країн застосування натаміцину як харчової добавки заборонене. Сучасні методи аналізу кількісного вмісту натаміцину, як у лікарських засобах, так і у харчових продуктах, тривалі і високовартісні. Пошук шляхів простого та доступного визначення кількісного вмісту натаміцину в лікарських препаратах та продуктах харчування визначає актуальність дослідження. Цікавим вважається отримання забарвлених аналітичних форм натаміцину за допомогою органічних реагентів та їх застосування в спектрофотометричному або візуальному колориметричному аналізі.

Спектрофотометрично показано, що поведінка барвника сульфогталеїнового ряду – бромкрезолового пурпурного (БКП) (рис. 1, кр. 1, 2; рис. 2, кр. 1) при введенні натаміцину (рис. 1, кр. 3, 4; рис. 3, кр. 2) майже не змінюється.

З дослідження впливу рН від 4 до 7 на розчини БКП-натаміцин (рис. 1) показано, що при додаванні натаміцину до барвника аналітичний сигнал суттєво не змінюється в усьому інтервалі кислотності середовища. Це свідчить про відсутність взаємодії між компонентами розчинів.

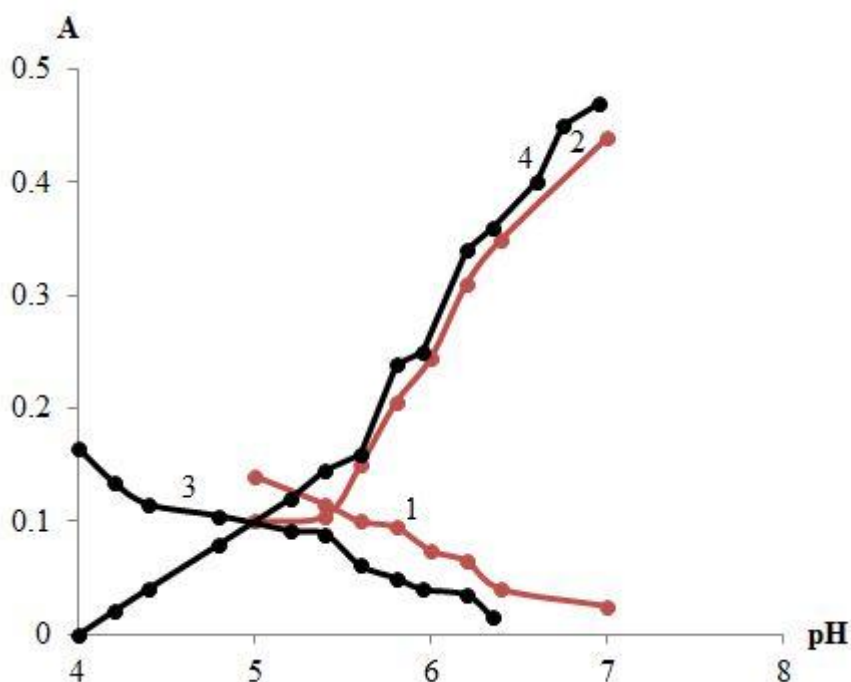


Рис. 1. – Залежність світлопоглинання від рН розчинів БКП (1, 2) та БКП-натаміцин (3, 4): при $\lambda = 430$ нм (1, 3) та $\lambda = 590$ нм (2, 4); $C_{\text{БКП}} = 1 \cdot 10^{-6}$ моль/дм³, $C_{\text{натаміцину}} = 1,62 \cdot 10^{-6}$ моль/дм³; СФ-26; $l = 1,0$ см

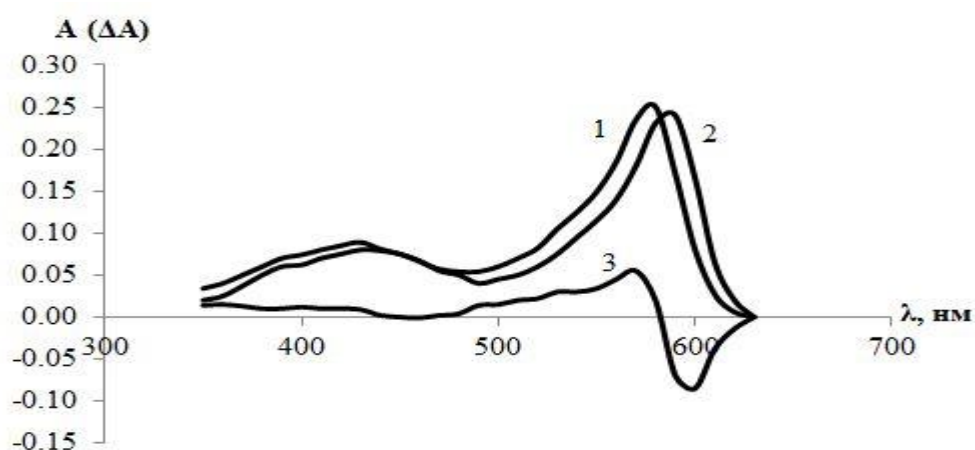


Рис. 2. – Спектри поглинання розчинів БКП (1), БКП-натаміцин (2), та різницевого спектра (3) при рН 6. $C_{\text{БКП}} = 1 \cdot 10^{-6}$ моль/дм³, $C_{\text{натаміцину}} = 1,62 \cdot 10^{-6}$ моль/дм³; СФ-26; $l = 1,0$ см

При додаванні до цих реагентів поліелектроліту ФО 4800 (сополімеру акриламіду з триметиламонійетилакрилат хлоридом – ПТМАЕА) спостерігалось зростання світлопоглинання (рис. 3, кр. 3,4 та рис. 4, кр. 2), що свідчить про утворення потрійного аддукту БКП-натаміцин- ПТМАЕА.

Зміна поведінки БКП в присутності ПТМАЕА (рис. 4, кр.1), – посилення світлопоглинання розчинів БКП-ПТМАЕА, збігається з відомостями про модифікуючу дію поліелектролітів на властивості барвників [1].

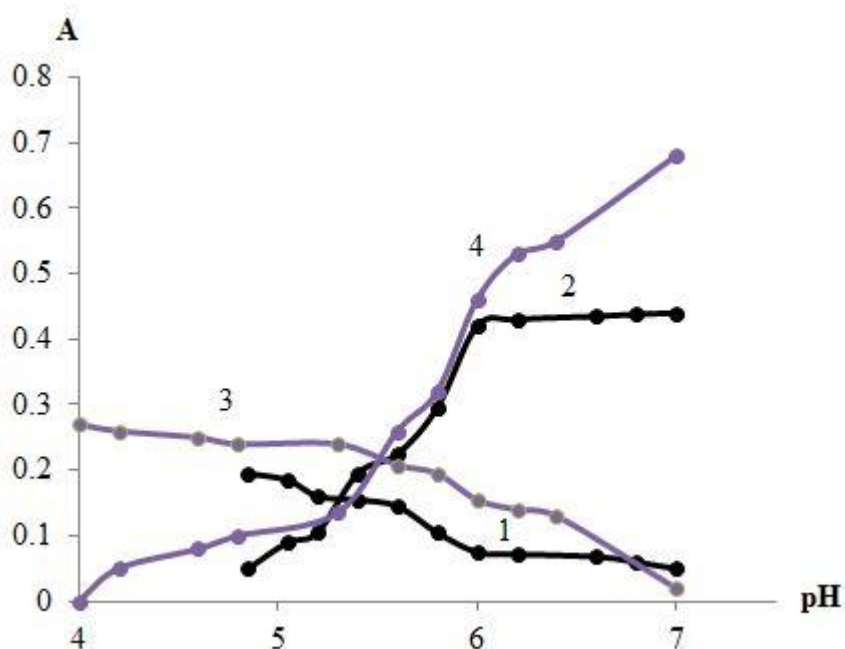


Рис. 3. – Залежність світлопоглинання від рН для розчинів БКП-FO4800 (1, 2) та БКП-FO4800-натаміцин (3, 4) при $\lambda = 430$ нм (1, 3) та $\lambda = 590$ нм (2, 4); $C_{\text{БКП}} = 1 \cdot 10^{-6}$ моль/дм³, $C_{\text{FO 4800}} = 2 \cdot 10^{-3}$ г/дм³, $C_{\text{натаміцину}} = 1,62 \cdot 10^{-6}$ моль/дм³; СФ-26; $l = 1,0$ см

У трикомпонентній системі БКП-натаміцин-FO4800 збільшення оптичної густини, порівняно з розчином БКП-FO4800 (рис. 3, 4), спостерігається в усьому вивченому інтервалі кислотності середовища.

Незначний гіперхромний ефект при короткохвильовому максимумі ($\Delta A \approx 0,1$) відзначається у діапазоні рН 5-7, і помітно зростає в області довгохвильового максимуму смуги поглинання при рН більше 6 ($\Delta A \approx 0,3$).

З кривих на рис. 4 за наявності ізобестичної точки можна зробити висновок про збільшення виходу аддукту, утворюваного аніонною формою барвника з натаміцином за посередництвом поліелектроліту, яке може бути пов'язане з впливом на кислотно-основні властивості БКП.

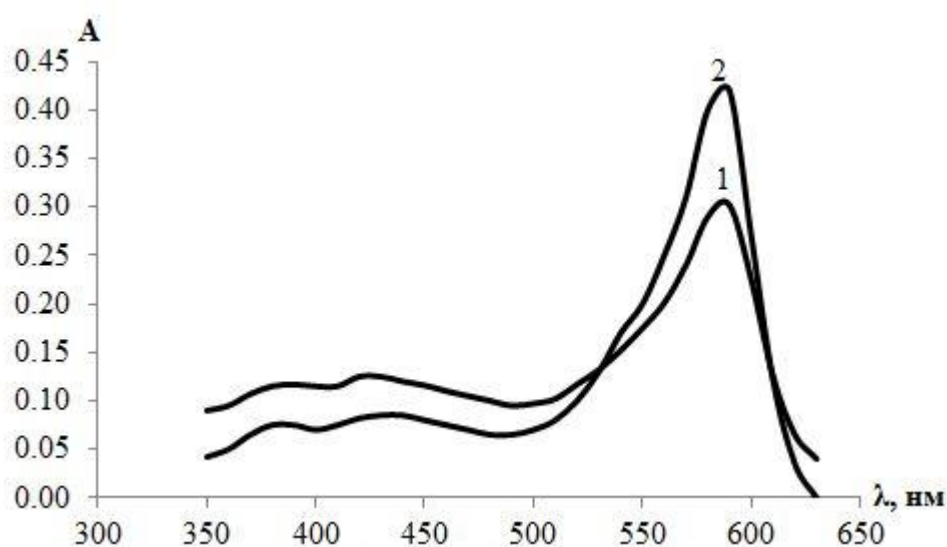


Рис. 4. – Спектри поглинання розчинів БКП-FO4800 (1), БКП-FO4800-натаміцин (2) при рН 6. $C_{\text{БКП}} = 1 \cdot 10^{-6}$ моль/дм³, $C_{\text{FO 4800}} = 2 \cdot 10^{-3}$ г/дм³, $C_{\text{натаміцину}} = 1,62 \cdot 10^{-6}$ моль/дм³; СФ-26; $l = 1,0$ см

Досліджена протолітична поведінка систем. Розраховане значення умовної константи дисоціації БКП склало $6,13 \pm 0,01$. Аналогічним чином вивчено систему БКП-натаміцин. Отримане середнє значення рН_{1/2} (рН утворення 50% аддукту) двохкомпонентної системи становить $5,90 \pm 0,03$. Відбулося слабо помітне зміщення процесу дисоціації барвника у більш кислу область рН, порівняно з чистим барвником: $\Delta \text{pH}_{1/2} = 0,23$. Але отримані результати не мають перспективного значення.

За характером кривих на рис. 3, видно наявність двох рівноваг як для системи БКП-FO4800-натаміцин, так БКП-натаміцин. Для системи БКП-FO4800 знайдені значення $pH_{1/2}$ склали $5,25 \pm 0,01$ і $5,69 \pm 0,02$. Трикомпонентна система БКП-FO4800-натаміцин має умовні константи $pH_{1/2}$ $5,53 \pm 0,02$ і $5,82 \pm 0,03$. Поява смуги поглинання аніонної форми барвника в кислішій області середовища: $\Delta pH_{1/2} = 0,88$ та $0,42$ для двокомпонентної системи; $\Delta pH_{1/2} = 0,60$ та $0,31$ та для БКП-FO4800-натаміцин пов'язано з утворенням аддуктів.

В трикомпонентній системі більш виражений аналітичний сигнал, ніж у двокомпонентних з FO 4800 або натаміцином. Оптична густина розчинів зростає на 60%, порівняно з чистим барвником. Карбоксильна та гідроксогрупи натаміцину – імовірні центри взаємодії з барвником, модифікованим катіонами поліелектроліту. Спостережувані ефекти можна пояснити утворенням аддуктів БКП-FO4800-натаміцин. Продовження зростання світлопоглинання в розчинах трикомпонентних систем при збільшенні рН понад 7 вказує на перспективність дослідження трикомпонентної системи в більш лужній області рН та оптимізації умов взаємодії між БКП та натаміцином.

Перелік посилань :

1. Чмиленко Т. С. Аналитическая химия полиэлектролитов и их применение в анализе: моногр. / Т. С. Чмиленко, Ф. А. Чмиленко. – Д. : Изд-во ДНУ, 2012. – 224 с.

**ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ СКЛАДУ БУФЕРНОГО РОЗЧИНУ
НА ВЗАЄМОДІЮ БРОМКРЕЗОЛОВОГО ПУРПУРОВОГО З
КАТІОННИМ ПОЛІКРИЛАМІДОМ**

Васюкова А.С., Чернявська А.Ю., Вишнікін А.Б.
*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара
49010, м. Дніпро, просп. Гагаріна, 72
Nasyukova2001.nv@gmail.com*

Поліелектроліти (ПЕ) – це полімери, в склад молекул яких входять групи, здатні до іонізації у розчині. Вони широко застосовуються як флокулянти для очищення природних, стічних та промислових вод. Один із основних способів визначення флокулянтів пов'язаний із застосуванням аніонних барвників. Вони утворюють іонні асоціати (ІА), за рахунок чого впливають на кислотно-основні рівноваги барвників. Такий вплив можна з успіхом використовувати для спектрофотометричного визначення флокулянтів. Однією з найбільш серйозних невирішених проблем є сильний конкуруючий вплив аніонів на утворення таких ІА. Раніше неврахування впливу аніонів солей на утворення ІА барвник – ПЕ призводило до того, що результати експериментів були погано відтворюваними або неправильними і маскували корисні залежності.

Враховуючи це було вирішено провести дослідження впливу аніонів буферних розчинів на ступінь утворення таких ІА і зробити спробу знайти області концентрацій солей і компонентів буферних розчинів, де таким впливом можна було б знехтувати. Об'єктами дослідження були водорозчинний катіонний полімер поліакриламідного ряду FO4800 (КПАА) з густиною заряду 80% та органічний барвник сульфоталеїнового ряду – бромкрезоловий пурпуровий. Дослідження проводили з використанням ацетатного та біфталатного буферних розчинів.

Знайдено, що фталат-іони, які входять у склад відповідного буферного розчину при рН 5, при якому в максимальному ступені утворюється ІА БКП з КПАА, руйнують ІА при будь-якій дослідженій концентрації в інтервалі від 10^{-5} до 10^{-3} М. Тобто фталат-іони утворюють з полімером більш стійкий іонно-асоціативний зв'язок, ніж аніони БКП. Показано, що ацетат-іони, які входять у склад ацетатного буферного розчину набагато менше руйнують ІА барвник – КПАА. Надалі планується дослідити вплив компонентів інших буферних систем на утворення ІА між КПАА та аніонними барвниками сульфоталеїнового ряду і на цій основі розрахувати константи іонної асоціації КПАА з барвниками та простими аніонами з використанням моделі рівноваг, запропонованої в дисертації Чернявської А.Ю [1].

[1] Чернявська А.Ю. Взаємодія катіонних флокулянтів поліакриламідного типу з аніонними барвниками і хелатними комплексами та використання її в аналізі.: дис... канд. хім. наук: 02.00.02. / Чернявська Анна Юріївна. – Ужгород, 2021. – 204 с.

**ПРИСКОРЕННЯ СТАДІЇ ПРОБОПІДГОТОВКИ ТЕХНОГЕННО
НАВАНТАЖЕНИХ ҐРУНТІВ ПРИ ВИЗНАЧЕННІ ВАЖКИХ
МЕТАЛІВ**

Недоступ В.К., Смітюк Н. М.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

49010, м. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72

За масштабами впливу на навколишнє середовище металургійна та хімічна промисловість займають одне з перших місць. При роботі металургійних та коксохімічних заводів в атмосферу можуть виділятися велика кількість важких металів з пилом у вигляді тонкодисперсних частинок. Розподіл пилу навколо заводів залежить від багатьох факторів, зокрема від рози вітрів. З повітря частинки, що містять важкі метали, потрапляють в ґрунт. А саме ґрунт знаходиться в центрі транскордонного перенесення та міграції ВМ до суміжних середовищ. Вивчення вмісту важких металів, зокрема таких токсичних, як плумбум, купрум та ніколь, в ґрунтах необхідно для контролю за станом навколишнього середовища, охорони від забруднення.

Метою роботи було прискорення пробопідготовки при визначенні важких металів у ґрунтах відібраних поблизу техногенних об'єктів м. Кам'янське - ПАТ "Дніпровський коксохімічний завод" та ПАО «Дніпрівський металургійний комбінат. Відбір проб проводили на різній відстані від заводів, а саме біля заводу (0), 100, 200, 300, 500, 700 та 1000 м. Аналіз отриманих даних дозволить провести екологічну оцінку стану ґрунтів навколо заводів.

Досконало проведена пробопідготовка зразків дозволяє не лише прискорити аналіз, але й підвищити точність одержуваних результатів,

розширити досліджуваний діапазон значень, підвищити безпеку дослідження, поліпшити відтворюваність і зменшити похибку результатів.

Вміст важких металів в аналізованих зразках визначали методом полум'яної атомно-абсорбційної спектроскопії на спектрофотометрі С-115 ПКС за градувальними графіками.

Для оцінки вмісту важких металів зазвичай проводять визначення валовий аналіз з застосуванням сильних кислот та окисників. Така пробопідготовка дозволяє майже повністю вилучити всі метали в розчин. Результати визначення валового вмісту можна вважати 100-відсотковими та проводити розрахунки ступеню вилучення інших форм елементів в ґрунтові витяжки.

Загальну забрудненість ґрунту характеризує валова кількість важких металів. Доступність же елементів визначається їх рухомими формами. Тому вміст у ґрунті рухомих форм важких металів - найважливіший показник, що характеризує санітарно-гігієнічну обстановку і визначає необхідність проведення меліоративних детоксикаційних заходів.

Залежно від використаного екстрагента вилучається різна кількість рухомих форм важких металів, яку з певною умовністю можна вважати доступною для рослин. Для екстракції рухомих форм важких металів використовуються різні хімічні сполуки, що мають певну екстрагуючу силу: кислоти, солі, буферні розчини і вода. Складність обумовлюється тим, що доступність для рослин рухомих форм важкого металу залежить від властивостей ґрунту і специфічних особливостей рослин. При цьому поведінка в ґрунті кожного елемента має свої конкретні, властиві йому, закономірності.

Визначено концентрації розчинних форм плюмбуму, купруму та нікелю в аналізованих зразках ґрунту. В якості екстрагентів

використовували розчини 1 М хлоридної (рН=1,0) та ацетатної (рН=2,4) кислот. Ґрунтові суспензії струшували за допомогою ротатору впродовж 1-ї години. Оцінку та порівняння ефективності методик пробопідготовки проводять за показниками ступеню вилучення елементів з ґрунту. За цим показником вилучення елементів в розчин 1,0 М хлоридної кислоти більш значиме з ґрунтів, відібраних на відстані не більше 500 м від ДКЗ. Імовірно, що природа ґрунтів в цьому випадку відіграє певну роль, що показано на прикладі результатів визначення плумбуму в ґрунтових витяжках (рис. 1 а, б)

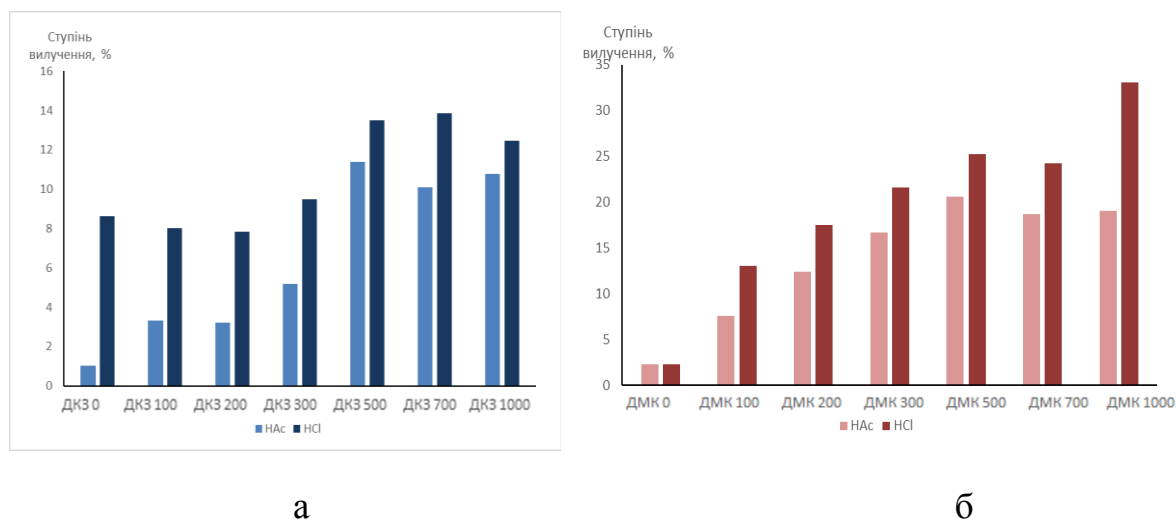


Рис..1. – Ступінь вилучення плумбуму з ґрунту, відібраного поблизу
а)ДКЗ та б) ДМК при визначенні за агрохімічною методикою

На рис. 1 показано, що при застосуванні агрохімічної методики можливо вилучити не більше 33% потенційного запасу елементів з ґрунтів, зокрема плумбуму. Найбільший вміст важких металів в ґрунтах спостерігається на відстані 700-1000 м від обох заводів. Напевно, заводи не мають гарного обладнання для очистки викидів у атмосферу і тому з

відводом в атмосферу газів також тонкодисперсні частки пилу разносяться на певну відстань навкруги заводів, тим самим забруднюючи їх .

Для пришвидшення пробопідготовки аналізованого ґрунту досліджено ультразвуковий вплив при вилученні розчинних форм плюмбуму, купруму та нікелю. Обробку проводили при частоті 22 кГц та інтенсивності 3,88 Вт/см² протягом 10 хвилин за допомогою ультразвукового диспергатора УЗДН-1

При використанні хлоридної та оцтової кислот в якості екстрагенту та УЗ обробки в 1,5 рази досягається краще вилучення розчинних форм всіх металів. При використанні у якості екстрагентів 1,0 М розчинів хлоридної та оцтової кислот спостерігається вилучення розчинних форм металів за 10 хвилин, що скорочує час пробопідготовки в 6 разів.(рис. 2 а, б).

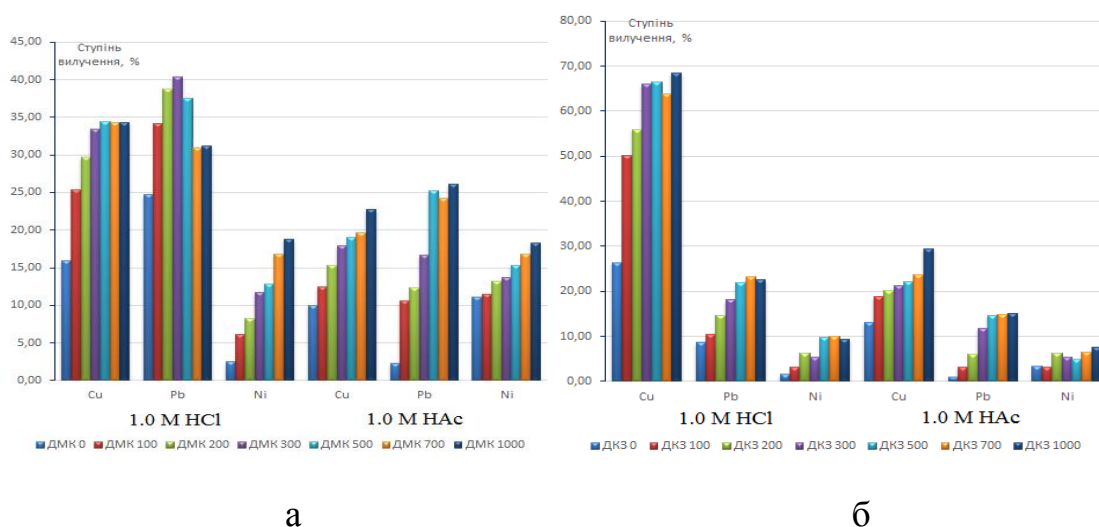


Рис. 2. – Ступінь вилучення елементів з ґрунту, відібраного поблизу а) ДМК, б) під дією УЗ ($f=22$ кГц, $I=3.88$ Вт/см², $t=10$ хв) в хлоридну та оцтову кислоти

Показано, що з використання УЗ підвищується ступінь вилучення елементів в ґрунтові витяжки. У випадку визначення біля заводу ДМК

вмісту купруму в хлоридній ґрунтовій витяжці показано, що можна досягти ступеню вилучення більше 65%. Під дією УЗ відбувається значне диспергування зразків ґрунту, руйнування ґрунтових колоїдів, що призводить до збільшення контакту фаз та підвищення ступеню вилучення елементів. При використанні УЗ методики отримання витяжок ступень вилучення купруму досягається майже в двічі більший в порівнянні з використанням АХ методики (рис. 2.). При використанні оцтової кислоти показники ступеню вилучення в 1,5 разів нижче в порівнянні з їх визначенням в хлоридній ґрунтовій витяжці.

1. Теплая Г. А. Тяжелые металлы как фактор загрязнения окружающей среды / Г. А. Теплая // Вестник экологического образования. – 2013. – Т.1. – в.23. – С. 182 – 191.

2. Крылов В. А. Твердофазное и жидкофазное микроэкстракционное концентрирование примесей / В. А. Крылов, П. В. Мосягин // Учебное пособие. –2016. – С. 6 – 7.

3. Гончарук Е.А. Тяжелые металлы: поступление, токсичность и защитные механизмы растений (на примере ионов кадмия) / Е. А. Гончарук, Н. В. Загоскина // Вісник Харк.нац. ун-ту. – 2017. – №1 (40). – С. 35-49.

4. Теплая Г.А. Тяжелые металлы как фактор загрязнения окружающей среды / Г.А. Теплая // Астраханский вестник экологического образования. – 2013. – № 1 (23). – С. 182-192.

**ЕЛЕКТРОДНО-АНАЛІТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ
ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНОГО СЕНСОРУ, СЕЛЕКТИВНОГО ДО
ВІТАМІНУ РР**

Гончаров Т.А., Маторіна К.В.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

49010, м. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72

0959398707taras@gmail.com

Вітамін РР давно відомий у медичній практиці, як біологічно-активна речовина, що попереджає серйозне захворювання, іноді з летальними наслідками, – пелларгу, яка супроводжується спутаністю свідомості, галюцинаціями, депресією, діареєю, блювотою та дерматитами. Значущість вітаміну РР полягає в його незамінній ролі в усіх окисно-відновних процесах, що відбуваються в організмі, крім цього він регулює діяльність вищої нервової системи, сприяє процесам травлення, захищає серцево-судинну систему, розширяє судини, попереджає розвиток тромбозів та гіпертонічної хвороби, нормалізує рівень холестерину, сприяє процесам детоксикації організму, приймає участь в утворенні ряду найважливіших гормонів (тироксину, кортизолу, інсуліну, тестостерону, прогестерону, естрогенів).

При дефіциті нікотинової кислоти порушується нормальний перебіг біохімічних процесів у нервових клітинах та з'являються симптоми, що свідчать про ураження нервової системи. При цьому гіпервітаміноз зустрічається рідше й супроводжується не лише психоневрологічними явищами, а ще й різноманітними кожними проблемами.

Актуальність дослідження викликана тим що ці сполуки входять до складу багатьох продуктів та медикаментів, але в країнах третього світу

часто фальсифікуються. У науковій літературі існують відомості, про те, що вітамін В₃ під час пандемії успішно використовується при лікуванні COVID – 19.

Організм людини незалежно від віку і статі має велику потребу в ніацині, але вона різна. Наприклад, дорослим на день потрібно від 15 до 25 мг, для підлітків і дітей потрібно від 15 до 20 мг, а для осіб літнього віку потреба в ніацині сильно зменшується, тому їм достатньо 1,2– 1,4 мг/добу. Вагітні жінки потребують ніацину більше на 20 мг/добу.

Доступно багато методів для визначення вітаміну РР у харчових продуктах (молочних, хлібобулочних, м'ясних) та лікарських препаратах, але кожен з них потребує специфічної пробопідготовки та є довготривалим. Перспективною з цієї точки зору є потенціометрія з використанням сенсорів, селективних до біологічно-активних речовин, в тому числі вітамінів.

Метою роботи є розробка достатньо чутливого потенціометричного сенсору, селективного до вітаміну РР.

Синтезовані електродно-активні речовини у вигляді осадів на основі асоціатів РР–Cu(CH₃COO)₂, РР – CrCl₃ та РР–молібдофосфорна кислота (МФК). Проведено скрінінг сконструйованих потенціометричних сенсорів за основними електродно-аналітичними характеристиками: динамічний діапазон концентрацій, крутизна електродної функції, час відгуку, час життя мембрани, мінімальна визначування концентрація, необхідність попереднього кондиціонування.

Отримали електродну функцію сенсору на основі осаду РР – CrCl₃ у водних розчинах вітаміну РР. У якості внутрішнього розчину використовували водний розчин вітаміну РР з концентрацією $C = 1 \cdot 10^{-4}$ М. Встановлено, що інтервал лінійності спостерігається при рС 3,0 – 4,3;

Крутизна електродної функції складає 53,8 мВ/рС, що відповідає теоретичному значенню нахилу нернстівської функції для однозарядних йонів. Час відгуку складає 2 хвилини.

Отримали електродну функцію мембранного сенсору на основі ЕАР: $\text{PP-Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ у водних розчинах вітаміну РР. У якості внутрішнього розчину використовували водний розчин вітаміну РР з концентрацією $C=1 \cdot 10^{-4}$ М (рис.1).

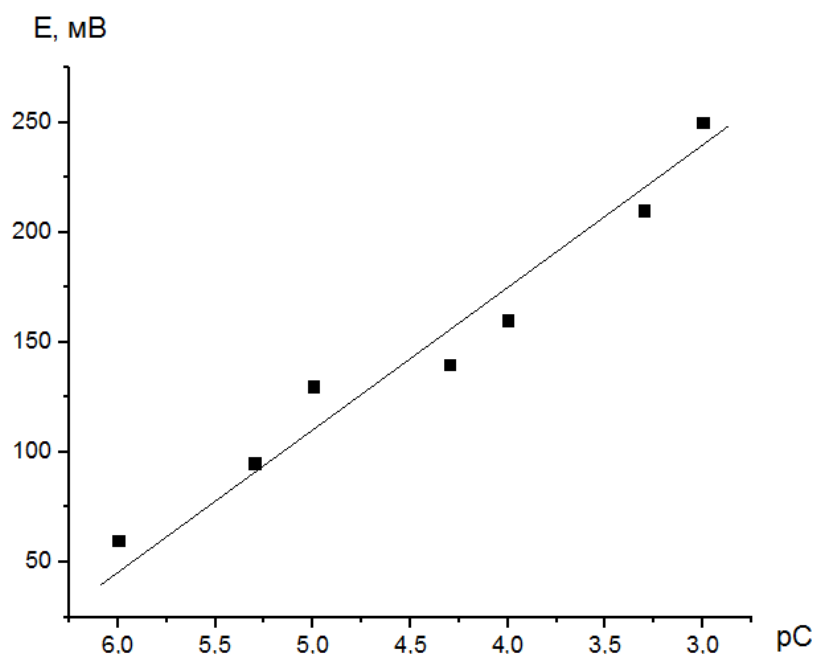


Рис.1 Залежність потенціалу сенсору мембранного сенсору з ЕАР: $\text{PP-Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ від концентрації вітаміну РР, внутрішній розчин вітаміну РР $C=1 \cdot 10^{-4}$ моль/л, $R^2=0,9717$

Видно, що інтервал лінійності спостерігається у достатньо широкому діапазоні рС 3,0-6,0, при цьому крутизна електродної функції складає 63 мВ/рС, час відгуку в області невеликих концентрацій не перевищує 1 хвилини. Встановлено, що кондиціонування данного сенсору не є доцільним.

Проведено кількісне визначення вітаміну РР за допомогою запропонованого потенціометричного сенсору з ЕАР: $\text{PP-Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ у реальному об'єкті - розчині для ін'єкцій «Нікотинава кислота Дарниця». Правильність результатів перевірена альтернативним алкаліметричним методом (таблиця 1).

Таблиця 1 – Кількісне визначення вмісту вітаміну РР у лікарському препараті методом прямої потенціометрії та кислотно-основного титрування

Метод	Знайдено, г/л	S^2	S	S_r	F
Пряма потенціометрія	9,23	0,1296	0,36	0,037	1.34
	9,63				
	9,95				
Кислотно- основне титрування	9,32	0,0961	0,31	0,032	—
	9,49				
	7,92				

Оскільки розрахований F-критерій менший за табличне значення $F_{\text{розрах}} < F_{\text{табл}}$ ($F_{\text{табл}}=19$), то розбіжності $S_{\text{потенц}}$ та $S_{\text{алкал}}$ незначні, і за інших рівних умов аналізу дані, отримані потенціометричним методом характеризуються гарною відтворюваністю.

Сконструйований сенсор на основі ЕАР: $\text{PP-Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ опробований на реальному об'єкті – лікарському засобі «Нікотинава кислота Дарниця» ($9,60 \pm 0,89$ г/л $S_r=3,7\%$).

**ХРОМАТО-МАС-СПЕКТРОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ
АРОМАТИЧНИХ ВУГЛЕВОДНІВ З ПОПЕРЕДНІМ
КОНЦЕНТРУВАННЯМ МЕТОДОМ ПАРОФАЗНОЇ
МІКРОЕКСТРАКЦІЇ У РЕАКТОР**

Тамен А.-Е., Березюк М.О., Аніщенко А.О., Вишнікін А.Б.

*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, пр. Гагаріна
72, Дніпро, 49010*

Аналіз чистих летких органічних сполук або їх сумішей не є складним і може бути здійснений шляхом безпосереднього впорскування аналіту в газовий хроматограф. Однак аналітичне завдання стає набагато більш складним, коли аналіти містяться у складній матриці, такій як ґрунт, продукти харчування, косметика, полімери чи фармацевтична сировина. Воно полягає тоді у повному відокремленні аналітів з матриці відтворюваним способом і точному визначенні їх маси або концентрації.

Одним з головних способів пробопідготовки летких органічних сполук (ЛОС) до аналізу хроматографічними методами є парофазна екстракція. В цьому підході леткі та напівлеткі органічні сполуки спочатку переводять в газову фазу, а потім або одразу вводять газову фазу у прилад (статичний варіант). Для аналізу слідових кількостей ЛОС або там, де необхідна їх вичерпна екстракція, кращим є динамічне вилучення. В цьому варіанті ЛОС постійно видаляються із зразка потоком інертного газу. Це забезпечує вичерпне вилучення і концентрування аналітів.

В цій роботі запропоновано концентрувати ЛОС шляхом їх поглинання мікрооб'ємом органічного розчинника, який розміщується у реакторі, закріпленому над аналізованим розчином. На даний час єдиним варіантом парофазної мікроекстракції є концентрування ЛОС

мікрокраплею екстракційного розчинника, який тримається на кінчику мікрошприца. Це має своїм наслідком такі серйозні недоліки, як постійна небезпека спонтанного відриву краплі, обмеження у часі екстракції, швидкості перемішування і об'ємі екстрагенту, який не може бути більше, ніж 3-5 мл.

Метод парофазної мікроекстракції у реактор апробовано нами для вирішення популярної аналітичної задачі – визначення ВТЕХ (суміш ароматичних вуглеводнів бензен, толуен, етилбензен та о-, м-, і п-ксилени) методом хромато-мас-спектрометрії. Раніше нами показано, що даним методом можна з успіхом визначати леткі неорганічні сполуки, такі як йодид або йодат за йодом, сульфід або нітрит за сульфур діоксидом або нітроген оксидами, відповідно. Ефективність вилучення складала до 12%.

Перші дослідження показали, що ЛОС ВТЕХ мають високу екстракційну здатність до вилучення в варіанті парофазної мікроекстракції у реактор, яка складала до 50%. Підібрані умови хроматографічного розділення. Як екстрагент обрано н-октанол, який має достатньо високу температуру кипіння 195 оС. Таким чином, всі аналіти виходять з колонки раніше, ніж головний розчинник. Складено яку температурну програму. Як внутрішній стандарт обрали н-бутанол.

Отримано градувальну залежність відношення площ хроматографічних піків ксилену до площі н-бутанолу у межах концентрацій від 60 до 250 мг/л та від 6 до 25 мг/л для вилучення ксилену з 5 мл водного розчину у 100 мкл н-октанолу. Приблизний ступінь концентрування склав 25. Якщо врахувати, що об'єм екстракту можна зменшити до 1-2 мкл, а об'єм донорної фази збільшити до 10 мл, а також те, що для вимірювань сигналу ксилену не було досягнуто межі визначення, це може дати можливість отримати чутливість на рівні 0,1 – 1

мкг/л і градувальну залежність у межах від 10 до 20 000 мкг/л. Метод буде розповсюджено для визначення інших представників групи речовин ВТЕХ, а також для визначення залишкових кількостей органічних розчинників у лікарських препаратах.

Також було вперше показано, що даний підхід можна з успіхом використати для визначення ВТЕХ методом спектрофотометрії. Ароматичні вуглеводні добре поглинають в УФ-ділянці спектру, що було використано для їх визначення в мікрокуветі об'ємом 50 мкл після вилучення з 5 мл водного розчину.

АНАЛІТИЧНИЙ КОНТРОЛЬ ЯКОСТІ ДЕЯКИХ КОСМЕТИЧНИХ ЗРАЗКІВ

Сегеда О.А. , Сидорова Л.П.

Дніпровський національний університет ім. О. Гончара,

просп. Гагаріна, 72, 49000, м. Дніпро

olyasegeda1708@gmail.com

Косметичні препарати - речовини, призначені для контакту з зовнішніми частинами людського тіла з метою його очищення, надання йому аромату, краси, зміни його зовнішнього вигляду, його захисту або збереження, або поліпшення запахів тіла. Лосьйони і тоніки відносяться до рідких гомогенних косметичний засобів, які застосовуються для додаткового очищення та тонізування шкіри. Лосьйонами називають препарати, які містять спирт, тоніки, як правило, не містять спирту.

При органолептичних дослідженнях лосьйонів і тоніків визначають зовнішній вигляд, колір та запах. Косметичний препарат об'ємом 5 мл досліджуваної речовини, вміщували у пробірку та на фоні білого паперу проглядали у денному світлі. Запах визначали органолептично за допомогою щільного паперу, який занурювали у досліджувану речовину.

Для визначення рН, досліджуваний продукт об'ємом 15 мл вміщували в склянку місткістю 50 мл, кінці електродів вміщували в досліджувану рідину. Показання рН знімали за шкалою рН-метру.

Зв'язаний і вільний луг визначали титруванням. У плоскодонній колбі зважували 1 г продукту, доливали 100 мл гарячої дистильованої води, струшували, а потім після охолодження до кімнатної температури додавали 2-3 краплі метилового помаранчевого і титрували 0,01 М розчином соляної кислоти до зміни жовтого забарвлення в рожевий.

Таблиця 1 – Результати дослідження тоніків та лосьйонів-тоніків.

Назва препарату	Зовнішній вигляд	Колір	Запах	рН	Кількість вільного та зв'язаного луку	
					$X_{cp} \pm A$	S_r
Черный жемчуг	Однорідна рідина	Прозорий, блакитний	Парфумований	5,6	$1,77 \pm 0,01$	0,01
Чистаялиния		Прозорий, зеленуватий	Волошковий	6,5	$2,55 \pm 0,05$	0,02
Ziaja		Прозорий	Трав'яний	6,6	$2,82 \pm 0,03$	0,02

Література:

1. Методичні вказівки до виконання лабораторних робіт з курсу “Хімія та технологія косметичних засобів” для студентів IV курсу спеціальності 7.091628/ Укл.: О.Г. Кольцова, О.В. Вишнікіна. – Дніпропетровськ: УДХТУ, 2007. – 20 с.
2. ГОСТ 29188.2-91. Изделия косметические. Метод определения водородного показателя рН.
3. ГОСТ 29188.5-91. Изделия косметические. Методы определения свободной и связанной щелочи.

СЕКЦІЯ

ОРГАНІЧНА ТА ФАРМАЦЕВТИЧНА

ХІМІЯ

Керівник: Аніщенко Андрій Олександрович, доц. каф. фізичної, органічної та неорганічної хімії ДНУ, канд. хім. наук, доцент

Секретар: Гапонов Олександр Олексійович, ст. наук. спів.

КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ СТРУКТУРИ ДЕЗОКСИЦИТИДИЛОВОЇ КИСЛОТИ

Кирилова Д. В., Оковитий С.І.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

49010, Дніпро, пр. Гагаріна, 72. E-mail: darinakir.dk@gmail.com

Визначення структури дезоксирибонуклеїнової кислоти (ДНК) людини є одним із найбільш важливих досягнень сучасної науки. Відомо, що молекула ДНК складається з послідовності нуклеотидів, які відіграють важливу роль в біохімічних процесах. Протягом останніх 30 років пари основ ДНК аденін-тимін та гуанін-цитозин являють собою структурні моделі квантово-хімічних розрахунків для імітації властивостей ДНК [1]. Це означає, актуальним є дослідження фрагментів ДНК, які містять усі структурні компоненти: нуклеозиди, протиіони та цукрово-фосфатний скелет [2].

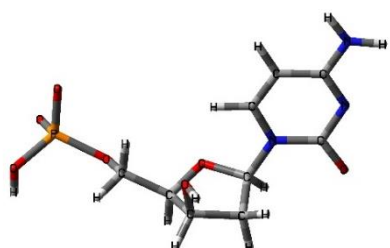
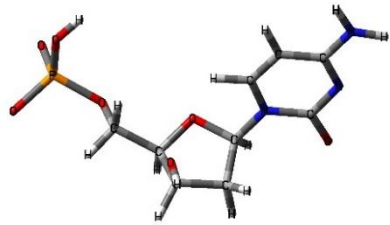
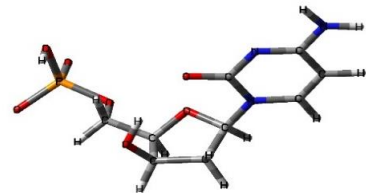
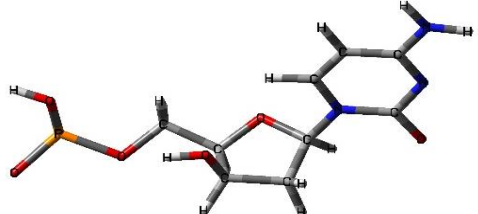
Квантово-хімічне дослідження термодинамічних властивостей нуклеотидів ДНК (розрахунок відносних вільних енергій Гіббса та відповідних констант рівноваги в газовій фазі) – 2'-дезоксирибонуклеотидів дезоксиаденілової (pdA), дезоксицитидилової (pdC), дезоксигуанілової (pdG) та дезокситимідилової (pdT) кислот та їхніх моно- та дидепротонованих форм вперше запропонували Горб Л., Шишкін О. та Лежчинський Д. [3]. Відомо, що ці кислоти існують в наступних конформаціях: north/anti, north/syn, south/anti та south/syn [4].

Для проведення термодинамічних розрахунків моно-форми дезоксицитидилової кислоти у розчині в даній роботі було проведено конформаційний пошук можливих структур молекули моноаніону pdC. Конформаційний пошук проводили методом молекулярної механіки ММ+, який вважається швидким та доволі точним у моделюванні органічних

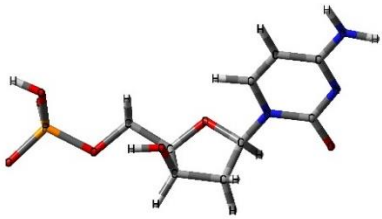
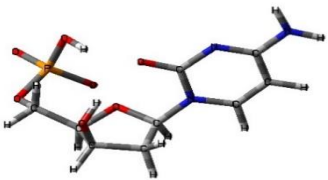
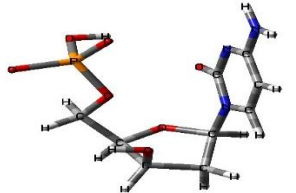
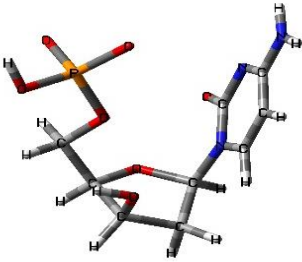
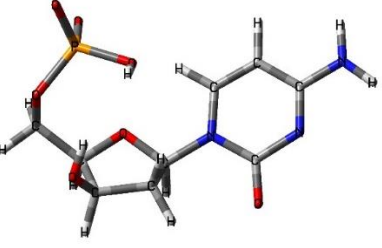
молекул [5]. Структура всіх локалізованих ізомерів, величини торсійних кутів, відносно яких можливе обертання, та відносні енергії молекул наведені в табл. 1.

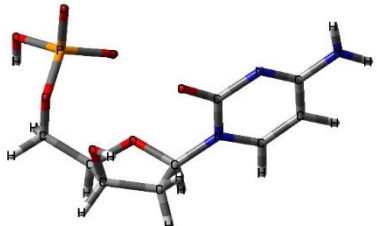
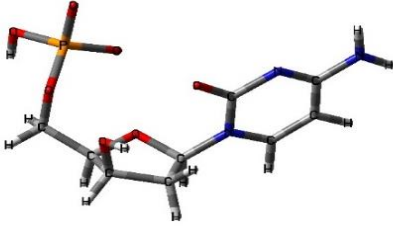
В ході розрахунку встановлено, що перші 6 структур є найбільш стійкими, їх відносні енергії лежать в межах 32,78-33,27 (ккал/моль).

Табл.1

№	Торс. кути			Заг. енергія (ккал/моль)	Структура
	$\phi 1$	$\phi 1$	$\phi 3$		
1	-94,37	64,58	-179,38	32,78	
2	-90,39	65,96	179,74	32,88	
3	105,64	67,51	-179,13	33,01	
4	-88,21	-54,37	-178,66	33,13	

*XIX Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань
сучасної хімії, Дніпро, 17-20 травня 2021 р.*

5	-84,07	-175,47	176,99	33,13	
6	92,50	77,16	-71,75	33,27	
7	22,68	-64,44	166,99	34,60	
8	9,64	-61,39	-178,21	35,31	
9	-117,79	-76,39	73,33	35,81	
10	20,81	-170,74	-72,59	36,73	

11	94,14	142.51	71,81	38,09	
12	116,36	-60,97	100,77	38,25	

Перелік літературних посилань

1. Šponer, J., Lankaš, F. Computational Studies of RNA and DNA, Challenges Eds.; *Springer Netherlands: Dordrecht*. 2006. 652 P.
2. Gorb, L., Pekh, A., Nyporko, A., Ilchenko, M., Golius, A., Zubatiuk, T., Zubatyuk, R., Dubey, I., Hovorun, D. M., Leszczynski, J., Effect of Microenvironment on the Geometrical Structure of d(A)₅ d(T)₅ and d(G)₅ d(C)₅ DNA Mini-Helices and the Dickerson Dodecamer: A Density Functional Theory Study. *Phys. Chem. B*. 2020. Vol. 124. P. 9343–9353.
3. Gorb, L., Shishkin, O., Leszczynski, J., Charges of Phosphate Groups. A Role in Stabilization of 2'-deoxyribonucleotides. A DFT Investigation. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*. 2005. Vol. 22. P. 441-454.
4. IUPAC-IUB Joint Commission on Biochemical Nomenclature Abbreviations and Symbols for the Description of Conformations of Polynucleotide Chains. *Current protocols in Nucleic Acid Chemistry*. 2001. Vol. 00. P. A.1C.1-A.1C.9.
5. Belostotskii, A. A “Fast” Computational Method: Molecular Mechanics. *Conformational Concept for Synthetic Chemist's Use*. 2015. P. 261-384.

КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЕНАНТІОСЕЛЕКТИВНОЇ РЕАКЦІЇ НАПІВЕМПІРИЧНИМ МЕТОДОМ PM7

Борисенко І.О.

*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара
49010, Дніпро, пр. Гагаріна, 72
E-mail: borysenkoir@gmail.com*

Однією із перспективних областей застосування ферментів є використання їхньої високої енантіоселективності для асиметричного синтезу [1]. Напрямок асиметричного біокаталізу активно розвивається і на сьогодні у промисловому виробництві використовуються ферменти як дикого типу, так і мутантні [2,3].

Теоретичне дослідження енантіоселективних реакцій є складною задачею, яка вимагає високої точності, оскільки необхідно відтворювати невеликі відмінності в енергіях. Крім того кількісне вивчення ферментної енантіоселективності вимагає методів, за допомогою яких можна дослідити повні механізми реакцій, включаючи локалізацію всіх інтермедіатів та перехідних станів на шляху реакції. В останні роки при вивченні ферментної енантіоселективності досить успішно застосовуються такі методи, як QM/MM, метод емпіричного валентного зв'язку (empirical valence bond) та кластерний підхід. У разі розділення енантіомерів енантіоселективність описується через співвідношення констант специфічності (k_{cat}/K_M) для двох енантіомерів. Не зважаючи на те, що K_M не розраховується явно в квантово-хімічному підході, відношення k_{cat}/K_M може бути оцінено, якщо врахувати різницю енергій перехідного стану лімітуючої стадії для двох енантіомерів щодо загального нуля ($\Delta E^\ddagger$). Вираз для енантіомерного надлишку має вигляд [4]:

$$ee = \frac{e^{\frac{\Delta E^\ddagger}{k_B T}} - 1}{e^{\frac{\Delta E^\ddagger}{k_B T}} + 1} \quad (1)$$

Метою даної роботи є квантово-хімічне моделюванням напівемпіричним методом PM7 механізму реакції розкриття епоксидного циклу, каталізованого лімонен-1,2-епоксидгідролазою, та розрахунок енантіомерного виходу продукту реакції. Розрахунки проводилися за алгоритмами розробленими для моделювання великих органічних молекул, таких як ферменти, та реалізованими в програмі MORAC2016. Врахування розчинника (води) виконувалось за допомогою методики COSMO [5].

В даній роботі для побудови структури протеїн-лігандного комплексу були обрані тривимірні структури ферменту з Protein Data Bank

(PDB ID: 1NU3) та один з чотирьох можливих стереоізомерів природного субстрату цього ферменту – лімонен-1,2-епоксид, а саме транс-1R,2S,4S-лімонен-1,2-епоксид. В результаті проведеного молекулярного докінгу, за допомогою програми AutoDock Vina, для подальшого дослідження був обраний протеїн-лігандний комплекс (рис. 1), структура якого характеризується наближенням епоксидного фрагменту молекули ліганду до залишку Asp101 каталітичної тріади ферменту Asp101–Arg99–Asp132.

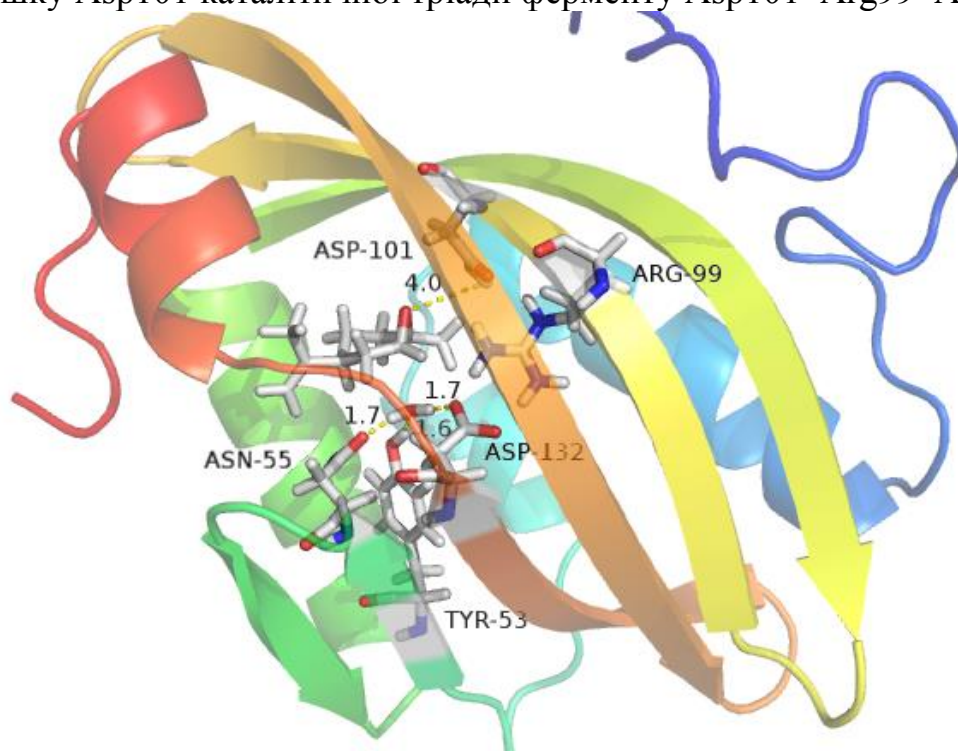


Рис. 1. Структура протеїн-лігандного комплексу лімонен-1,2-епоксидгідролази з транс-1R,2S,4S-лімонен-1,2-епоксидом, отримана за результатами молекулярного докінгу

Механізм каталітичної дії лімонен-1,2-епоксидгідролази був запропонований Арандом [6] на основі експериментальних даних, і підтверджений теоретичними дослідженнями з використанням кластерного підходу [7] і QM/MM [8]. Утворення діолу з епоксиду відбувається за push-pull механізмом. В активному центрі ферменту утримується молекула води й активується водневими зв'язками із амінокислотними залишками Asp132, Asn55 і Tyr53. Одночасно відбувається активація епоксидного циклу за рахунок кислотного каталізу Asp101 та розкриття епоксидного циклу шляхом нуклеофільної атаки активованої молекули води одного з атомів Карбону епоксидного циклу, що приводить до утворення одного зі стереоізомерів продукту лімонен-1,2-діолу.

Відповідно до експериментальних даних був розрахований шлях реакції розкриття епоксидного циклу транс-1R,2S,4S-лімонен-1,2-епоксиду ферментом лімонен-1,2-епоксидгідролазою, який приводить до продукту (1R,2R,4S)-лімонен-1,2-діолу. Для вирішення проблеми енантіоселективності також дослідили шлях реакції, що веде до утворення (1S,2S,4S)-лімонен-1,2-діолу. Різниця в енергетичних бар'єрах лімітуючих стадій утворення цих двох продуктів становить 4,03 ккал/моль, розраховане значення енантіомерного надлишку (1R,2R,4S)-лімонен-1,2-діолу становить $ee = 64\%$.

Перелік посилань

1. Reetz, M. T. Laboratory Evolution of Stereoselective Enzymes: A Prolific Source of Catalysts for Asymmetric Reactions. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2011, 50, pp. 138–174.
2. Choi, J. M.; Han, S. S.; Kim, H. S. Industrial Applications of Enzyme Biocatalysis: Current Status and Future Aspects. *Biotechnol. Adv.* 2015, 33, pp. 1443–1454.
3. Truppo, M. D. Biocatalysis in the Pharmaceutical Industry: The Need for Speed. *ACS Med.Chem. Lett.* 2017, 8, pp. 476–480.
4. Sheng, X.; Kazemi, M.; Planas, F.; Himo, F. (2020). Modeling Enzymatic Enantioselectivity using Quantum Chemical Methodology. *ACS Catalysis*. doi:10.1021/acscatal.0c00983.
5. Klamt A.; Schümann G. COSMO: A New Approach to Dielectric Screening in Solvents with Explicit Expressions for the Screening Energy and its Gradient. *J. Chem. Soc. Perkin Transactions 2*, 1993, pp. 799-805.
6. Arand, M. Structure of *Rhodococcus erythropolis* limonene-1,2-epoxide hydrolase reveals a novel active site. *The EMBO Journal* 2003, 22 (11), pp 2583–2592. doi:10.1093/emboj/cdg275.
7. Hopmann, K. H.; Hallberg, B. M.; Himo, F; Catalytic Mechanism of Limonene Epoxide Hydrolase, a Theoretical Study. *Journal of the American Chemical Society*, 2005, 127(41), pp 14339–14347. doi:10.1021/ja050940p.
8. Lind, M. E. S.; Himo, F. Quantum Chemistry as a Tool in Asymmetric Biocatalysis: Limonene Epoxide Hydrolase Test Case. *Angewandte Chemie International Edition* 2013, 52 (17), pp 4563–4567. doi:10.1002/anie.201300594.

КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИМЕРУ ГЛЮКУРОНОВОЇ КИСЛОТИ ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ ХАРЧОВИХ СИСТЕМ

Діль К.В., Оковитий С.І.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

49010, м. Дніпро, пр. Гагаріна, 72

E-mail: katerina.vlodimirovna@ukr.net

На сьогоднішній день, необхідно звернути увагу щодо розробки фітокомплексів та дієтичних продуктів, які містять "стимулятори здоров'я". Загалом, нутріцевтики із біоенхенсерами, загалом, це і є функціональні продукти, які достатньо біоефективні, безпечні, здатні виступити достойною альтернативою лікарських засобів профілактичного спрямування, адже мають значно нижчу ціну і можуть споживатися, як звичайні харчові продукти. Крім того, враховуючи сучасні тенденції та технологічні можливості гастрономічного інжинірингу, таким продуктам можна надати будь-яку консистенцію, текстуру, зовнішній вигляд та смак.

Для створення таких сучасних функціональних продуктів слід враховувати і системи доставки нутрієнтів і БАП, які мають вирішальне значення для підвищення продуктивності нутрицевтиків *in vivo*. Правильно створені умови постачання корисних речовин до ШКТ максимізують їх дію як біозасобів.

Однією з уронових кислот, що входить до складу функціональних продуктів і яка має достатній спектр технологічних властивостей так і фізіологічних особливостей, що спрямовані на детоксикуючий ефект від важких металів та радіонуклідів. Виходячи з раніше досліджуваної ролі у технологічному процесі та процесах метаболізму альгінових кислот (мануронової та гулууронової), галактууронової кислоти та їх комбінацій [1,

2]. Також встановлено, що глюкуронова кислота виступає іммобілізаційною матрицею для біологічно активних речовин, що мають високий хімічний потенціал у зовнішньому середовищі і середовищі шлунку і може мати небажані хімічні реакції або бути зруйнованою під впливом кисню повітря або агресивного середовища шлунку.

Саме тому, вивчення просторового розташування атомів, функціональних груп, ланцюжків молекули пектину за допомогою квантово-хімічних методів є досить своєчасним і актуальним, оскільки це може дозволити чітко сформулювати уяву про реакційну здатність глюкуронової кислоти у цілому, і визначити комплекс її фізико-хімічних властивостей.

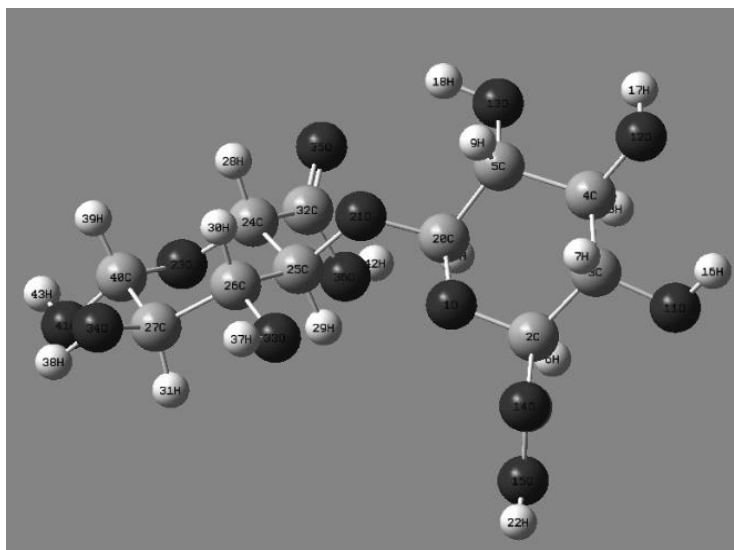


Рис.1. Димер глюкуронової кислоти

Було проведено конформаційний пошук стабільних конформерів димеру глюкуронової кислоти при зміні торсійних кутів $C_5-C_{20}-O_{21}-C_{25}$ і $C_{20}-O_{21}-C_{25}-C_{24}$ (рис. 1). Розрахунки виконані напівемпіричним методом PM3 у газовій фазі за допомогою програми Gaussian-09. Виходячи з результатів проведеного конформаційного аналізу димеру глюкуронової

кислоти було виявлено найбільш стабільні конформери (трансоїдної та цисоїдної форми) які характеризується найбільш віддаленним розташуванням карбоксильних груп та водневими зв'язками між гідроксильними групами довжиною 2.1 Å⁰.

Отже, результати квантово-хімічного моделювання надають можливість отримати повну інформацію фізико-хімічних властивостей глюкуронової кислоти та визначити стійкі конформери для подальшого утворення хелатного комплексу.

Список використаної літератури

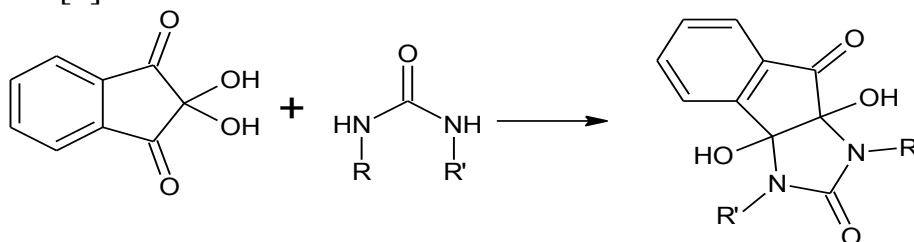
1. Кондратюк Н.В., Степанова Т.М., Толошний Д.В., Поливанов Є.А. Гелі харчові плівкоутворюючі на основі уронатних полісахаридів у виробництві сумішей для ін'єктування м'ясопродуктів. *Вчені записки ТНУ імені В.І. Вернадського. Серія: технічні науки*, 2018. Т. 29 (68). Ч. 2. С. 20-25.
2. Поливанов Є. А., Кондратюк Н. В. Технологія гідрогелів з уронатних полісахаридів та біодеградуючих плівок на їх основі. *Збірник тез доповідей II туру Всеукраїнського конкурсу студентських наукових робіт зі спеціальності «Хімічні технології та інженерія»*. Дніпро. 2019. С. 70–72.

ПРО ВЗАЄМОДІЮ НЕСИМЕТРИЧНИХ СЕЧОВИН З НІНГІДРИНОМ

Савченко І.В., Аніщенко А.О.

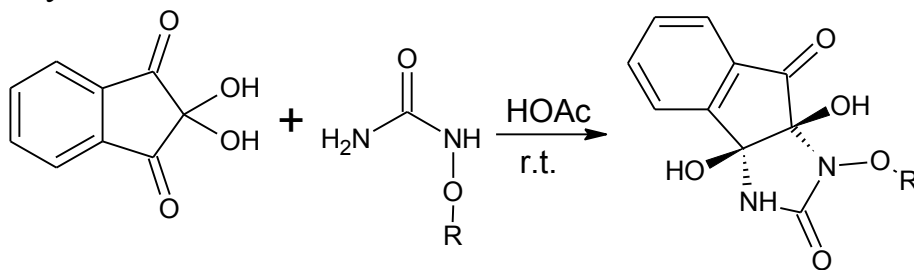
*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара; 49010,
Дніпро, вул. Козакова, 22;*

Взаємодія незаміщених сечовин з нінгідрином досліджена фрагментарно. [1]



Будова отриманих імідозолідин-2-онів в попередніх публікаціях доводиться лише за допомогою таких методів, як NMR та MASS-спектрометрія. Як відомо ці методи не дозволяють повністю описати особливості будови молекули. Таким чином конфігурація двох діастеріомерних атомів атомів карбону при двох гідроксильних групах залишалася невідомою.

Нами показано, що нінгідрин реагує з несиметричними сечовинами в середовищі оцтової кислоти з селективним утворенням діастеріомерів імідозолідин – 2-онів з *цисоїдним* розташуванням гідроксильних груп при атомах карбону в положеннях 3 та 8.



R= Me, Et, n-Bu, Bn

Така сама закономірність спостерігається для взаємодії нінгідрину з N-алкокси-N'-арил сечовинами. Будову відповідних продуктів доведено за допомогою XRD – аналізу. Цікавою особливістю реакції є те, що утворення цих імідозолідинонів відбувається повністю селективно і не супроводжується отриманням ізомерних форм.

ДОСЛІДЖЕННЯ СТАБІЛЬНОСТІ ТАУТОМЕРІВ 2-(3-ГЕТАРИЛ-1,2,4-ТРИАЗОЛ-5-ІЛ) АНІЛІНІВ МЕТОДОМ ЕЛЕКТРОННОЇ СПЕКТРОСКОПІЇ

Пилипенко О. О., Оковитий С.І.

*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара
49010, Дніпро, пр. Гагаріна, 72. E-mail: pilipenkoolena1@gmail.com*

Дослідження таутомерних форм є важливим етапом для оцінки реакційної здатності сполук з 1,2,4-триазольним каркасом. Синтез та вивчення властивостей нових похідних 1,2,4-триазолів є перспективним напрямком в хімії гетероциклічних сполук, оскільки дані речовини активно використовують в медицині як лікарські препарати, в сільському господарстві як гербіциди та фунгіциди, в промисловості як антикорозійні сполуки тощо. Одним із методів дослідження сполук є електронна спектроскопія. В даній роботі описується визначення таутомерних форм сполук 2-(3-гетарил-1,2,4-триазол-5-іл) анілінів 1-2 (рис.1), шляхом порівняння експериментальних і змодельованих електронних спектрів (рис. 2 і 3).

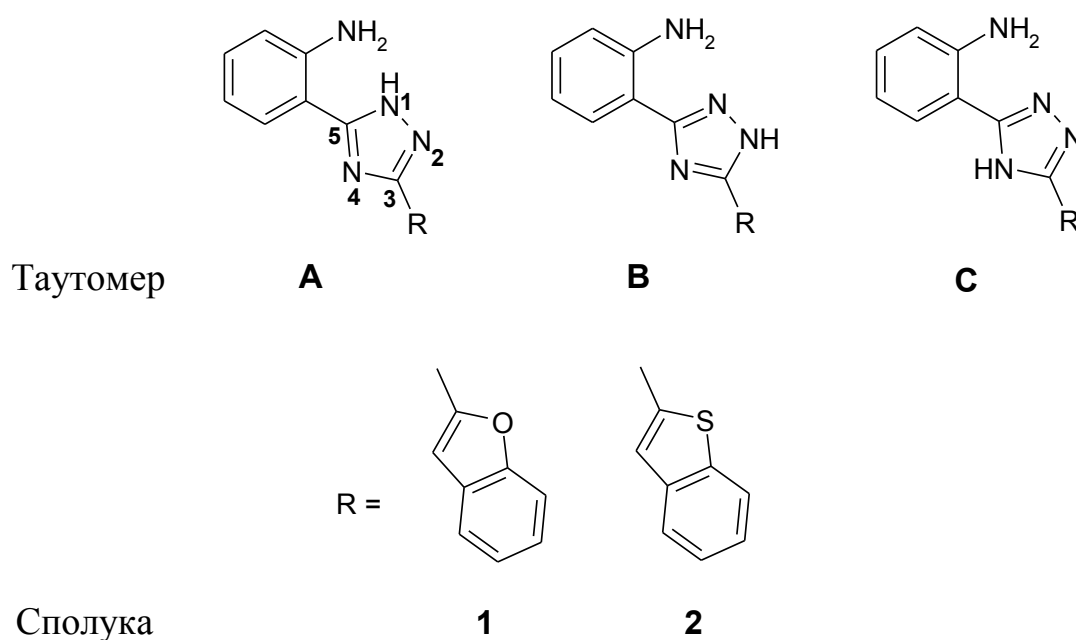


Рис.1 Таутомери А-С для похідних триазолів 1-2

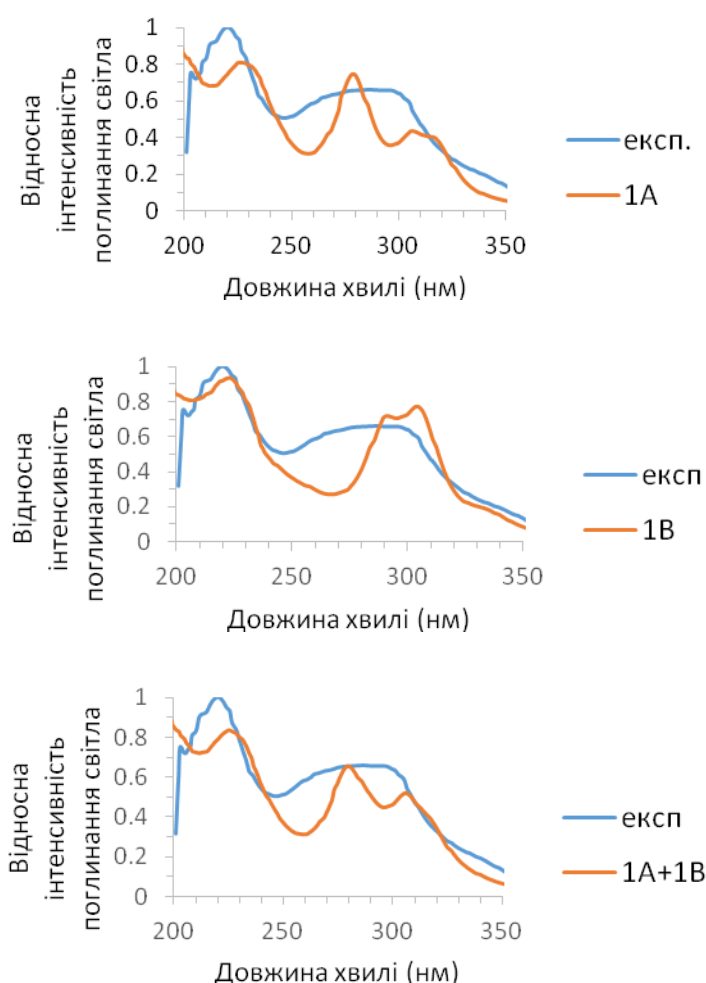
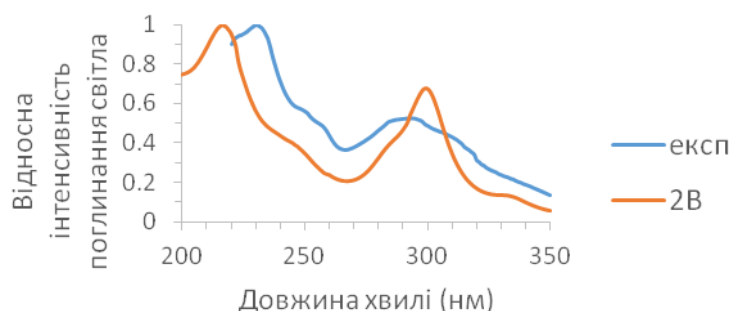
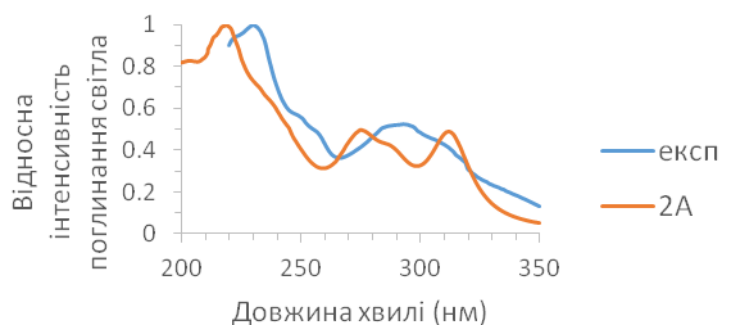


Рис.2 Електронні спектри таутомерів (1A, 1B) та зважений за Больцманом сумарний спектр (1A+1B), змодельовані у наближенні SMD/PBE1PBE/STO^{##}-3G_{el} та експериментальний спектр сполуки 1

Розрахунок енергії таутомерів сполук 1 і 2 показав, що найбільш стабільними є таутомери А і В, тоді як заселеність таутомеру С незначна (менше 1%). Нами змодельовано електронні спектри таутомерів А і В для сполук 1 і 2, і здійснено їхнє порівняння з експериментальними даними (рис.2 і 3). Також розраховано зважений за Больцманом сумарний спектр, який враховує відносну заселеність обох таутомерів.

Сполука 1 має дві смуги в експериментальному електронному спектрі з максимумами біля 219 і 286 нм. Розрахункові спектри для найбільш стабільних таутомерів 1 добре відповідають першим максимумам поглинання (рис.2). Області широкої експериментальної другої смуги відповідають дві змодельовані смуги. Найбільш інтенсивний максимум таутомеру А батохромно зміщений по відношенню до таутомеру В. Найбільш довгохвильову смугу можна віднести до $n \rightarrow \pi^*$ переходу, що відповідає переходу електрону з вищої заповненої МО на найнижчу вакантну МО. Інші смуги відносяться до $\pi \rightarrow \pi^*$ переходу, найбільший внесок в який – від переходів електрону з кількох вищих зайнятих МО та вакантні МО.



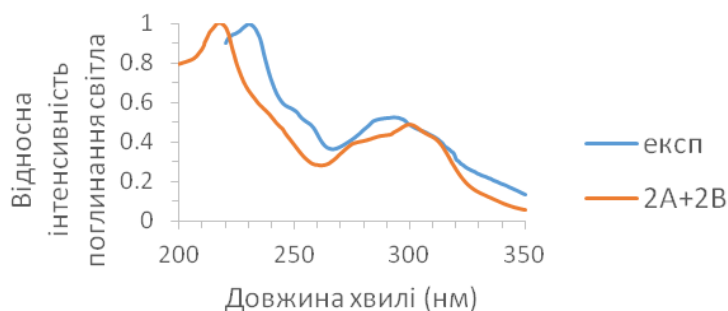


Рис.3 Електронні спектри таутомерів (2A, 2B) та зважений за Больцманом сумарний спектр (2A+2B), змодельовані у наближенні SMD/PBE1PBE/STO^{##}-3G_{el} та експериментальний спектр сполуки 2

Експериментальний спектр сполуки 2 містить два піки біля 230 і 293 нм (рис. 3). Максимуми поглинання сполуки 2 батохромно зміщуються у порівнянні зі сполукою 1. Розрахований спектр таутомеру А показує два піки в області другої експериментальної смуги, тоді як таутомер В показує одну довгохвильову смугу, яка добре відповідає експериментальній. Перші піки обох таутомерів добре збігаються між собою і злегка гіпсохромно зміщені відносно експериментальних даних.

Порівняння експериментальних спектрів із зваженими за Больцманом сумарними спектрами сполук 1 і 2 показує задовільні результати (рис. 2 і 3), на підставі чого можна зробити висновок, що експериментальні електронні спектри є суперпозицією спектрів кількох таутомерів і змодельовані зважені за Больцманом сумарні електронні спектри можуть бути успішно застосовані для відтворення експериментальних даних.

ТЕОРЕТИЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ГІДРАЗИНОЛІЗУ 2,3-ДИГІДРО-1Н-1,5-БЕНЗОДІАЗЕПІНОНУ-4

Мондрусова М.С., Оковитий С.І.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, пр.

Гагаріна, 72, м. Дніпро, Україна

e-mail: beflecktbyb@gmail.com

Бензодіазепіни – семичленні ароматичні гетероцикли, які містять два кільцевих атоми азоту та завдяки цьому проявляють широкий спектр біологічних властивостей, що робить їх дуже важливими для фармацевтичної промисловості та органічного синтезу складних молекул. Сполуки цього класу використовуються для лікування таких станів як алкогольна залежність, судоми, тривога, паніка, збудження і безсоння [1]. За останнє десятиріччя був досягнутий значний прогрес в області синтетичної хімії цих агентів, було успішно синтезовано і перевірено велику кількість нових похідних бензодіазепіну в якості потенційних лікувальних засобів.

Встановлено деякі відмінності в активності між 1,5 та 1,4-бензодіазепінами. Для 1,5-бензодіазепінів був відзначений більший терапевтичний потенціал і менша кількість випадків побічних ефектів у порівнянні з 1,4-бензодіазепінами. 1,5-бензодіазепінони використовуються клінічно в якості антисекреторних, анксиолітичних і протисудомних засобів. Приклади таких препаратів включають телензепін, арфендазам, лофендазам, трифлубазам, та клобазам – 1,5 аналог валіуму (рис. 1) [2].

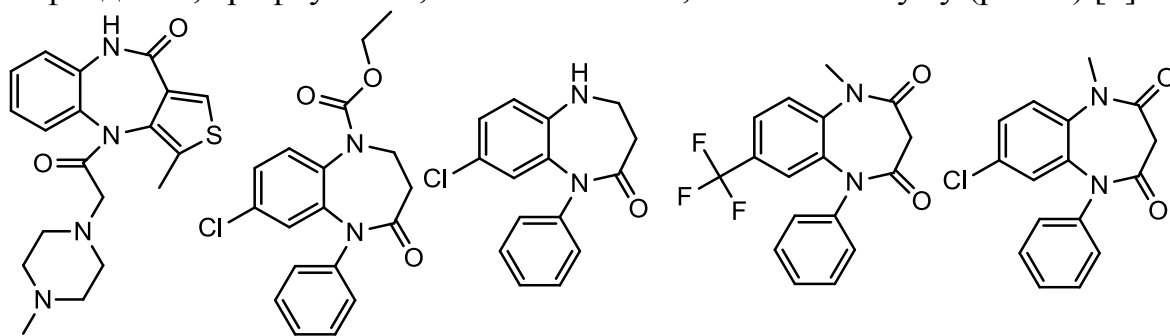
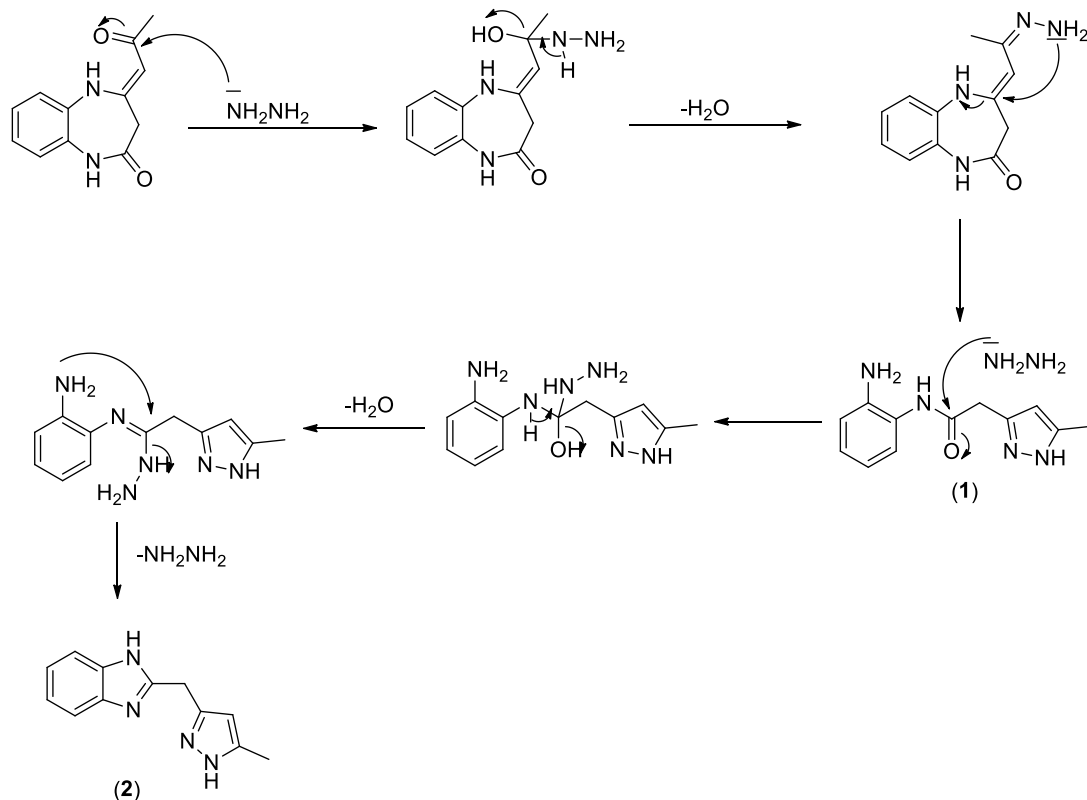


Рис. 1 – Структури лікарських препаратів на основі 1,5-бензодіазепінонів, зліва направо: телензепін, арфендазам, лофендазам, трифлубазам та клобазам

З літератури відомо, що взаємодія 1,5-бензодіазепінонів з біфункціональними нуклеофільними реагентами, такими як гідразин, призводить до перегрупування з розкриттям діазепінонового кільця [3, 4].

Деякі експериментальні дослідження гідразінолізу вказують на каталітичну роль молекули етанолу. Крім того, існує багато прикладів зниження енергії активації реакції за допомогою молекули розчинника в процесі перенесення протонів.

Нами було проведено квантово-хімічне моделювання механізму реакції гідразінолізу (Z)-2-(2-оксопропіліден)-2,3-дигідро-1H-бензо-1,5-діазепін-4-ону за наведеною нижче схемою.



У гідразінолізі 2,3-дигідро-1,5-бензодіазепін-4-ону специфічна сольватація була відтворена при явній участі молекули етанолу в реакційному середовищі. Також ефекти розчинника додатково враховувалися методом самоузгодженого реакційного поля (SCRF) на основі моделі поляризованого континууму (PCM).

Попередні дослідження механізмів гідразінолізу проводилися із застосуванням гібридного функціоналу B3LYP у поєднанні з базисним набором 6-31G(d). Але було показано, що для розрахунку параметрів гетероароматичних структур з π -електронною хмарою, що надає можливість формування водневих зв'язків, добре проявляють себе валентно-розщеплені, кореляційно-согласовані базисні набори Даннінга, до яких включені поляризаційні функції [5, 6]. Базис cc-pvdz є одним з найбільш популярних та економічних наборів такого типу, тому він був запропонований та застосований для розрахунку геометрії структур

реакційних комплексів, інтермедіатів, перехідних станів та продуктів даного механізму.

Частоти гармонійних коливань були обчислені із застосуванням тих же наближень, як і у випадку оптимізації геометрії, для описання стаціонарних точок – мінімуму з усіма позитивними значеннями частот або перехідного стану лише з одною уявною частотою. Розрахунки значень частот надали такі термодинамічні характеристики, як нульова коливальна енергія, ентальпія та вільна енергія Гіббса.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Recent advances in synthesis and medicinal chemistry of benzodiazepines / N. Arora [et al.]. // Bioorganic Chemistry. – 2020. – №97. Access mode: <https://doi.org/10.1016/j.bioorg.2020.103668>
2. Synthesis, spectroscopic characterization, X-ray structure, and in vivo neurotropic activity of new 1,5-benzodiazepin-2-ones / A. A. Gaponov [et al.] // Med. Chem. Res. – 2016. – №25. – P. 1768-1780. Access mode: <https://doi.org/10.1007/s00044-016-1605-z>
3. Theoretical Study of Mechanism of 2,3-Dihydro-1,5-benzodiazepin-2-ones Hydrazinolysis / S. I. Okovytyy [et al.]. // J. Phys. Chem. – 2009. – Vol. 113, №8. – P. 1475–1480. Access mode: <https://doi.org/10.1021/jp807644e>
4. DFT Study on Tautomerism of Dihydro-2H-1,5-benzodiazepin-2-ones and Dihydro-2H-1,5-benzodiazepine-2-thiones / S. I. Okovytyy [et al.]. // Eur. J. Org. Chem. – 2009. – Vol. 2010. – P. 280–291. Access mode: <https://doi.org/10.1002/ejoc.200900689>
5. Theoretical studies on mechanism and kinetics of the hydrogen-abstraction reaction of CF₃CH₂CH₂OH with OH radical / T. Jin, C. Cheng-gang, Yu. Wu, L. Jing-yao. // Computational and Theoretical Chemistry. – 2013. – №1007. – P. 63–75. Access mode: <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2012.12.008>
6. Kaur D. Intermolecular hydrogen bonding interactions of furan, isoxazole and oxazole with water / D. Kaur, S. Khanna. // Computational and Theoretical Chemistry. – 2011. – №963. – P. 71–75. Access mode: <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2010.09.011>

**ІНТЕРАКТИВНІ ТЕХНОЛОГІЇ У ВИКЛАДАННІ ТЕМИ
«СИНТЕЗ ТА РЕАКЦІЙНА ЗДАТНІСТЬ ПОХІДНИХ ІМІДАЗОЛУ
ТА БЕНЗІМІДАЗОЛУ» В ХМАРНОМУ ФОРМАТІ**

Сачек К.С. , Коптєва С.Д.

Дніпровський національний університет ім. Олесь Гончара

49010, Дніпро, пр. Гагаріна 72

Одним з першочергових завдань вищої освіти є підготовка фахівців здатних вирішувати складні завдання не лише у стандартних умовах, а й швидко та ефективно реагувати на виклики часу. Саме тому формування навичок дослідницької роботи у певній галузі потрібно починати якомога раніше.

У зв'язку з введенням карантинних обмежень в державі та світі, перед суспільством та перед освітою зокрема, життя поставило виклики на які потрібно було реагувати в режимі реального часу. Дистанційне навчання це можливість здобувати освіту без відвідування навчальних закладів, а також забезпечення неперервності освітнього процесу у надзвичайних ситуаціях. Завдання викладача в умовах дистанційного навчання, полягає не лише у викладанні певного матеріалу, а й у забезпеченні постійного супроводу та підтримки, регулярному відстежуванні результатів навчання та комунікації зі студентами. В умовах пандемії необхідно реалізувати не лише якісну теоретичну підготовку здобувачів вищої освіти, а й забезпечити високий рівень практичної підготовки, що є досить складним завданням.

Отримати практичні навички студентам-хімікам за межами спеціалізованих лабораторій неможливо, тому враховуючи сучасні реалії організації освітнього процесу в умовах пандемії, та відповідаючи на виклики часу, для досягнення програмних результатів передбачених стандартами вищої освіти пропонуємо поєднувати інформаційні та інтерактивні технології навчання.

У минулому році нами був успішно запроваджений в освітній процес метод case-study при вивченні теми «Спирти, тіоли, етери» в межах курсу «Органічна хімія» для студентів 3 курсу в умовах традиційного offline навчання. Цей досвід отримав позитивні відгуки студентської аудиторії, тому ми вирішили продовжити цю практику, але вже в умовах змішаного навчання. Нами розроблено та впроваджено в освітній процес методичні матеріали до теми «Синтез та реакційна здатність похідних імідазолу та

бензімідазолу» в межах курсу «Хімія гетероциклічних сполук» для студентів 4 курсу.

У нашому університеті створено інформаційне освітнє середовище основою якого є корпоративний освітній простір Microsoft 365. Дане середовище має хмарний формат. Найбільш широко в освітньому процесі використовуються такі додатки як Word, Excel, PowerPoint, Outlook, Календар, Teams, Forms, OneDrive. Наша методична розробка впроваджена саме в цьому освітньому середовищі.

Тема «Синтез та реакційна здатність похідних імідазолу та бензімідазолу» викладається наприкінці семестру, тобто студенти вже мають значний обсяг знань в царині хімії гетероциклічних сполук, що дозволяє широко застосовувати такі інтерактивні методи, як проблемне навчання, «мозковий штурм», «перевернутий» клас, дискусія та інші.

В ході викладання лекційного матеріалу з використанням додатку Teams, яке проходило у режимі вебінару, для залучення студентів до активної взаємодії ми пропонуємо їм відповісти на значну кількість проблемних питань, подискутувати та дійти спільної думки, лектор виступає модератором цієї дискусії. Це дозволяє, в залежності від рівня підготовки студентів, викладати теоретичний матеріал за означеною темою, або за 4 лекційні години (за низького рівня підготовки студентів, та необхідності більш детального пояснення з боку лектора), або його обсяг може бути скорочений до 2-х лекційних годин, при цьому студентам пропонується попередньо ознайомитися з презентацією до лекційного матеріалу (що розміщена в середовищі OneDrive) та підготувати відповіді на розміщені у ній запитання. Запитання мають проблемно - пошуковий характер, та вимагають осмислення не лише матеріалу з означеної теми, а й узагальнення раніше отриманих знань. Наприклад: студентам пропонується порівняти будову імідазолу та піролу; імідазолу та піридину; відзначити спільні риси та відмінності, спрогнозувати реакційну здатність імідазолу тощо. Тобто ми пропонуємо використовувати методику «превереного класу», це дозволило залучити кожного студента до активної пізнавальної діяльності, та надало можливість висловити власну думку на вебінарі. У кінці лекції студенти виконують діагностичний тест у Forms, та після відправки відповіді миттєво отримують оцінку.

Запропонований підхід, спонукає студентів думати самостійно, а не шукати готові відповіді, в тому числі й при виконанні контрольно-тестових завдань. Контроль знань проводився у тестовій формі в режимі реального часу з використанням додатку Forms. Тестові завдання також містили відкриті питання, які передбачали необхідність висловлення студентом власної думки.

В умовах змішаного навчання при виконанні лабораторного практикуму, є доречним використання проектної технології, це дозволяє студентам отримати навички не лише практичної, а й дослідницької роботи, реалізувати свій творчий потенціал. Також запропонована технологія проведення лабораторного заняття дозволяє мінімізувати час перебування студентів в хімічній лабораторії. Виконання завдання реалізується шляхом застосування такої форми, як робота в малих групах. Завдання («Синтез 2-R-бензімідазолу») виконується кожною групою окремо та складається з декількох етапів. :

I етап (самостійна робота з використанням інтернет-ресурсів): аналіз літературних джерел; складання власної методики синтезу адаптованої до реальних умов;

II етап (вебінар) : презентація результатів I етапу, аргументація власного вибору методики синтезу; підготовка листа-замовлення на обладнання, посуд та реактиви;

III етап (робота в хімічній лабораторії): синтез, виділення, очистка та ідентифікація відповідного 2-R-бензімідазолу;

IV етап (самостійна робота): аналіз отриманих експериментальних даних; оцінка економічної доцільності, характеристика практичного застосування отриманої сполуки.

V етап (вебінар) – науковий семінар: презентація та обговорення результатів синтезу, оцінювання внеску кожного студента в досягненні командного результату.

В ході виконання дослідницького завдання, в межах часу відведеного на виконання лише однієї лабораторної роботи, студентами, було синтезовано 6 різних похідних бензімідазолу та доведена їх будова. В ході наукового семінару студенти, спираючись на власний досвід, через дискусію, дійшли висновків про вплив електрофільного реагенту на швидкість реакції гетероциклізації, ефективність та доцільність застосування різних каталізаторів; розробили власні рекомендації, які дозволять підвищити вихід цільового продукту та зменшити витрати часу. Тобто студенти навчалися на власному досвіді.

Слід відзначити, що така форма проведення лабораторного заняття ставить студента перед необхідністю пошуку та критичного аналізу першоджерел, розвиває відповідальне ставлення до виконуваної роботи та дозволяє проявити власний підхід до виконання завдання.

Таким чином застосування у поєднанні інформаційних та інтерактивних технологій в умовах змішаного навчання є досить ефективним та сприяє не лише набуттю фахових компетентностей, а й розвитку творчого потенціалу особистості.

МЕТОД СИНТЕЗУ СПІРОСПОЛУК, ЩО ВКЛЮЧАЮТЬ ТІОПІРАН-1,1-ДІОКСИДНИЙ ТА ПІРРОЛІДИНОВИЙ ГЕТЕРОЦИКЛИ

Козирєв Є.К., Пальчиков В.О.

Дніпровський національний університет ім. Олеса Гончара

49010, Дніпро, пр. Гагаріна 72, e-mail: eugenekozirev@gmail.com

На сьогодні серед речовин, що включають тіопіран-1,1-діоксидний фрагмент, є такі відомі лікарські засоби, як антиглаукомний препарат Дорзоламід **1** та діуретик Метікран **2** [1]. У стадії розробки знаходяться протизапальний та противірусний препарати **3**, **4** [2, 3], а також потенційний активатор калієвих каналів **5** (схема 1) [4].

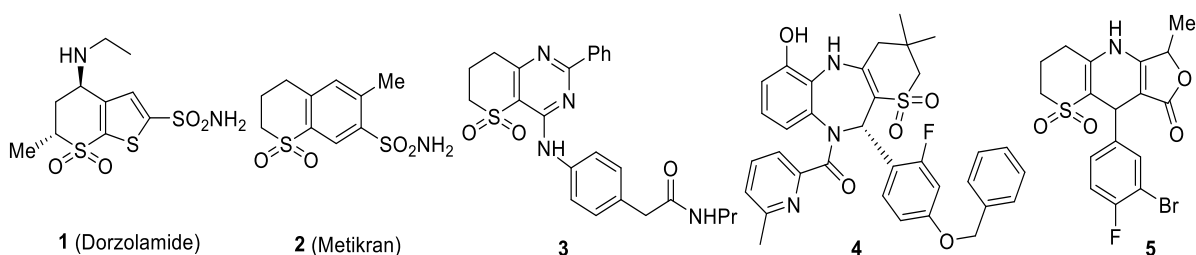


Схема 1. Структури деяких біологічно важливих сполук **1-5** з тіопіран-1,1-діоксидним фрагментом

Попередні успіхи у синтезі тіопіран-1,1-діоксидів **6-15** анельованих або заміщених N,O-гетероциклами описано у нашому огляді [5] та підсумовано на схемі 2. Вихідною речовиною у всіх цих синтезах є 3-кето-2H-тіопіран-1,1-діоксид **16**. Більшою частиною ці реакції є мультикомпонентними конденсаціями за участі альдегідів, амінів, єнамів тощо.

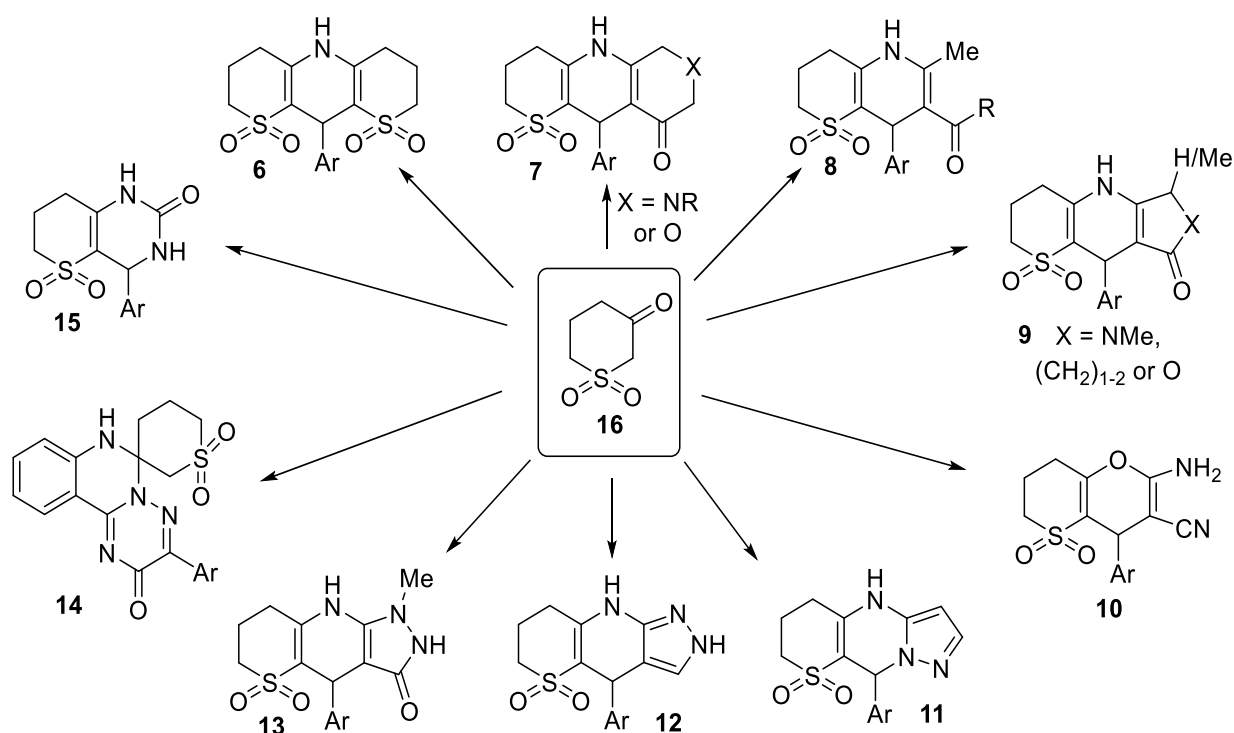


Схема 2. Типові структури гетероциклічних сполук **6-15** синтезовані із 3-кето-2*H*-тіопіран-1,1-діоксиду **16**

Метою цієї роботи є розробка способу синтезу фторовмісних тіопіран-1,1-діоксидів, спіросполучених із пірролідиновим фармакофорним фрагментом. Введення фтору та фторовмісних угруповань в органічні молекули є наразі дуже актуальною задачею синтезу, оскільки близько 30% всіх фармпрепаратів та агрохімікатів є фторовмісними сполуками.

Виходячи із синтетично доступного кетону **17** (попередника та аналога сполуки **16**) за реакцією Хорнера-Водсворта-Еммонса при участі відповідного фторованого похідного **18** отримано естер **19**. Далі його було окиснено за допомогою пероксимоносульфату калію у складі окисника, який має торгову назву Охоне. Зазвичай цей реагент не чіпає

електронодефіцитний зв'язок C=C, тому нам вдалося селективно окиснити сірку і отримати сполуку **20**. Наступною стадією є 1,3-диполярне [2+3]-циклоприсоединення із утворенням цільового пірролідинового гетероциклу **21** (схема 3)

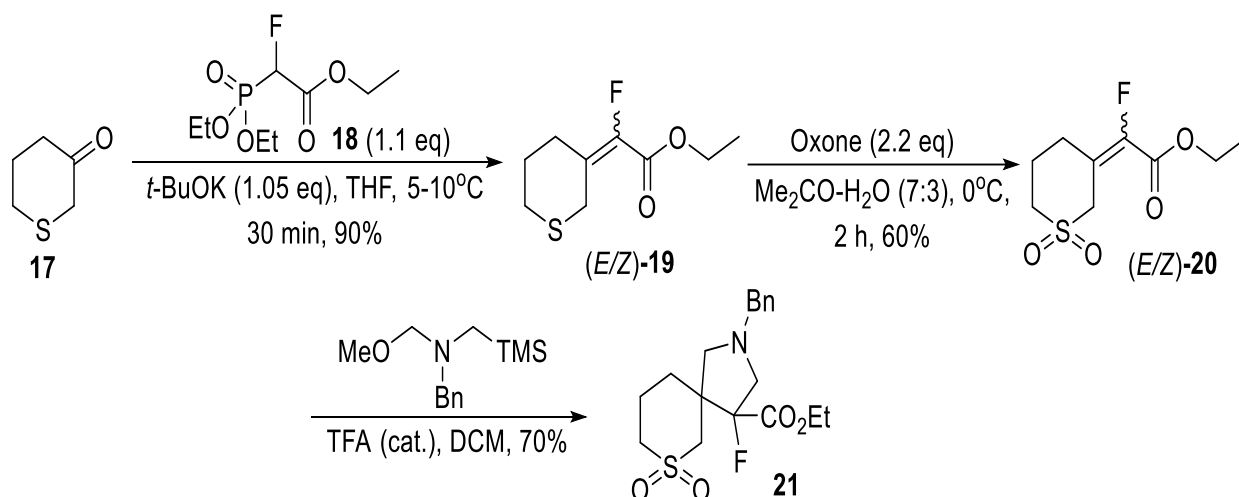


Схема 3. Синтез тіопіран-1,1-діоксиду **21**

Після відновного дебензилювання відповідний амін, отриманий із спіропохідного **21**, може бути використано як новий унікальний білдинг-блок для синтезу комбінаторних бібліотек біологічно активних речовин ряду тіопіран-1,1-діоксиду. Робота по синтезу аналогів цільової сполуки **21** наразі продовжується.

Список літературних джерел:

1. Topical Dorzolamide for the treatment of cystoid macular edema in patients with retinitis pigmentosa / S. Grover, M. Apushkin, G. Fishman // Am. J. Ophthalmol. – 2006. – Vol. 141, № 5. – P. 850–858.
2. Identification of the fused bicyclic-4-amino-2-phenylpyrimidine derivatives as novel and potent PDE4 inhibitors / T. Goto, A. Shiina, T. Yoshino, K.

Mizukami, K. Hirahara, O. Suzuki, Y. Sogawa, T. Takahashi, T. Mikkaichi, N. Nakao, M. Takahashi, M. Hasegawa, S. Sasaki // *Bioorg. Med. Chem. Lett.* – 2013. – Vol. 23, №11. – P. 3325–3328.

3. Structure-based design of a benzodiazepine scaffold yields a potent allosteric inhibitor of hepatitis C NS5B RNA polymerase / K. Vandyck, M.D. Cummings, O. Nyanguile, C.W. Boutton, S. Vendeville, D. McGowan, B. Devogelaere, K. Amssoms, S. Last, K. Rombauts, A. Tahri, P. Lory, L. Hu, D.A. Beauchamp, K. Simmen, P. Raboisson // *J. Med. Chem.* – 2009. – Vol. 52, № 14. – P. 4099–4102.

4. Effects of substitution on 9-(3-bromo-4-fluorophenyl)-5,9-dihydro-3H,4H-2,6-dioxo-4-azacyclo-pentan[d]naphthalen-1,8-dione, a dihydropyridine ATP-sensitive potassium channel opener / R.J. Altenbach, M.E. Brune, S.A. Buckner, M.J. Coghlan, A.V. Daza, A. Fabiyi, M. Gopalakrishnan, R.F. Henry, A. Khilevich, M.E. Kort, I. Milicic, V.E. Scott, J.C. Smith, K.L. Whiteaker, W.A. Carroll // *J. Med. Chem.* – 2006. – Vol. 49, № 23. – P. 6869–6887.

5. Thiopyran-3-one-1,1-dioxides in the synthesis of heterocycles / E.K. Kozirev, V.A. Palchykov // *Chem. Heteroc. Comp.* – 2019. – Vol. 55, № 4-5. – P. 349–351.

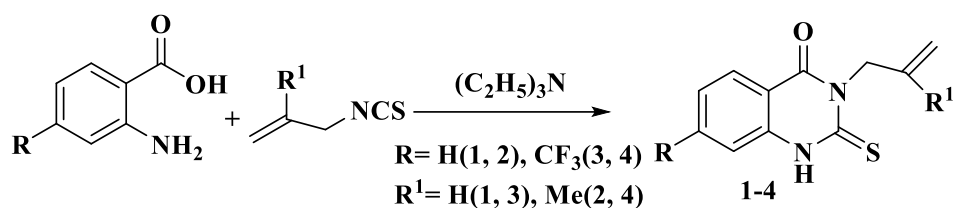
ХАЛЬКОГЕНУВАННЯ N-АЛКЕНІЛЬНИХ 2-ТІОКСОХІАЗОЛІНІВ

Кут Д.Ж., Кут М.М., Онисько М.Ю., Балог І.М., Лендсел В.Г.

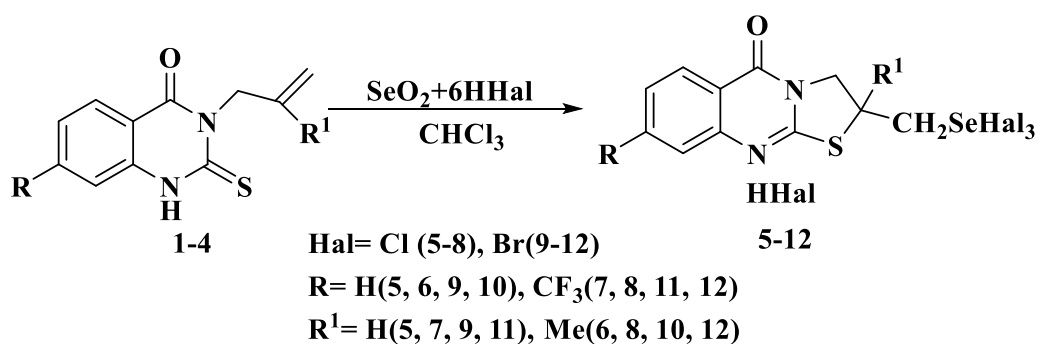
*Державний вищий навчальний заклад
«Ужгородський національний університет»
kutmykola@ukr.net*

Оксо(тіо)заміщені хіназоліни є перспективними біологічно активними сполуками. Особливе місце в ряді хіназолінів займають його конденсовані аналоги, а саме тіазолохіназоліни, які володіють широким спектром біологічної активності. Ефективним методом синтезу конденсованих похідних хінізоліну є електрофільна внутрішньомолекулярна циклізація (ЕВЦ). За допомогою даного методу розроблено зручний і керований метод синтезу тіазоло- або тіазинопіримідинів. Використання в таких реакціях фармакоформних халькогеновмісних електрофілів досліджено недостатньо. Тому вивчення реакцій електрофільної гетероциклізації 3-алкенільних похідних 2-тіоксохіназолін-4-ону під дією тетрагалогенідів селену та телуру є актуальним завданням.

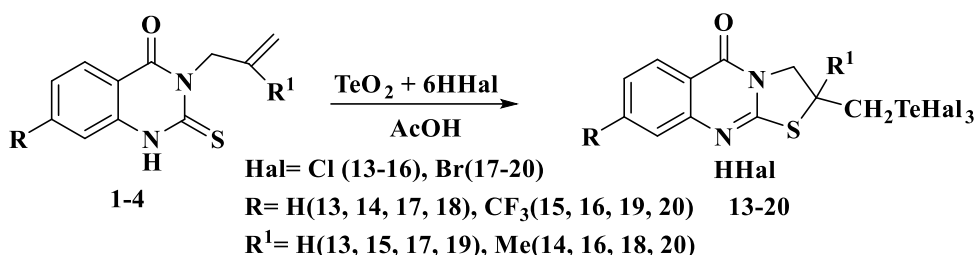
Як об'єкт вивчення було вибрано 3-алкеніл-2-тіоксо-2,3-дигідрохіназолін-4(1*H*)-они **1-4**, які одержували нагріванням антранілової кислоти або її трифлуорометильної похідної з алкенільними ізотіоціанатами в середовищі триетиламіну. Будову отриманих тіонів **1-4** доведено комплексом спектральних досліджень. Модельні тіони **1-4** мають декілька нуклеофільних центрів для атаки електрофільних реагентів — кратний зв'язок C=C алкенільного замісника, екзоциклічні атоми оксигену та сульфуру, що створює передумови для ателювання оксазольного або тіазольного циклів.



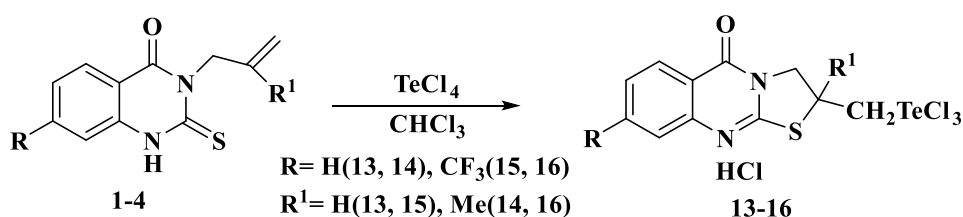
Використання тетрагалогенідів селену та телуру в реакції електрофільної циклізації з тіоксохіназолінами **1-4** передбачає утворення потенційно біологічно активних халькогенофункціоналізованих конденсованих хіназолінів. Тетрагалогеніди халькогенідів отримували *in situ* взаємодією діоксиду селена або телуру з 6-кратним надлишком відповідної галогеноводневої кислоти. Проведення реакції тетрагалогенідів селену з 3-алкеніл-2-тіоксохіназолін-4-онами **1-4** в середовищі льодяної оцтової кислоти приводить до осмолення реакційної суміші та екструзії елементарного селена. В той же час проведення реакцій в середовищі хлороформу приводить до утворення гідрогалогенідів **5-12** лінійної будови. Про утворення гідрогалогенідів **5-12** з анельованим тіазольним циклом свідчать їх спектральні дані.



При використанні тетрагалогенідів телуру *in situ* в реакції з тіонами **1-4** в оцтовій кислоті відбувається циклізація з утворенням стійких телуртригалогенідів лінійної будови **13-20**. Спектральні дані гідрогалогенідів **13-20** корелюють із спектральними даними селенових аналогів **5-12**.

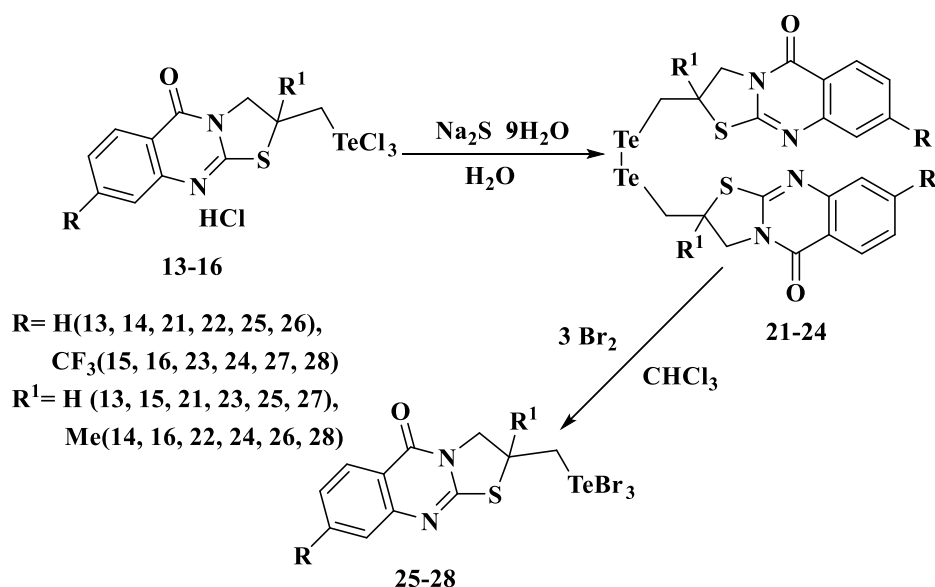


Використання тетрагалогенідів селену та телуру отриманих *in situ* в реакціях електрофільної циклізації не дозволяє чітко стверджувати, що циклізація відбувається тільки з відповідним тетрахалькогенідом, а не з гексагалогенхалькогенідними кислотами. Для дослідження цього фактору в реакції з тіонами **1-4** було використано маловивчений електрофільний реагент — індивідуальний тетрахлорид телуру, який одержували пропусканням хлору над розплавом телуру. Встановлено, що телуроіндукована циклізація індивідуальним телуртетрахлоридом хіназолінів **1-4** відбувається регіоселективно з утворенням гідрохлоридів **13-16**, які були отримані з використанням тетрахлориду телуру одержаного *in situ*. Найбільш оптимальними умовами проведення реакції виявилось використання в якості розчинника хлороформу та перемішування вихідних реагентів при кімнатній температурі.



З метою подальшої функціоналізації гетерилтелуртрихлориди **13-16** використано в реакції відновлення сульфідом натрію. Встановлено, що взаємодія гідрохлоридів **13-16** з 4-охкратним надлишком 9-ти водного натрій сульфід у воді при кімнатній температурі приводить до утворення дителуридів **21-24** з виходами 82-94%. Будову отриманих дителуридів **21-**

24 доведено спектральними методами, а склад елементним аналізом. Так, в спектрі ПМР сполук **21-24** спостерігаються зміщення сигналів протонів телуromетиленової групи в більш сильне поле спектру на 0.4 м.ч. Імовірно, причиною такого зміщення є відсутність дезекранування трьох атомів хлору на групу—CH₂Te. Отримані дителуриди **21-24** були використані в реакції бромовання. Доведено, що взаємодія дителуридів **21-24** з трикратним надлишком броду в середовищі хлороформу дозволяє селективно отримувати вільні основи — трибромотелуromетил заміщені тіазолідинохіназоліни **25-28**. Будову трибромідів **25-28** доведено спектрально, а склад елементним аналізом. Спектральні дані основ **25-28** добре корелюють з їх солеподібними аналогами.



Таким чином, в результаті роботи на основі халькогенoіндукованої гетероциклізації N-алкеніл-2-тіоксо-2,3-дигідрохіназолін-4(1*H*)-онів такими електрофільними реагентами як тетрагалогеніди селену та телуру розроблені зручні синтетичні підходи до конструювання біологічно перспективних конденсованих тіазолінохіназолінів.

СЕКЦІЯ

ХІМІЯ ТА ХІМТЕХНОЛОГІЯ

ВИСОКОМОЛЕКУЛЯРНИХ ТА

ПРИРОДНИХ СПОЛУК

Керівник: Варлан Константин Єлисейович, зав. каф. високомолекулярних
сполук ДНУ, канд. хім.наук, доц.

Секретар: Косіцина Олена Сергіївна, канд. хім.наук, доц.

ВИКОРИСТАННЯ ЦЕОЛІТІВ У РЕГЕНЕРАЦІЇ ОРГАНІЧНИХ РОЗЧИННИКІВ

*Тараненко І.В., Синявський С.В., Поджарський М.А.
Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, м. Дніпро,
пр.Гагаріна 72 (Україна)*

В сучасних хімічних виробництвах в сфері ракетної промисловості існує потреба в органічних розчинниках з незначним вмістом води. Нині існує велика кількість способів регенерації органічних розчинників.

Провідними способами зневоднення органічних розчинників є: адсорбція, абсорбція, утворення кристалогідратів, хімічна сорбція, первапарація, та виморожування. Адсорбція є найбільш відповідним способом для зневоднення розчинників. В даному дослідженні приведено розрахунок способу адсорбції на молекулярних ситах 3А. Існують наступні способи для розрахунку часу адсорбції органічних розчинників: практичний, а саме за часом виходу основного продукту, та використання ізотерм адсорбції, за рівнянням П.А.Шилова [1].

В даному дослідженні розрахунки проведено, проаналізувавши іноземну науково-дослідницьку статтю: Isotherms for water adsorption on molecular sieve 3A: influence of cation composition [2]. Розрахунки проводять за рівнянням Шилова, використовуючи дані статті а саме: ізотерм адсорбції ізопропанолу та метиленхлориду. Молекулярні сита для проведення даного дослідження обрано використовуючи дані з статті, відповідно виходячи із властивостей розчинника, який необхідно зневоднити [3].

В ході дослідження отримано наступні результати. За продуктивністю органічного розчинника 2000 кг/доб час адсорбції складає 58 годин для ізопропанолу, та 67 для метиленхлориду. Висота шару цеоліту розрахована згідно методики Шилова, складає 2,6м, маса цеоліту – 1600 кг, що

відповідає технічним характеристикам промислових цеолітових установок. Відповідно дані цеолітові установки випускаються провідною компанією-виробником Silica Verfahrenstechnik GmbH (Німеччина) [4].

Отримані результати надають наступний висновок про те, що провідні промислові цеолітові установки є актуальними для хімічних виробництв, та вже сьогодні мають бути використані у проектуванні хімічних виробництв для приготування компонентів ракетного палива.

Список використаної літератури:

1. Романков И.Г. , Фролов В.Ф. , Флисюк О.М. Методы расчёта процессов и аппаратов химической технологии. Санкт-Петербург: ХИМИЗДАТ, 2009.
2. Llano-Restrepo M.; Mosquera M. A. Accurate correlation, Thermochemistry, and structural interpretation of equilibrium adsorption isotherms of water vapor in zeolite 3A by means of a generalized statistical thermodynamic adsorption model. Fluid phase equilib. 2009, 283 (1–2), 73.10.1016/j.fluid.2009.06.003
3. Adsorptive Water Removal from Dichloromethane and Vapor-Phase Regeneration of a Molecular Sieve 3A Packed Bed // NCBI веб-сайт. URL: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC5437812/>
4. Drying by adsorption [Електронний ресурс] // silica verfahrenstechnik gmbh. – 2018. – Режим доступу до ресурсу: https://silica.berlin/PDF/DRYING_END_DEUTSCH_WEB.pdf.

**ВИЗНАЧЕННЯ СПІВВІДНОШЕНЬ МІЖ ЕНЕРГЕТИЧНИМИ
ХАРАКТЕРИСТИКАМИ НІТРАТЦЕЛЮЛОЗНИХ МАТЕРІАЛІВ
РОЗРАХУНКОВИМ МЕТОДОМ**

Варлан К. Є., Нестеров А. М., Луцкевич А. О.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

пр. Гагаріна, 72, м. Дніпро, Україна, 49010

Останнім часом зростає актуальність досліджень, спрямованих на вдосконалення та створення нових високоенергетичних матеріалів (ВЕМ), зокрема нітратцелюлозних порохів та баліститних ракетних палив. Ефективність застосування ВЕМ безпосередньо залежить від їх енергетичних характеристик, зокрема теплоти $Q_{V(ж)}$ та температури T_1 горіння. Експериментальне визначення властивостей порохів та ракетних палив потребує спеціального обладнання та дотримання жорстких заходів безпеки, а існуючі методики передбачають виконання значної кількості одиничних випробувань. Ці обставини обумовлюють складнощі, що не сприяють ефективності досліджень.

З огляду на вищенаведене, набувають актуальності розрахункові методи визначення енергетичних властивостей ВЕМ, зокрема енергетичного потенціалу гіпотетичних ракетних палив [1], теплоти та температури горіння і вибуху тощо [2]. Раніше повідомлялося про застосування розрахункової методики визначення енергетичних характеристик для попередньої оптимізації паливних складів та впливу на їх властивості природи і вмісту складових інгредієнтів [3]. В розвиток цих досліджень за наведеною методикою виконані розрахунки гіпотетичних складів баліститних ВЕМ (БВЕМ). Метою цього розрахункового дослідження стало виявлення залежностей між $Q_{V(ж)}$ та іншими енергетичними характеристиками, а також можливості їх розрахунку через попередньо отриману теплоту горіння за допомогою емпіричних рівнянь для різних марок БВЕМ. Визначення мети дослідження обумовлено тим, що, за умови відомих кількісних складів БВЕМ та продуктів їх горіння, а також відповідних значень ентальпій утворення, розрахункові методи

теплоти горіння [2] дають результати із цілком прийнятною збіжністю з даними калориметричних випробувань. Решту енергетичних та деяких балістичних характеристик розраховують з використанням значень теплоти горіння.

Для досягнення мети дослідження виконані розрахунки наступних енергетичних характеристик: $Q_{V(ж)}$ – адіабатичної теплоти, виділеної під час горіння 1 кг ВЕМ у інертному середовищі та незмінному об'ємі за умови, що вода присутня у продуктах горіння у вигляді рідини, $\text{кДж}\cdot\text{кг}^{-1}$; T_1 – максимальної температури, яку мають продукти горіння ВЕМ в момент їх утворення, К; питомого об'єму продуктів горіння W_1 – об'єму газоподібних та пароподібних продуктів згорання 1 кг ВЕМ в інертному середовищі, наближеному до нормальних термодинамічних умов, $\text{м}^3\cdot\text{кг}^{-1}$; «сили порошу» f – роботи розширення продуктів горіння 1 кг ВЕМ до досягнення температури і тиску, що відповідають нормальним умовам, $\text{кДж}\cdot\text{кг}^{-1}$. Розрахунки виконувалися для дослідних БВЕМ із наступними складами:

Інгредієнти	Вміст, %
Нітрат целюлози (НЦ) із вмістом нітрогену (11,6 – 12,3)%	47,5 – 62,5
Нітрат багатоатомного спирту (НС) (гліцерину або діетиленгліколю)	22,5 – 37,5
Дибутилфталат (ДБФ)	0 – 12,0
Динітротолуол (ДНТ)	0 – 12,0
Стабілізатор хімічної стійкості	3

Примітка. Крок варіювання вмісту інгредієнтів у дослідних складах був таким, %: НЦ, НС – 2,5; ДБФ та ДНТ – 2,0. Крок варіювання вмісту нітрогену в НЦ, %, – 0,1

Обробка отриманих результатів за допомогою Microsoft Excel 2016 показала, що в досліджених інтервалах вмісту інгредієнтів між T_1 та $Q_{V(ж)}$ існує лінійна залежність з величиною достовірності апроксимації $R^2 > 0,995$. Залежності $T(Q)$ мають вигляд:

для складів на основі нітрату дигліколю (НДГ)

$$T_1 = 411,7 + 0,699 Q_V;$$

для складів на основі нітрату гліцерину (НГЦ)

$$T_1 = 364,0 + 0,730 Q_V.$$

Також було виявлено лінійну залежність з $R^2 > 0,992$ між Q та f :

для складів на основі НДГ

$$f = 429,7 + 0,198 Q_V;$$

для складів на основі НГЦ

$$f = 501,9 + 0,181 Q_V.$$

Аналіз співвідношень теплот горіння з об'ємом продуктів згоряння БВЕМ не виявив однозначної залежності $W(Q)$. Кореляція між цими величинами краще за все відповідає поліноміальній залежності третього та вищих порядків.

Отримані результати можна використовувати для прогнозування кількісних значень енергетичних характеристик БВЕМ за результатами визначення лише теплоти горіння.

Перелік джерел посилання

1. Гудкова И. Ю., Лемперт Д. Б. Энергетический потенциал некоторых нитрозамещенных гипотетических производных триазолов // Омский науч. вестник. Сер. Авиацонно-ракетное и энергетич. машиностроение. Т. 5, № 3. 2018. С. 51-57.
2. Сугак Н. Ю., Мочалов С. В. Расчёт взрывчатых характеристик ВВ: Учеб. пособие. Бийск : Изд-во Алт. гос. ун-та, 2013. 106 с.
3. Варлан К. Є., Луцкевич А. О. Дослідження впливу складу нітратцелюлозних порохів на їх характеристики розрахунковим методом // XVIII Всеукр. конф. молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії. Дніпро, 18-21 травня 2020 р. С. 100-104.

ТЕХНОЛОГІЯ ОДЕРЖАННЯ ДИСПЕРСНО-НАПОВНЕННОГО КОМПОЗИЦІЙНОГО МАТЕРІАЛУ НА ОСНОВІ ВТОРИННОГО ПОЛІПРОПІЛЕНУ

Розенбаум Б.Г., Суровцев О.Б.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара,

Дніпро, Україна

Полімерні композиційні матеріали (ПКМ) на основі термопластичної матриці набувають все більшого значення у промисловості. Термопласти, що застосовують в якості зв'язуючих, поступаючись альтернативним їм реактопластам за такими показниками властивостей як: міцність, теплостійкість, хімічна стійкість, низька в'язкість вихідних композицій, хороша змочуваність та адгезія, при цьому вони мають перевагу за такими властивостями як: ударна в'язкість, тріщиностійкість, низькі залишкові напруження і хімічна усадка. Важливим є також можливість їх вторинної переробки. Таким чином рециклінг термопластів, що виробляють у великих масштабах, дозволяє створювати на їх основі нові більш дешеві ПКМ.

На прикладі використання вторинного поліпропілену (ПП) розглянуті технологічні підходи для виробництва дисперсно-наповнених композиційних матеріалів гранульованої форми для подальшої переробки литтям під тиском у виробі, що мають високу міцність, низьку густину, високі діелектричні та теплоізоляційні властивості, водо- і хімічну стійкість.

Технологічний процес отримання дисперсно-наповненого композиційного матеріалу складається з таких операцій:

- попереднє сортування (вручну на столах або стрічкових конвеєрах) полімерних відходів (грубе їх розподілення за кольором, габаритами і, по можливості, за видами пластмас);
- подрібнення відходів ПП в шредері, далі відмивання у ванній для позбавлення від домішок, що важчі за воду, потім флотаційна мийка;
- ополіскування сировини від миючих засобів і мікрочастинок у вібраційному ополіскувачі з подальшим осушенням;
- завершення процесу сушіння відходів ПП за допомогою вальцевого осушувального пристрою до залишкової вологості менше 0,1%;
- проведення переробки методом черв'ячно-дискової екструзії попередне виготовленої суміші подрібнених відходів ПП з дисперсним наповнювачем або дозування цих компонентів безпосередньо в зону завантаження з одержанням гранульованої форми ПКМ конструкційного призначення із заданим ступенем наповнення 20 – 40 мас.%.

НЕЙТРАЛІЗАЦІЯ КИСЛИХ ВОДНИХ СТОКІВ В РЕАКТОРІ З ПОЛІПРОПІЛЕНУ

Деркаченко Д. О., Поджарський М. А.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, пр. Гагаріна 72, м. Дніпро, Україна

Нейтралізація кислих водних стоків хімічних підприємств, зокрема, для виробництва компонентів ракетного палива є нагальною проблемою, яку необхідно вирішувати ще на етапі проектування. Її складність полягає у строгих вимогах до корозійної стійкості технологічного обладнання, які в значній мірі обумовлюють його високу вартість. Однак в останні роки з'явилися нові технічні рішення, які дозволяють значно здешевити технологічне обладнання, не ризикуючи втратити його корозійні властивості. Так, замість корозієстійких сплавів для виготовлення реакторів-нейтралізаторів можна використовувати більш доступні та дешеві сучасні полімерні матеріали.

Метою цього дослідження є розробка реактора-нейтралізатора кислих водних стоків у виробництві діацетилфероцену, виготовленого з поліпропілену.

Розробка проводилася методом теоретичних розрахунків з використанням сучасної комп'ютерної техніки.

Після проведення аналітичного огляду літератури було обрано метод реагентної нейтралізації за рахунок прямого додавання нейтралізуючого агенту NaOH до кислого розчину. У процесі розрахунку апарату з поліпропілену, треба враховувати той факт, що реакції нейтралізації є дуже екзотермічними і в процесі нейтралізації виділяється дуже велика кількість теплоти. Так як за технологічними вимогами, температура реакційного середовища не повинна перевищувати 40°C, було запропоновано регулювати швидкість реакції, а отже і швидкість виділення теплоти шляхом порційного додавання NaOH до реактору. Також реакційне середовище треба охолоджувати і тому, що реакції нейтралізації є екзотермічними, а отже, для того, щоб змістити їх рівновагу у бік утворюваних продуктів, треба зменшувати температуру реакційного середовища. На основі теоретичних даних, стосовно проектного процесу, було проведено матеріальні і теплові розрахунки апарата-нейтралізатора. В результаті матеріальних розрахунків було визначено необхідну кількість луку NaOH для повної нейтралізації вихідного розчину. Також було визначено кількість продуктів реакцій, що утворюються. У Таблиці 1 наведено основні результати матеріального розрахунку. Варто зазначити, що реакція проходить зі збільшенням

кількості молів реагентів, тому матеріальний баланс сходиться тільки по масі.

Таблиця 1 – Матеріальний баланс апарата нейтралізатора

Прихід		Витрати	
Речовина	m(кг)	Речовина	m(кг)
C10H10Fe	0,15	C10H10Fe	0,15
CH ₂ Cl ₂	41,62	CH ₂ Cl ₂	41,62
AlCl ₃ *6H ₂ O	440,73	NaAlO ₂	149,64
HCl	55,03	NaCl	408,15
C14H14FeO ₂	17,61	C14H14FeO ₂	17,61
C12H12FeO	0,08	C12H12FeO	0,08
CH ₃ COOH	7,79	CH ₃ COONa	10,63
H ₂ O	1937,00	H ₂ O	2227,24
NaOH	357,57		
Σ	120479,58	Σ	133128,36

На основі матеріальних розрахунків було проведено теплові розрахунки, визначено загальне теплове навантаження змішувального теплообмінника. Результати теплових розрахунків наведені у Таблиці 2:

Таблиця 2 – тепловий баланс апарата-нейтралізатора

	Прихід	Витрати
ΣQ _{фіз} , кДж	215789,02	291777,25
Q Розчинення NaOH, кДж	466918,14	
ΣQ _{х.р.} , кДж	483651,10	
Q _{отв} , кДж.	-874581,00	
Сума:	291777,25	291777,25

Для регулювання швидкості виділення теплоти, була розрахована швидкість подачі NaOH. Впродовж перших 4 годин з моменту початку процесу вона становить 30 кг/годину. Через 4 години до реактору буде завантажено повний обсяг кислого розчину і нейтралізована основна маса кислот, а отже швидкість подачі луку можна збільшити до 60 кг/годину. Повний обсяг нейтралізуючого агенту буде завантажено до реактору за 8 годин. На основі цих даних було розраховано витрати води на охолодження реактори кг/годину. Результати цього розрахунку наведено на Рисунку 1. По осі X відкладено час в годинах, по осі Y – витрати води в кг/секунду:

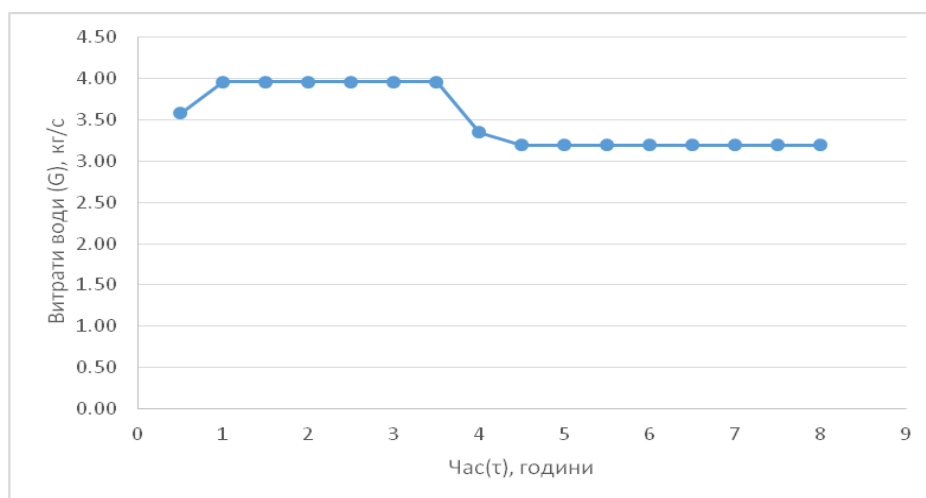


Рисунок 1 – Графік зміни витрат води на охолодження реактору

На основі матеріальних і теплових розрахунків визначено основні конструкційні параметри реактора-нейтралізатора кислих водних стоків продуктивністю 2500 кг/добу, виготовленого з поліпропілену. Технологічні показники процесу нейтралізації: температура реакційної суміші не більш за 40°C, процес проходить під атмосферним тиском, вихідна суміш – водний розчин соляної кислоти з концентрацією 15-20%, домішки: оцтова кислота, сполуки алюмінію, похідні ферецену. Розраховані основні геометричні параметри реактору: загальний об'єм 3 м³, робоча висота ємності 1,95 м, внутрішній діаметр 1,4 м. товщина стінки корпусу і днища 12 мм. Визначені розміри і технічні характеристики лопатевої, однорядної мішалки: діаметр лопаті: 1 м, ширина лопаті 0,21 м, швидкість обертання валу 70 хв⁻¹, потужність двигуна 5 кВт. Передбачена можливість футерування лопаті мішалки полімерним матеріалом для зменшення маси та запобігання корозії металевих частин. Розраховано змійовиковий теплообмінник необхідної потужності.

В якості матеріалу конструкції апарату пропонується використовувати полімерний матеріал - поліпропілен, отриманий екструзійним способом. Фізико-механічні характеристики цього конструкційного матеріалу повністю відповідають вимогам технологічного процесу: Діапазон робочих температур: -10°C – 100°C; Максимальний робочий тиск: До 1 МПа; Модуль пружності при згинанні: 0,67 ГПа; За температури до 40 °C проявляє високі показники стійкості до концентрованої соляної кислоти.

Отримані результати досліджень можуть бути використані для створення масштабної 3D-моделі апарату у процесі для його подальшого конструювання.

ПОРИСТІ СКЛОКРИСТАЛІЧНІ МАТЕРІАЛИ

Кольцова Я.І., Салей А.А., Петух С.І., Кудимов В.Д.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»

просп. Гагаріна, 8, Дніпро, 49000, Україна

На ринку теплоізоляційних матеріалів існують такі види виробів, як пінопласт, газобетон, пінобетон, м'які утеплювачі із скло-і мінеральної вати, та найбільш перспективним є піноскло. На фоні інших типів теплоізоляційних матеріалів піноскло має ряд переваг, таких як: стійкість до дії гнилі, мікроорганізмів, комах і гризунів, не горючість, постійність об'єму і стійкість до дії води і багатьох хімічних реагентів. Недоліком його є порівняно низька механічна міцність, що не дозволяє використовувати піноскло у якості конструкційно-теплоізоляційного матеріалу.

Склокристалічні пористі матеріали визначаються більш високою механічною міцністю ніж звичайне піноскло, тому метою роботи є розробка складу та дослідження властивостей пористих склокристалічних матеріалів з підвищеною міцністю.

Для отримання пористих склокристалічних матеріалів (ПСКМ) використовувався бій листового скла, а в якості газоутворюючої добавки – мартенівський шлак ПАТ «Інтерпайп НТЗ» в кількості 10 мас.%. Попередніми дослідженнями було встановлено, що використання шлаку сприяє утворенню в міжпорових перегородках кристалів анортиту та воластоніту, що підвищує міцність матеріалів за рахунок їх армуючої дії.

В даній роботі до складу ПСКМ шляхом часткової заміни бою листового скла вводили спеціально зварене скло складу, мас. %: SiO_2 – 35,25-37,85, B_2O_3 – 7,06 - 8,78, Al_2O_3 – 1,97 - 3,59, CaO – 30,88 - 30,95, MgO – 24,11 - 17,45, ZrO_2 – 0,18 - 0,40, Fe_2O_3 – 0,17 - 0,49, CoO – 0,37 - 0,50.

Згідно даних диференційно – термічного аналізу його плавлення відбувається до температури 800 °С. До того ж за результатами рентгенофазового аналізу воно кристалізується з утворенням кристалів діопсиду. Таке скло вводили в кількості 5, 10, 15, та 20 мас. %.

Зразки циліндричної форми, отримані напівсухим пресуванням, випалювали у муфельній електричній печі при наступному режимі: загрузка в піч за температури 600 °С, швидкий підйомом до 750 °С з витримкою при такій температурі 1 годину та наступним поступовим охолодженням.

Для випалених зразків визначали коефіцієнт спучування, механічну міцність на стиск, об'ємну вагу та коефіцієнт конструктивної якості як відношення межі міцності до об'ємної ваги матеріалу.

За результатами досліджень було встановлено, що коефіцієнт спучування зразків знаходиться в межах 3,13-4, а коефіцієнт конструктивної якості з підвищенням вмісту діопсидового скла у складі ПСКМ зростає з 11.13 (при введенні 5 мас. %) і до 14.73 (при введенні 20 мас. %). Це вказує на можливість використання такого скла у складі ПСКМ з метою підвищення міцності.

ДЕКОРАТИВНІ ПОКРИТТЯ ДЛЯ ГЛАЗУРОВАНОЇ ПЛИТКИ З ВИКОРИСТАННЯМ ВТОРИННОЇ СИРОВИНИ

Кольцова Я.І., Ходзіцька О.С.

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»
просп. Гагаріна, 8, Дніпро, 49000, Україна*

Сьогодні у світі глобальним напрямком в області використання відходів виробництв є перехід від їх поховання і спалювання до промислової переробки з метою подальшого використання. За рахунок застосування відходів у якості вторинних матеріальних ресурсів можна вирішити ряд таких важливих задач як економія сировини, запобігання забрудненню водойм, ґрунту і повітряного басейну, збільшення обсягів виробництва деталей і виробів, освоєння випуску нових для підприємств товарів. Використання відходів виробництв в якості компоненту шихти глазури для нанесення на облицювальні керамічні вироби дозволить розширити кольорову гамму покриттів, досягти різних декоративних ефектів та регулювати такі властивості виробів, як міцність, морозостійкість, зносостійкість та інші.

Метою даної роботи були дослідження, спрямовані на розробку складів глазурних покриттів з використанням вторинних сировинних матеріалів, зокрема паливного шлаку та золи-унесення Придніпровської теплоелектростанції (ТЕС) Дніпропетровської області.

В якості сировинних матеріалів для виготовлення глазурей використовувались бій листового скла, місцеві глина та суглинок Сурсько – Покровського родовища Дніпропетровської області, світловипалювальна глина ПЛГ-2, а в якості барвників використовували відходи ТЕС. При цьому відходи до складу покриттів вводили як окремо, так і сумісно,

згідно з симплекс-решітчастим методом планування експерименту, за рахунок часткової заміни бою скла. Дослідні глазурні шлікери наносили на керамічну плитку утильного випалу методом поливу та після сушки випалювали за температур 1000 та 1100°C. Після випалу декоративні покриття мали рівну матову поверхню та добре зчеплення з керамічним черепком.

Кольорова гама покриттів змінювалась від кремового до коричневого при вмісті золи-унесення в кількості 20–60 мас.% , від світло-коричневого до темно-коричневого при вмісті паливного шлаку 20–60 мас.% до коричневого при їх сумісному введенні. Блиск покриттів залежав від температури їх випалу та знаходився в межах 4-10% при випалі за температури 1000°C і 1100°C.

За результатами досліджень встановлено, що покриття її вмістом відходів ТЕС можуть бути рекомендовані для випуску глазурованих керамічних плиток.

СЕКЦІЯ

ФІЗИЧНА ТА НЕОРГАНІЧНА ХІМІЯ

Керівник: Стець Надія Вікторівна, зав. каф. органічної, фізичної та неорганічної хімії ДНУ, канд. хім. наук, доц.

Секретар: Плєсовська Катерина Андріївна, доцент каф. органічної, фізичної та неорганічної хімії ДНУ, канд. хім. наук, доц.

**СКЛАД ТА ТЕРМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ МІКРОПОРОШКІВ,
ОТРИМАНИХ ЦЕМЕНТАЦІЄЮ З РОЗЧИНІВ КУПРУМ (II)
СУЛЬФАТУ В ПРИСУТНОСТІ МАЛЕЇНОВОЇ КИСЛОТИ**

Лагута О.В., Пустільник С.В., Осокін Є.С., Полонський В. А.,

Варгалюк В.Ф.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

м. Дніпро, пр. Гагаріна, 72

Раніше нами були досліджені мідні мікропорошки, отримані електрохімічним і хімічним способом в присутності акрилової кислоти (АК). Було визначено наявність у складі порошків органічної складової і доведено, що вона є π -комплексом Cu^+ з аніонною формою акрилової кислоти [1, 2]. Слід зазначити, що подібні сполуки виділялися в індивідуальному вигляді, в роботах [3–5] були доведені їх склад і структура.

Мікробіологічна активність міді та її сполук добре відома [6, 7]. Проведені нами мікробіологічні випробування [8] підтвердили наявність бактерицидної активності у модифікованих акриловою кислотою мідних порошків, причому вона виявилася істотно вищою, ніж у порошку чистої міді. Представляло інтерес дослідження більш широкого кола подібних металорганічних мікропорошків. За результатами квантово-хімічного моделювання [9] можна припустити, що різноманітні комплексні структури з іонами купруму може утворювати і найближчий двухосновний аналог АК - малеїнова кислота (МК). Метою даної роботи стало отримання та дослідження складу, структури і термічних властивостей мідних мікропорошків, модифікованих сполуками малеїнової кислоти.

При виконанні роботи, окрім синтезу порошків, були застосовані такі методики: оптична мікроскопія – для дослідження мікроструктури порошків; комплексонометрія – для визначення в них вмісту купруму; термічний аналіз – для визначення поведінки зразків порошків при нагріванні та седиментаційний аналіз – для визначення їх гранулометричного складу.

Першим етапом роботи став синтез мідьорганічних мікропорошків. Була використана методика хімічного відновлення йонів Cu^{2+} порошком металевого цинку. Потрібно було враховувати декілька обмежень. Першим з них було значення рН. Відомо, що для системи $\text{Cu}-\text{SO}_4^{2-}-\text{H}_2\text{O}$ при $\text{pH} > 4$ можливо утворення важкорозчинних гідроксидних форм сполук Cu^{2+} . Тому синтез мідьорганічних мікропорошків проводився при більш низьких значеннях водневого показника. Було з'ясовано, що після змішування розчинів CuSO_4 та МК величина рН встановлювалась на значенні 0,7. Згідно з іонною діаграмою системи « H_2O – малеїнова кислота» у такому розчині в дисоційованому за першим ступенем стані знаходиться близько 5% МК. Процес цементації небажано проводити в сильно кислому середовищі, коли основна частина цинку буде витрачатися на реакцію з іонами гідрогену. Тому було вирішено також синтезувати мідьорганічні порошки при більш високих значеннях рН. При $\text{pH} = 1,0$ в іонній формі знаходилось 10% МК, а при $\text{pH} = 2,0$ – 45%. Провести синтези мідьорганічних порошків при більш високих значеннях рН не вдалося.

Перебіг процесу цементації під час синтезу композитних порошків є складним і багатоступеневим, залежить від співвідношення кількостей реагентів, температури та рН. Поступова зміна кольору розчину з синього на зелений вказує на відновлення йонів Cu^{2+} до Cu^+ , а зовнішній вигляд утвореного осаду підтверджує його неметалевий характер.

Мікроскопічні дослідження показують, що отримані порошки складаються з дрібних округлих частинок мікронних розмірів, які створюють агломерати довільної форми. Результати кількісного аналізу синтезованих мікропорошків на вміст купруму наведено в таблиці 1.

Таблиця 1. Масова частка купруму в мікропорошках

№	Проба	$\omega(\text{Cu})$, %	$\omega(\text{Cu})$, % після термічного аналізу
1	Cu_МК рН 0,7	38,92	58,25
2	Cu_МК рН 1,0	61,10	75,65
3	Cu_МК рН 2,0	55,60	75,26

Відмінність результатів аналізу на вміст купруму в порошках, отриманих при різних значеннях рН вказує на варіативність складу синтезованих речовин. Це можуть бути складні суміші, до яких, окрім металічної міді, входять Cu(I) та Cu(II) оксиди, а також малорозчинні комплекси купруму в різних ступенях окиснення з малеїновою кислотою.

Корисну інформацію стосовно складу синтезованих порошків та їх поведінки в умовах зміни температури можливо отримати за результатами термічного аналізу. В попередніх дослідженнях були отримані TG та DTG залежності для порошку «Cu_МК рН 0,7» [10]. Аналіз отриманих даних дозволив запропонувати формулу комплексу $[\text{Cu}^+(\text{C}_4\text{O}_4\text{H}_3)(\text{H}_2\text{O})_2]$. Потрібно відзначити, що схожа дериватограми були отримані J. R. Allan з співавторами для комплексу йонів Cu^{2+} з малеїновою кислотою [11].

Аналогічні дослідження із застосуванням термоаналізатору STA 6000 були проведені при виконанні даної роботи для зразків композитних порошків, отриманих при рН 1,0 та 2,0. Кількісні співвідношення зафіксованих термічних ефектів у порошках залежали від умов їх синтезу. Для всіх зразків характерні екзотермічні максимуми поблизу 300 °С,

пов'язані з руйнуванням органічної складової. Також були зафіксовані невеликі ендотермічні мінімуми в зоні 200 °С, які можна пояснити наявністю у складі комплексів води.

Залишки проб після термічного аналізу були проаналізовані на вміст купруму. Як видно з результатів, наведених у таблиці 1, окрім зразка «Cu-МК рН 0,7», два інші після нагрівання до 600° С містили приблизно однакову кількість купруму – 75%. Якщо розрахувати вміст Cu в оксиді CuO, то він складає 79,88 %. Тобто можна стверджувати, що після прожарювання порошків, отриманих при рН 1,0 та 2,0 практично вся органічна компонента руйнується з утворенням газоподібних продуктів і кінцевим продуктом є CuO.

Таблиця 2. Розміри часток мікропорошків

Порошок	$r_{\min}$, МКМ	r_n , МКМ	$r_{\max}$, МКМ	П
Cu_МК рН 0,7	1,3	8,8	54,1	41,6
Cu_МК рН 1,0	1,1	4,9	33,2	30,2
Cu_МК рН 2,0	1,3	4,7	31,8	24,5

Для визначення гранулометричного складу отриманих матеріалів було застосовано дисперсійний аналіз, проведений шляхом седиментації часток суспензії порошку в гравітаційному полі. Отримані результати наведено в таблиці 2. Як видно, з підвищенням рН, при якому порошок був синтезований, величина найбільш вірогідного радіусу часток зменшується з 8,8 мкм (рН = 0,7) до 4,7 мкм (рН = 2,0). Також спостерігається тенденція зменшення ступеня полідисперсності з 41,6 до 24,5 відповідно.

Таким чином, методом цементації цинком з розчинів купрум (II) сульфату різної кислотності в присутності малеїнової кислоти синтезовано мідні мікродисперсні осади композитного складу, що містять зв'язану воду та органічну складову. Отримані матеріали є перспективними для подальших мікробіологічних досліджень.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Варгалюк В.Ф. Структура та властивості мідних покриттів, електроосаджених із сульфатнокислих розчинів, що містять акрилову кислоту та акриламід / В. Ф. Варгалюк, В. А. Полонський, О. С. Стець, О. К. Балалаєв / Український хімічний журнал. – 2013 – Т. 79. – №3. – С. 51–58.
2. Варгалюк В. Ф. Электроосаждение меди в присутствии π -связывающих органических соединений / В. Ф. Варгалюк, В. А. Полонский, О. С. Стец, А. И. Щукин // Сучасні проблеми електрохімії: Освіта, наука, виробництво. Збірник наукових праць. – 2015. – С. 234–235.
3. Yanchak A. I. The first Copper(I) Halide π -complexes with allyl derivatives of urea and parabanic acid/ A. I. Yanchak, Y. I. Slyvka, V. V. Kinzhybalo, T. J. Bednarchuk, M. G. Mys'kiv // Вопросы химии и химической технологии. – 2019. – №3. – С. 67–73.
4. Slyvka Y. I. Copper(I) chloride π -complexes with 2,5-bis(allylthio)-1,3,4-thiadiazole: synthesis and structural features / Y. I. Slyvka, B. R. Ardan, M. G. Mys'kiv // Journal of Structural Chemistry. – 2018. – Vol. 59. – № 2. – P. 388–394.
5. Ardan B. Ligand-forced dimerization of copper(I) – olefin complexes bearing a 1,3,4-thiadiazole core / B. Ardan, V. Kinzhybalo, Y. Slyvka, O.

Shyyka, M. Lukyanov, T. Lis, M. Myskiv // *Acta Cryst.* – 2017. – Vol. 73. – P. 1–11.

6. Гарасько Е. В. Применение наноразмерных медьсодержащих порошков в качестве эффективных биоцидных препаратов / Е.В. Гарасько, М.В. Тесакова, С.А. Чуловская, В.И. Парфенюк // *Изв. вузов. Химия и хим. Технология.* – 2008. – Т. 51. – С. 116–119.

7. Bararunyeretse P. Interactive Effect of Copper and Its Mineral Collectors on Soil Microbial Activity / P. Bararunyeretse, H.O. Beckford, H. Ji // *Open Journal of Soil Science.* – 2019. – Vol. 9. – P. 47–64.

8. Варгалюк В.Ф. Мікробіологічні властивості дисперсії на основі міді, отриманої катодним осадженням в присутності акрилової кислоти / В.Ф. Варгалюк, В.А. Полонський, О.С. Стець, Н.В. Стець, А.І. Щукін // *Вісник Дніпропетровського університету. Серія Хімія.* – 2014 – Т. 22. – №2. – С. 47–51.

9. Vargalyuk V.F. Features of (dπ-π)-binding of Cu(I) ions with acrylic, maleic and fumaric acids in aqueous solution / V.F. Vargalyuk, Y.S. Osokin, V.A. Polonskyu, V.N. Glushkov // *Journal of Chemistry and Technologies.* – 2019. – Vol. 27. – P. 148–157.

10. Варгалюк В.Ф. Влияние малеиновой кислоты на состав и структуру медьорганических дисперсий, полученных химическим и электрохимическим восстановлением Cu^{2+} -ионов / В.Ф. Варгалюк, В.А. Полонский, Е.С. Осокин, А.Е. Скок // *Journal of Chemistry and Technologies.* – 2020 – V. 28 – №3 – P. 231–241.

11. Allan J. R. Thermal studies on maleic acid compounds of manganese (II), cobalt (II), nickel (II), copper (II) and zinc (II) / J. R. Allan, G. M. Baillie, J. G. Bonner. // *Thermochimica Acta.* – 1989. – №143. – P. 283–288.

ОСОБЛИВОСТІ БУДОВИ ТА РЕАКЦІЇ УТВОРЕННЯ ЗМІШАНИХ ХЛОРИДНИХ π -КОМПЛЕКСІВ КУПРУМУ(I) З ФУМАРОВОЮ КИСЛОТОЮ У ВОДНОМУ РОЗЧИНІ

Курасова Ю.Д., Осокін Є.С., Варгалюк В.Ф., Полонський В.А.
*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара,
49010, г. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72
e-mail: protactinium91.jk@gmail.com*

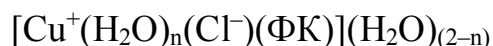
Перехідні метали за рахунок ($d\pi$ - $rp\pi$)-зв'язування з ненасиченими карбоновими кислотами, здатні утворювати хімічно стійкі комплексні сполуки в широкому діапазоні ступенів окиснення центрального атома. Зокрема, π -комплекси Купруму представляють інтерес завдяки цінним антибактеріальним властивостям [1].

Раніше було встановлено [2, 3], що молекули води у внутрішній координаційній сфері стабілізують π -комплекси Cu^+ з молекулярною формою малеїнової кислоти. Водночас, хлорид-іони у внутрішній координаційній сфері підвищують енергетичний ефект утворення змішаних хлоридних малеатних π -комплексів [4]. Тому було цікавим дослідити вплив хлорид-аніонів на $d\pi$ - $rp\pi$ -зв'язування іонів купруму(I) з фумаровою кислотою (ФК). Методика квантово-хімічних розрахунків наведена в роботі [2].

Як і в попередньому дослідженні [3], хлоридні фумаратні π -комплекси Cu^{2+} максимально можуть утримувати до двох молекул води. Виняток становлять хлоридні π -комплекси з повністю дисоційованою ФК в якості ліганду, в яких у внутрішній координаційній сфері максимально утримується лише одна молекула води. На першому етапі була проведена оптимізація змішаних хлоридних π -комплексів Cu^+ з різною кількістю молекул води у внутрішній координаційній сфері, в результаті чого були

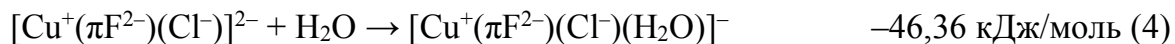
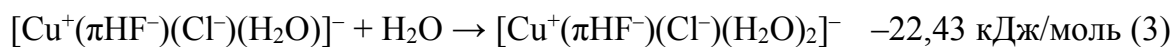
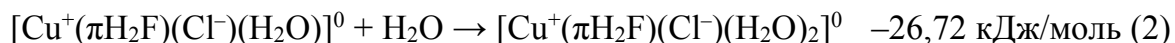
розраховані повні електронні енергії системи (Sum of electronic and zero point energy) (табл. 1).

Табл. 1 – Повні електронні енергії π -комплексів загального складу

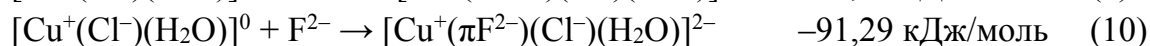
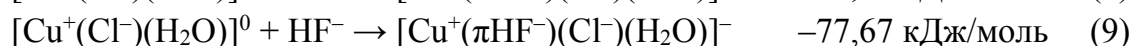
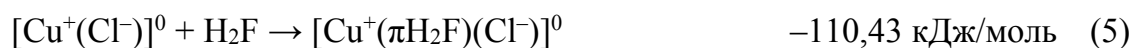


$[\text{Cu}^+(\text{H}_2\text{O})_n(\text{Cl}^-)(\text{ФК})](\text{H}_2\text{O})_{(2-n)}$	E, H
$[\text{Cu}^+(\pi\text{H}_2\text{F})(\text{Cl}^-)]^0$	-2709,454247
$[\text{Cu}^+(\pi\text{H}_2\text{F})(\text{Cl}^-)(\text{H}_2\text{O})]^0$	-2709,474823
$[\text{Cu}^+(\pi\text{H}_2\text{F})(\text{Cl}^-)(\text{H}_2\text{O})_2]^0$	-2709,485001
$[\text{Cu}^+(\pi\text{HF}^-)(\text{Cl}^-)]^-$	—
$[\text{Cu}^+(\pi\text{HF}^-)(\text{Cl}^-)(\text{H}_2\text{O})]^-$	-2709,032673
$[\text{Cu}^+(\pi\text{HF}^-)(\text{Cl}^-)(\text{H}_2\text{O})_2]^-$	-2709,041217
$[\text{Cu}^+(\pi\text{F}^{2-})(\text{Cl}^-)]^{2-}$	-2708,552192
$[\text{Cu}^+(\pi\text{HF}^-)(\text{Cl}^-)(\text{H}_2\text{O})]^-$	-2708,569850

Було встановлено, що π -комплекс $[\text{Cu}^+(\pi\text{HF}^-)(\text{Cl}^-)]^-$ попри будь-які спроби оптимізації перетворювався на σ -комплекс $[\text{Cu}^+(\sigma\text{HF}^-)(\text{Cl}^-)]^-$, тобто спостерігалось руйнування π -зв'язку між іоном Cu^+ та $\text{C}=\text{C}$ -фрагментом кислоти (6). Як показали результати дослідження в роботі [5], цей факт вірогідно викликаний особливостями використання відносно застарілого методу поляризаційного континууму РСМ. На другому етапі моделювались різноманітні реакції за участі змішаних фумаратних π -комплексів Cu(I) . Зокрема, реакції послідовного приєднання молекули води до внутрішньої координаційної сфери:



За реакціями (1) та (2) видно, що приєднання другої молекули води до внутрішньої координаційної сфери змішаних хлоридних π -комплексів з молекулярною формою ФК протікає з 1,5 разів меншим енергетичним ефектом, ніж приєднання першої молекули води. Також можна спостерігати незначне зменшення енергетичного ефекту приєднання першої молекули води до внутрішньої координаційної сфери зі зменшенням ступеня дисоціації молекули ФК (в ряду $\text{H}_2\text{F} \rightarrow \text{HF}^- \rightarrow \text{F}^{2-}$) у складі цих комплексів. Було проведено моделювання реакцій приєднання різних форм ФК до купрум(І) хлориду та купрум(І) аквахлориду:



Видно, що приєднання дисоційованих форм ФК до купрум(І) хлориду або купрум(І) аквахлориду протікає зі значно більшим енергетичним ефектом ніж молекулярної форми ФК. Було показано тенденцію зростання повної електронної енергії для комплексів загального складу $[\text{Cu}^+(\text{H}_2\text{O})_n(\pi\text{H}_2\text{F})(\text{Cl}^-)]$ та $[\text{Cu}^+(\text{H}_2\text{O})_n(\pi\text{H}_2\text{F})](\text{Cl}^-)$, як видно на

(рис. 1), останні мають незначний приріст в енергії відносно комплексів складу $[\text{Cu}^+(\text{H}_2\text{O})_n(\pi\text{H}_2\text{F})(\text{Cl}^-)]$.

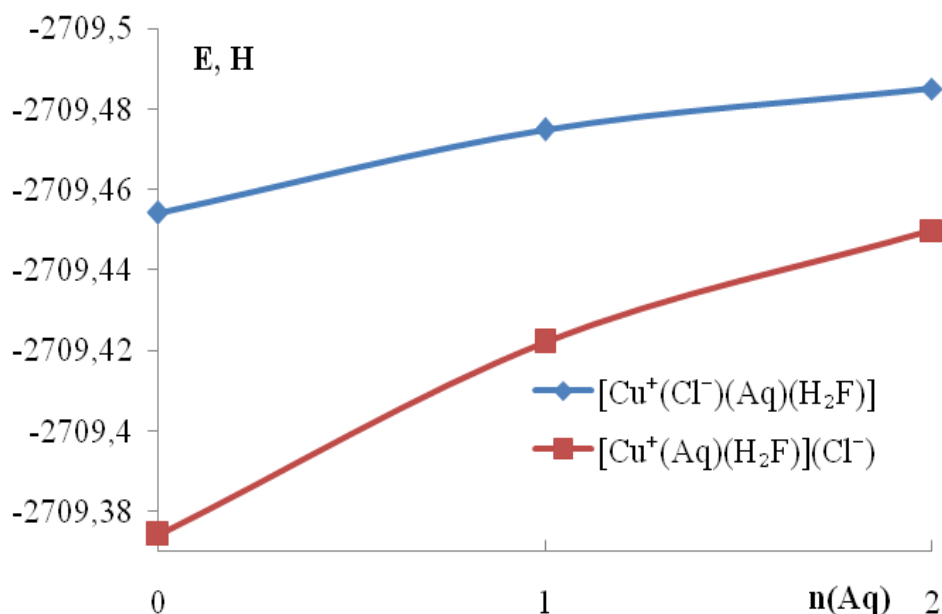


Рис. 1. Величини повної електронної енергії комплексів складу $[\text{Cu}^+(\text{H}_2\text{O})_n(\pi\text{H}_2\text{F})(\text{Cl}^-)]$ та $[\text{Cu}^+(\text{H}_2\text{O})_n(\pi\text{H}_2\text{F})](\text{Cl}^-)$ в залежності від кількості молекул води у внутрішній координаційній сфері

Перелік посилань

1. Мікробіологічні властивості дисперсії на основі міді, отриманої катодним осадженням у присутності акрилової кислоти / В. Ф. Варгалюк, В. А. Полонский, Н. Д. Стець, О. С. Стець, А. І. Щукін // Вісн. Дніпропетр.ун-ту. Серія Хімія. – 2014. – Т. 22, № 2. – С. 47–17.
2. Features of (dπ-pπ)-binding of Cu(I) ions with acrylic, maleic and fumaric acids in aqueous solution / V.F. Vargalyuk, Y. S. Osokin, V. A. Polonsky, V. N. Glushkov // Journal of Chemistry and Technologies. – 2019. – Vol. 27. – P. 148–157.

3. Осокін Є. С. Утворення π -комплексів атомів купруму з акриловою, малеїною та фумаровою кислотами у водному середовищі / Є. С. Осокін, В. Ф. Варгалюк, В. А. Полонський // Journal of Chemistry and Technologies. – 2020. – Vol. 28, No 2. – P. 153–160.
4. Осокін Є. С. Вплив хлорид-аніонів на $d\pi$ - $p\pi$ -зв'язування іонів купруму(I) з малеїною кислотою у складі аквакомплексів / Є. С. Осокін, В. Ф. Варгалюк, В. А. Полонський // Збірник наукових статей Восьмої міжнародної науково-практичної конференції: Комп'ютерне моделювання в хімії та технологіях і системах сталого розвитку. – 2020. – С. 304–307.
5. Осокін Є. С. Порівняння PCM та SMD методів для ab initio розрахунків малеатних π -ацидоаквакомплексів іонів Cu^+ / Є. С. Осокін, В. Ф. Варгалюк, В. А. Полонський // Матеріали V Всеукраїнської наукової конференції "Теоретичні та експериментальні аспекти сучасної хімії та матеріалів". – 2021. – С. 188–190.

ВПЛИВ СКЛАДУ ЕЛЕКТРОЛІТУ НА ЕЛЕКТРОВІДНОВЛЕННЯ КАТІОНІВ КОБАЛЬТУ(II) НА МІДНОМУ ЕЛЕКТРОДІ

Мірошніченко А.А., Борщевич А.О., Борщевич Л.В.

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара,

49010, м. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72

e-mail: borshchevich@i.ua

Одними з перспективних методів отримання матеріалів із заданими властивостями є електрохімічні, які легко піддаються управлінню та автоматизації. До недавнього часу електрохімічні технології несправедливо мало використовували в рішенні цих найважливіших завдань сучасного матеріалознавства. Перспективним у якості отримання композиційних електрохімічних покриттів є кобальтові покриття. Унікальні фізико-хімічні властивості кобальту, а саме магнітні, зберігаються при використанні його як гальванічного покриття. Такі покриття широко використовують в різних галузях промисловості.

Метою роботи стало дослідження кінетичних особливостей перебігу процесу електровідновлення катіонів кобальту(II) на мідному електроді в залежності від складу електроліту. Об'єктами дослідження були обрані сульфатні, перхлоратні та тетрафлуороборатні електроліти, що містили 0,1 моль/л Co^{2+} , 1М розчини відповідних солей натрію та добавки деяких кислот: борної, акрилової, пропіонової та цитратної.

Перхлоратні та тетрафлуороборатні розчини готувалися розведенням заздалегідь отриманих концентрованих розчинів тетрафлуороборату та перхлорату кобальту(II), які отримували дією на основний карбонат кобальту(II) концентрованими розчинами відповідних кислот. Концентрацію отриманих розчинів визначали за спектрофотометричною методикою, наведеною в роботі [1]. Поляризаційні вимірювання виконані за допомогою потенціостата ПІ-50-1 з програматором ПР-8 з використанням трьохелектродної комірки при швидкості розгортки потенціалу 0,1 В/с. У якості реєструючого приладу використовувався USB-осцилограф, підключений до комп'ютера PentiumCeleron. Для контролю потенціалу робочого електрода використовувався комбінований прилад Щ-4313, підключений до гнізд потенціостату як вольтметр. Перхлоратний електроліт виявився дуже нестабільним при зміні рН. Збільшення рН приводило до утворення осаду гідроксиду, який досить інертно поводить себе по відношенню до додавання хлорної кислоти, тому приходилося використовувати кислі розчини. В той час як сульфатні електроліти мали більший інтервал зміни кислотності середовища.

На рис. 1 наведена катодна гілка вольтамперограми, виміряної в перхлоратному електроліті на мідному електроді (крива 2). Слід зазначити, що навіть в кислих електролітах при $\text{pH}=2,1$ на мідному електроді після вимірювання візуально спостерігалось утворення чорного осаду, який механічно не знімався, а розчинявся у розчині хлоридної кислоти.

Катодна ділянка вольтамперограми, виміряна в розчині, що містить 0,1 моль/л кобальт перхлорату і 1 молярний натрій перхлорат характеризується наявністю трьох характерних хвиль. Перша хвиля в області потенціалу $-0,4 \div (-0,6)$ В відповідає виділенню водню, а дві інші хвилі в області потенціалів -1В та $-1,3\text{В}$ характеризують процес електровідновлення катіонів кобальту(II).

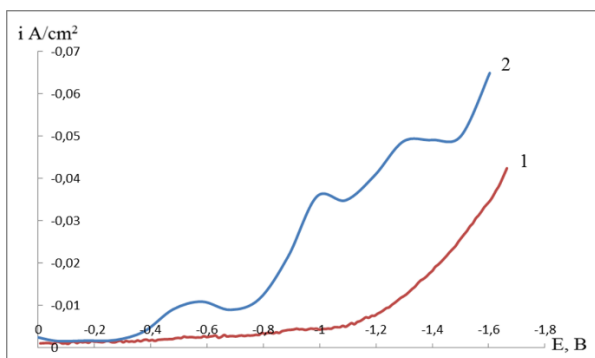


Рисунок 1 – Катодні гілки вольтамперограм, виміряних на мідному електроді у розчинах, що містять: 1) 1М NaClO_4 ; $\text{pH}=1,3$ 2) 0,1М $\text{Co}(\text{ClO}_4)_2$, 1М NaClO_4 . $\text{pH}=1,5$

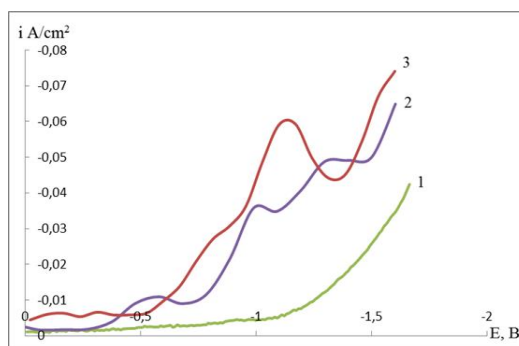


Рисунок 2 – Катодні ділянки вольтамперних залежностей, виміряних на мідному електроді в розчинах, що містять: 1) 1М NaClO_4 ; 2) 0,1М $\text{Co}(\text{ClO}_4)_2$, 1М NaClO_4 ; 3) 0,1М $\text{Co}(\text{ClO}_4)_2$, 1М NaClO_4 , 0,1М АК. $\text{pH}=2$.

Зменшення концентрації йонів $\text{Co}(\text{II})$ у 10 раз приводить до зміни вигляду вольтамперограми. Характерні піки на катодній гілці стають менш вираженими і крім того зміщуються в анодну область. Для хвилі, яка знаходиться при потенціалі $-1,0\text{В}$, був визначений критерій Семерано, який становив 0,19. Це свідчить про те, що процес електровідновлення йонів $\text{Co}(\text{II})$ на мідному електроді відбувається із змішаним контролем: кінетичним і дифузійним.

Введення до перхлоратного розчину акрилової кислоти в концентрації 0,1 моль/л приводить до зникнення першої і нівелювання другої хвилі, які були характерними для перхлоратного розчину (рис. 2) На кривій з добавкою акрилової кислоти спостерігаємо наявність характерної хвилі при потенціалі $-1,2\text{ В}$. Причому висота цього піку майже у двічі більша за такий у електроліті без додавання акрилової кислоти.

Як видно, в області потенціалів $-1,0 \div -1,2$ В спостерігається збільшення загального катодного струму у розчині, що містить акрилову кислоту порівняно з базовим електролітом (рис. 2). Крім того, проведені раніше квантово-хімічні розрахунки співробітниками кафедри [2] дозволити встановити, що акрилова кислота запобігає перебігу стадії, внаслідок якої утворюється кобальт(II) гідроксид. Хвиля, яка характерна для катодної вольтамперограми у присутності акрилової кислоти залежить від концентрації кислоти. На рис. 3 видно, що збільшення утринчі концентрації акрилової кислоти закономірно збільшує висоту піку катодної вольтамперограми і зміщує його в катодну область на $0,2$ В.

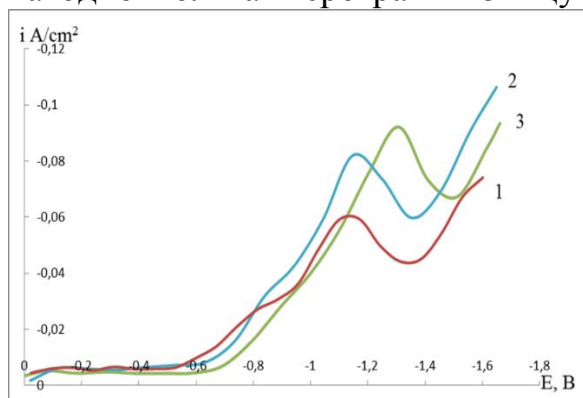


Рисунок 23 – Катодні ділянки вольтамперних залежностей, виміряних на Cu електроді в розчинах, що містять: 1) $0,1\text{M Co(ClO}_4)_2$, 1M NaClO_4 , $0,1\text{M AK}$; 2) $0,1\text{M Co(ClO}_4)_2$, 1M NaClO_4 , $0,2\text{M AK}$. 3) $0,1\text{M Co(ClO}_4)_2$, 1M NaClO_4 , $0,3\text{M AK}$. $\text{pH} = 2$

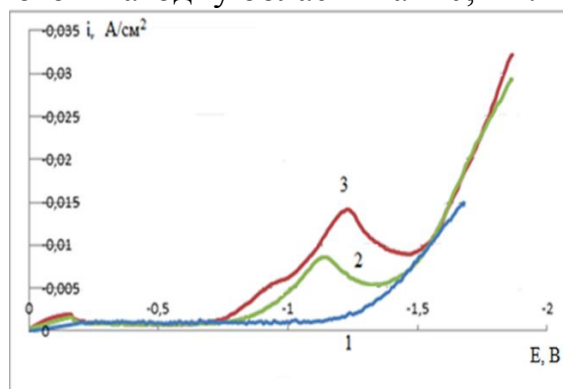


Рисунок 4 – Катодні ділянки вольтамперних залежностей, виміряних на Cu електроді в розчинах, що містять: 1) 1M NaClO_4 ; 2) 1M NaClO_4 , $0,1\text{M AK}$; 3) 1M NaClO_4 , $0,2\text{M AK}$. $\text{pH} = 2$. $V = 0,1$ мВ/с

Слід зазначити, що сама акрилова кислота є електроактивною речовиною, що можна побачити на рис. 4. Нами було зроблено припущення, що акрилова кислота поводить себе як буферуюча добавка, подібно борній кислоті. Тому були виміряні аналогічні вольтамперограми в присутності борної кислоти різної концентрації. На рис. 5 представлена відповідна залежність. На вольтамперограмі з борною кислотою спостерігається зміщення піків, що були виявлені у перхлоратному розчині в катодну область на $0,2\text{--}0,3$ В, крім того зменшується висота третього піку. Двократне збільшення концентрації борної кислоти приводить до деякого збільшення висоти піку в області потенціалу $-1,2$ В і до його зсуву в катодну область (рис. 6). Подальше збільшення концентрації борної кислоти до $0,3$ моль/л не впливає на його характер. Як видно з характерних вольтамперограм, виміряних в розчинах з додаванням акрилової і борної кислоти, є деякі розбіжності в їх впливі на характер

вимірюваних залежностей. Акрилова кислота збільшує швидкість катодних процесів порівняно з електролітами, що містять добавки борної кислоти. Слід відзначити, що обидві кислоти загальмовують реакцію виділення водню.

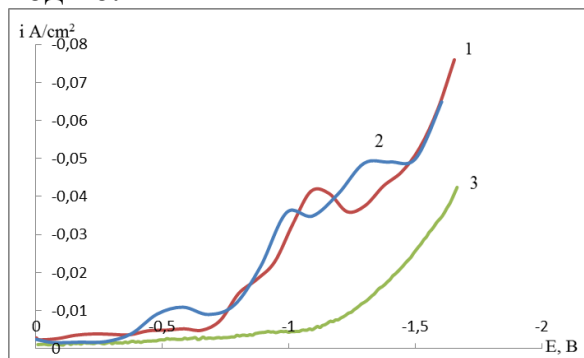


Рисунок 5 – Катодні ділянки вольтамперних залежностей, вимірюваних на мідному електроді в розчинах, що містять: 1) 1M NaClO₄; 0,1M Co(ClO₄)₂; 0,1M H₃BO₃. pH=1,2 2) 1M NaClO₄; 0,1MCo(ClO₄)₂; pH=1,3. 3) 1M NaClO₄

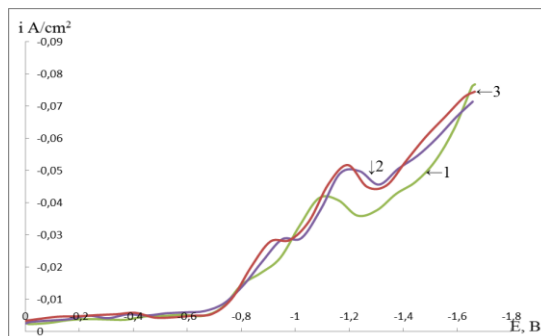


Рисунок 6 – Катодні ділянки вольтамперних залежностей, вимірюваних на мідному електроді в розчинах, що містять: 1) 1M NaClO₄; 0,1MCo(ClO₄)₂; 0,1M H₃BO₃. pH=1,2 2) 1M NaClO₄; 0,1MCo(ClO₄)₂; 0,2M H₃BO₃. pH=1,2 3)1M NaClO₄; 0,1MCo(ClO₄)₂; 0,3M H₃BO₃. pH=1,3

В літературі відомо, що в деякі електроліти кобальтування для покращання якості кобальтових покриттів вводять добавки цитратної кислоти. Тому було цікавим порівняти кінетичні залежності в такому електроліті з дослідженими нами розчинами. На рис. 7 представлені отримані вольтамперограми.

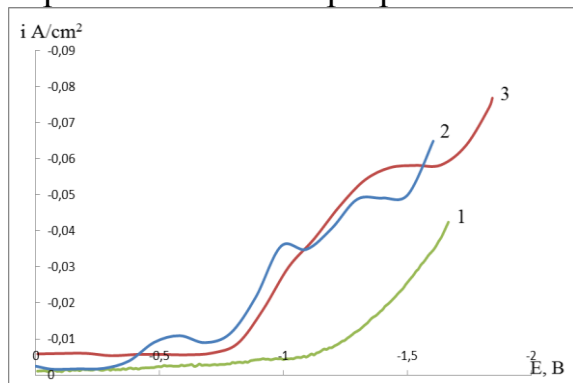


Рисунок 7 – Катодні ділянки вольтамперних залежностей, вимірюваних на мідному електроді в розчинах, що містять: 1) 1M NaClO₄; 2) 0,1M Co(ClO₄)₂, 1M NaClO₄; 3) 1M NaClO₄, 0,1M Co(ClO₄)₂, 1M цитратна кислота. pH=2,9

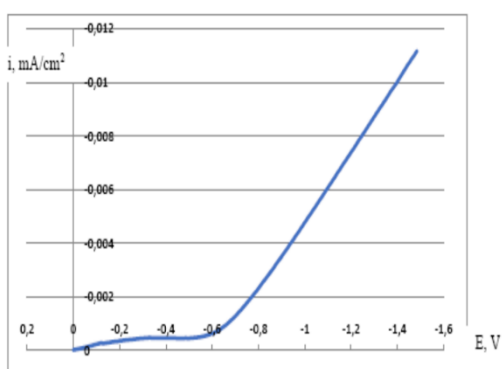


Рисунок 8 – Катодна ділянка вольтамперної залежності, вимірювана на мідному електроді в розчині, що містить: 1M NaBF₄; 0,1M Co(BF₄)₂. pH=2,0

Порівняно з перхлоратним розчином на катодній ділянці вольтамперометричної залежності спостерігається лише одна характерна хвиля в області потенціалів $-1,2 \div (-1,6)$. Що свідчить, ймовірно, про інший механізм електровідновлення катіонів кобальту(II). В такому розчині приймають участь комплексні катіони кобальту, про що є відомості в літературі [3]. Нами були проведення вимірювання вольтамперограм у тетрафлуороборатному електроліті (рис. 8). На цій кривій в тетрафлуороборатному розчині відсутня хвиля, характерна для електровідновлення катіонів кобальту(II) і лише в області потенціалів $0 \div (-0,5)$ В спостерігається незначне за висотою плато.

На рис. 9 представлені катодні ділянки ВАГ, виміряні на мідному електроді в сульфатному та фоновому електролітах. Водневий пік на катодній кривій дещо зміщений в катодну область, порівняно з такими ділянками на платиновому та золотому електродах ($E = -0,8 \div -1,1$ В). Ділянка ВАГ, що відповідає електровідновленню катіонів кобальту(II) має форму перегин.

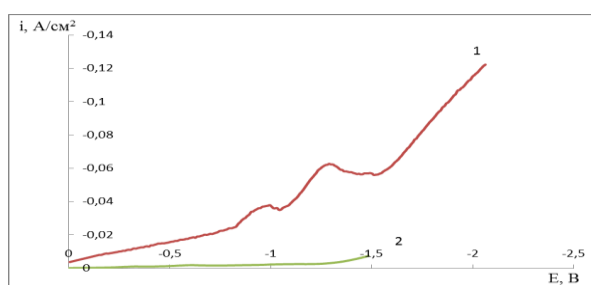


Рисунок 9 – Вольтамперометричні залежності виміряні на мідному катоді в розчинах, що містять 0,1 М CoSO_4 , 0,3 М Na_2SO_4 (1) та 0,3 М Na_2SO_4 (2)

Кінетичні дослідження процесу електровідновлення аквакомплексів кобальту(II) дозволили встановити, що на мідному електроді акрилова кислота проявляє електрохімічну активність, збільшує швидкість процесу електровідновлення катіонів Co^{2+} , запобігає перебігу стадії, внаслідок якої утворюється кобальт(II) гідроксид. Введення до перхлоратного електроліту борної кислоти дещо змінює характер вольтамперних залежностей порівняно з акриловою кислотою, уповільнюючи швидкості катодних процесів. Н ВАГ, виміряній у тетрафлуороборатному електроліті не виявлено піку відновлення катіонів кобальту.

Література

1. Зацинская Ю.И. Электровосстановление катионов кобальта(II) из кислых растворов / Ю.И. Зацинская, А.О.Борщевич. – Матеріали XIV Всеукраїнської конференції молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії. – Дніпропетровськ. – 2016. – С.92.
2. Антипова А.Ю. Электровідновлення катіонів кобальту(II) із перхлоратних розчинів / А.Ю. Антипова, А.О. Борщевич, Л.В. Борщевич, В.Ф. Варгалюк. – Тези доповідей XVI Всеукраїнська наукова конференція молодих вчених та молоді “Наукові розробки молоді на сучасному етапі”, Київ, 27-28 квітня 2017. – С.569-570.

**ФОРМУВАННЯ ТА ДИНАМІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ
ТОНКОПЛІВКОВОЇ СИСТЕМИ $\text{MnO}(\text{OH})/\text{MnO}_2$**

Кучай І. М., Варгалюк В. Ф., Полтавець В. В., Плясовська К. А.

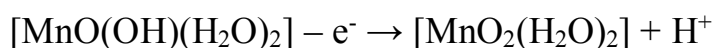
*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, пр.
Гагаріна, 72, м. Дніпро, Україна*

Одним з напрямків розвитку сучасних енергетичних систем є створення високоефективних джерел електричного струму, серед яких особливе місце займають суперконденсатори. Їх конструкція базується на використанні плівок, здатних до накопичення та віддачі великих порцій електричного заряду. Особливу цікавість для дослідників викликають матеріали із застосуванням манган (IV) оксиду, який давно використовується в подібних системах завдяки наявності унікальних властивостей. MnO_2 застосовується і як індивідуальний оксид, так і у якості складової композитних матеріалів. Серед існуючих способів його отримання слід особливо виділити анодне осадження MnO_2 з розчинів солей Mn^{2+} . Найбільш суттєвою перевагою даного методу є можливість виділення тонких, компактних плівок на будь-якій електропровідній поверхні [1].

Нами була розроблена електрохімічна технологія нанесення на будь-яку електропровідну основу тонких шарів органічно-оксидного композиту. Органічною складовою композиту можуть виступати як ацетати, так і акрилати, введені у електроліт.

Діючою речовиною такого покриття є оксидно-гідроксидна сполука тривалентного мангану $[\text{MnO}(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_2]$. Величини стандартних потенціалів більшості реакцій електроокиснення йонів Mn^{2+} у складі різних аквакомплексів або більші від потенціалу електроокиснення води,

або близькі до нього. Тому було доцільно розглянути реакції окиснення аквакомплексів мангану реакційноактивними частинками, які з'являються на аноді внаслідок процесу розкладання води при потенціалах $1 \div 1,2$ В (рН $1 \div 5$). Квантово-хімічне моделювання процесу електроокиснення молекул $[\text{MnO}(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_2]$ дозволило встановити, що реакція



має надзвичайно низький опір, і, відповідно, – високу електропровідність, оскільки в цій системі відсутні структурно-хімічні перетворення. При вилученні електрона з молекули $[\text{MnO}(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_2]$ характеристики зв'язків $\text{Mn}-\text{OH}_2$ залишаються незмінними. Так, між'ядерні відстані центрального атома і атомів кисню молекул води, що мали довжини $1,99$ Å та $2,01$ Å в молекулярній формі, набувають в іонізованій формі величин $1,98$ Å та $1,99$ Å відповідно. Зсув ядер у зв'язках $\text{Mn}-\text{O}$ і $\text{Mn}-\text{OH}$ оксидно-гідроксидного фрагмента $\text{MnO}(\text{OH})$ дещо більше, але не перевищує можливих відхилень за рахунок теплових коливань. Наведене дозволяє твердофазній системі $[\text{MnO}(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_2]/[\text{MnO}_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ забезпечувати швидке циклування електричного заряду практично без втрат на побічні процеси.

Нами була визначена величина заряду повного окиснення/відновлення 1 г реагенту (в розрахунку на $[\text{MnO}(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_2]$) для зразка плівки з питомою масою $0,8$ мг/см². Цей параметр становив $q_m = 103$ Кл/г. Співставлення експериментального значення q_m з теоретичним $q_m^* = nF/Mr = 778$ Кл/г вказує на необхідність збільшення дисперсності реагенту для збільшення поверхні його контакту з матричною плівкою.

У принципі, динамічні характеристики плівки можна суттєво поліпшити за рахунок використання в якості електропровідної основи матеріалу з високорозвиненою поверхнею. Такими перспективними

матеріалами, на нашу думку, можуть виступати графен, вуглетканина тощо. Проведені попередньо досліді показали хорошу механічну якість акрилатних покриттів із вмістом оксигеновмісних сполук Мангану на вуглетканині.

Бібліографічні посилання

1. Полтавец В. В. Диоксид марганца как электродный материал [Текст] / В. В. Полтавец, Е. В. Груздева // Вісник Дніпропетровського університету. Серія Хімія. – 2011. – Т.19, Вип.17. – С. 34 – 38.
2. Полтавец, В. В. Электрохимическое формирование диоксида марганца из уксуснокислого электролита на поверхности нержавеющей стали [Текст] / В. В. Полтавец, В. Ф. Варгалюк // XIV Міжнародна молодіжна науково-практична конференції «Людина і космос», 11-13 квітня 2012 р. – Дніпропетровськ, 2012 р. – С. 407.

СЕКЦІЯ ХАРЧОВА ХІМІЯ ТА СУЧАСНІ ХАРЧОВІ ТЕХНОЛОГІЇ

Керівник: Кондратюк Наталія Вячеславівна, зав. каф. харчових технологій ДНУ, канд. техн. наук, доц.

Секретар: Чернушенко Олена Олександрівна, доц. каф. харчових технологій ДНУ, канд. хім. наук, доц.

ПРОБЛЕМАТИКА ФАЛЬСИФІКАЦІЇ ШОКОЛАДУ ТА ВИРОБІВ З НЬОГО НА УКРАЇНІ

Рудь Є.С., Чернушенко О.О.

*Дніпровський національний університет ім. Олеса Гончара,
пр. Гагаріна 72, м. Дніпро 49010, Україна*

Усі знають шоколад і вживають його у будь-якому вигляді (цукерки, печиво із шоколадом, ізюм і горіхи у шоколаді тощо). Але не кожен знає, що підробити даний вид продукції досить легко. Український ринок наповнений шоколадом вітчизняного і зарубіжного виробництва, щороку поставляється мільйони тон цього продукту, і, на превеликий жаль, дуже часто цей товар є не таким якісним, як зазначається у нормативних і товаросупровідних документах. Проблема полягає в тому, що нещодавно Європа прийняла закон, який дозволяє вводити до шоколадної маси до 5% замінників какао-масла. Український стандарт дозволяє введення таких компонентів до 2 – 3%. З – закордону надходить величезна кількість шоколаду за євронормами, які поки що несумісні з вітчизняними.

Світове виробництво шоколаду та шоколадних виробів складає більше 4 мільйонів тонн, найбільшими їх виробниками і споживачами є США, Великобританія, Франція, Німеччина, Швейцарія і Японія. Споживання шоколаду в Швейцарії складає 13, в США - 6, а в Україні – 2,5-3 кг на душу населення на рік. Найбільш популярним в Україні є шоколад з добавками (горіхи, родзинки), які споживають 44,1% споживачів шоколадної плитки. Наступне місце у рейтингу популярності займає пористий шоколад – 14,8% споживачів. Потім – чистий шоколад без добавок (11,8%). Аналізуючи переваги споживачів щодо вибору типу шоколаду можна простежити певні тенденції: 44,5% споживачів віддають перевагу молочному шоколаду, 33,3% - чорному і 5,7% - білому (див. рис.1).

Переваги споживачів щодо вибору типу шоколаду

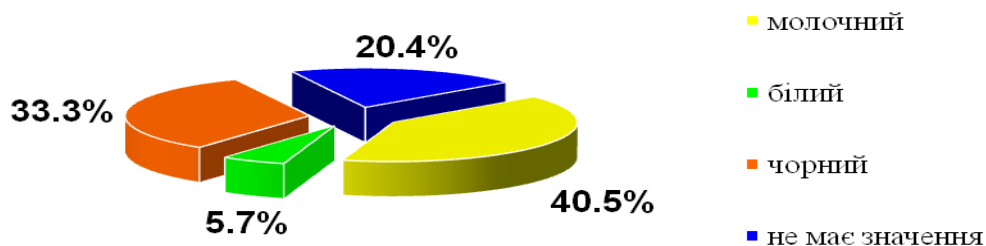


Рис.1. Переваги споживачів щодо вибору типу шоколаду

Проаналізувавши ринок шоколаду в Україні, можна зробити висновок, що постійне зростання обсягів виробництва шоколаду супроводжується збільшенням кількості фальсифікованої продукції. Фальсифікація досягає великих розмірів, удосконалюються способи та методи фальсифікації. Для вирішення питання щодо зниження рівня фальсифікації необхідно посилити контроль за якістю шоколаду.

Підміна одного виду шоколаду іншим - це асортиментна фальсифікація. При якісній фальсифікації у шоколадній масі знижують вміст більш дорогих складових (какао-масла і тертого какао) введенням великих кількостей менш цінних компонентів (сухе і згущене молоко, вершки, родзинки, розтерті горіхи, цукати, подрібнені вафлі і т. п.). Кількісна фальсифікація здійснюється шляхом обману споживача за рахунок значного відхилення параметрів товару - маси, об'єму, довжини. При вартісній фальсифікації реалізують низькоякісні товари за цінами високоякісних. Інформаційна фальсифікація – це спотворення інформації в маркуванні та рекламі, товарно-супровідних документах, підrobка сертифіката якості, митних документів, штрихового коду та ін. Для ідентифікації і визначення фальсифікату потрібно брати органолептичні та фізико-хімічні показники якості шоколаду, які не залежать від рецептури шоколадних виробів і нормуються у ДСТУ 3924-2000. Відрізняють натуральний шоколад від підrobки наступним чином:

- натуральний шоколад ламається з сухим тріском і не тягнеться; на зламі чітко виражається матовість, а у шоколадної плитки поверхня гладка і блискуча, не допускається посивіння шоколаду;

- якщо положити кусочок натурального шоколаду на язик, то він миттєво тане, а при заміні какао-масла жирами цього не відбувається (какао-масло розтає при температурі $+32^{\circ}\text{C}$);

- на вигляд якісний шоколад повинен бути однорідним за кольором, гладким і блискучим;

- якщо у складі компонентів вказані гідрогенізовані та рослинні жири або рослинні масла, то це солодка плитка, а не справжній шоколад;

- натуральний шоколад не повинен містити жодних харчових добавок - підсилювачів смаку та запаху, барвників, емульгаторів тощо;

- якщо в складі продукту вказаний какао-порошок, то це не натуральний шоколад, оскільки какао порошок готується з макухи після віджимання олії з какао бобів.

По існуючому Госту в шоколаді дозволено використання консервантів в розмірі не більше п'яти відсотків від загального складу. При цьому назви консервантів (сорбінова кислота, сорбат кальцію, сорбітол) повинні вказуватися на етикетці повністю. Якщо вони замасковані

загальним словом "добавки", шоколад, скоріш за все, відноситься до фальсифікатів.

Масова реалізація фальсифікованих шоколадних виробів на продовольчих ринках України спричинена відсутністю ефективної системи ринкового нагляду. Боротьба з проблемою фальсифікації повинна проводитись на декількох рівнях: державному (впровадження та дотримання виконання міжнародних та національних стандартів якості; узгодження діючих національних стандартів з міжнародними; накладання адміністративної відповідальності за виробництво фальсифікованої продукції; інформування населення про небезпеку фальсифікованої продукції та методи її ідентифікації), регіональному (моніторинг організаціями з захисту прав споживачів стану продовольчого ринку регіонів), персональному (обізнаність споживачів про можливість фальсифікації; свідомий та відповідальний вибір споживачами продуктів харчування). Якщо робота на та між цими рівнями буде налагоджена, то кількість виробників фальсифікованої продукції в Україні значно зменшиться.

Сьогодні, однією з актуальних проблем на ринку України є визначення та знищення фальсифікації. Має цю проблему і шоколадна галузь України. Тому споживач при виборі шоколаду повинен дотримуватись таких критеріїв вибору: шоколад не повинен містити какао порошок, консервантів, замінників какао-масла; споживне маркування повинне містити чітку, нормального шрифту, інформацію, назва виробу повинна бути оригінальна, не співзвучна з відомими брендами.

XIX Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 17-20 травня 2021 р.

Аніщенко А.О. 22, 38	Курасова Ю.Д. 79	Поджарський М.А. 58, 65
Баланенко А.Д. 6	Кут Д.Ж. 53	Полонський В.А. 73,79
Балог І.М. 53	Кут М.М. 53	Полтавець В. В. 89
Березюк М.О. 22	Кучай І. М. 89	Пустільник С.В. 73
Борисенко І.О. 32	Лагута О.В. 73	Розенбаум Б.Г. 63
Борщевич А.О. 84	Лендєл В.Г. 53	Рудь Є.С. 93
Борщевич Л.В. 84	Луцкевич А. О. 60	
Варгалюк В.Ф. 73, 79, 89	Маторіна К.В. 18	Савченко І.В. 38
Варлан К. Є. 60	Мірошніченко А.А. 84	Салей А.А. 68
Васюкова А.С. 11	Могильна І. О. 6	Сачек К.С. 46
Вишнікін А. Б. 11,22	Мондрусова М. С. 43	Сегеда О.А. 25
Гончаров Т.А. 18	Недоступ В.К. 13	Сидорова Л.П. 25
	Нестеров А. М. 60	Синявський С.В.58
Деркаченко Д. О. 65	Оковитий С.І. 28, 35, 39, 43	Смітюк Н. М. 13
Діль К.В. 35	Онисько М.Ю. 53	Суровцев О.Б. 63
Жук Л. П. 6	Осокін Є.С. 73, 79	Тамен А.-Е. 22
Кирилова Д. В. 28	Пальчиков В.О. 49	Тараненко І.В. 58
Козирєв Є.К. 49	Петух С.І. 68	Ходзіцька О.С. 70
Кольцова Я.І. 68, 70	Пилипенко О. О. 39	Чернушенко О.О. 93
Коптєва С.Д. 46	Плясовська К. А. 89	Чернявська А.Ю. 11
Кудимов В.Д. 68		



WWW.OTAVA.UA

Науково-сервісна фірма
«ОТАВА» спеціалізується
в галузі наукових
досліджень
на замовлення
для українських
і зарубіжних
підприємств.

Основні напрями діяльності
НСФ «ОТАВА»:

- проведення складного наукового хімічного аналізу, аналізу природної та хімічної сировини, наукового біологічного аналізу
- визначення важких металів
- комплексний еколого-гігієнічний експрес-аналіз
- екологічна експертиза при купівлі житла та офісних приміщень
- визначення якості повітря в приміщенні
- вимірювання електромагнітного випромінювання
- розробка хімічних товарів, виробництво товарів автохімії, агрохімії, побутової хімії та різних технічних рідин на замовлення
- виявлення фальсифікатів і підробок
- синтез пептидів та хімічний синтез на замовлення



ОТАВА – колектив професіоналів, які здатні виконати замовлення будь-якого ступеня складності.

Співпрацюючи з нами, Ви отримуєте якість, справедливі ціни та максимально короткі строки виконання замовлення!

Контактна інформація:

Науково-сервісна фірма «ОТАВА»

03680, м. Київ, вул. Акад. Заболотного, 150

Тел.: +38 044 221 72 30

e-mail: info@otava.ua

www.otava.ua