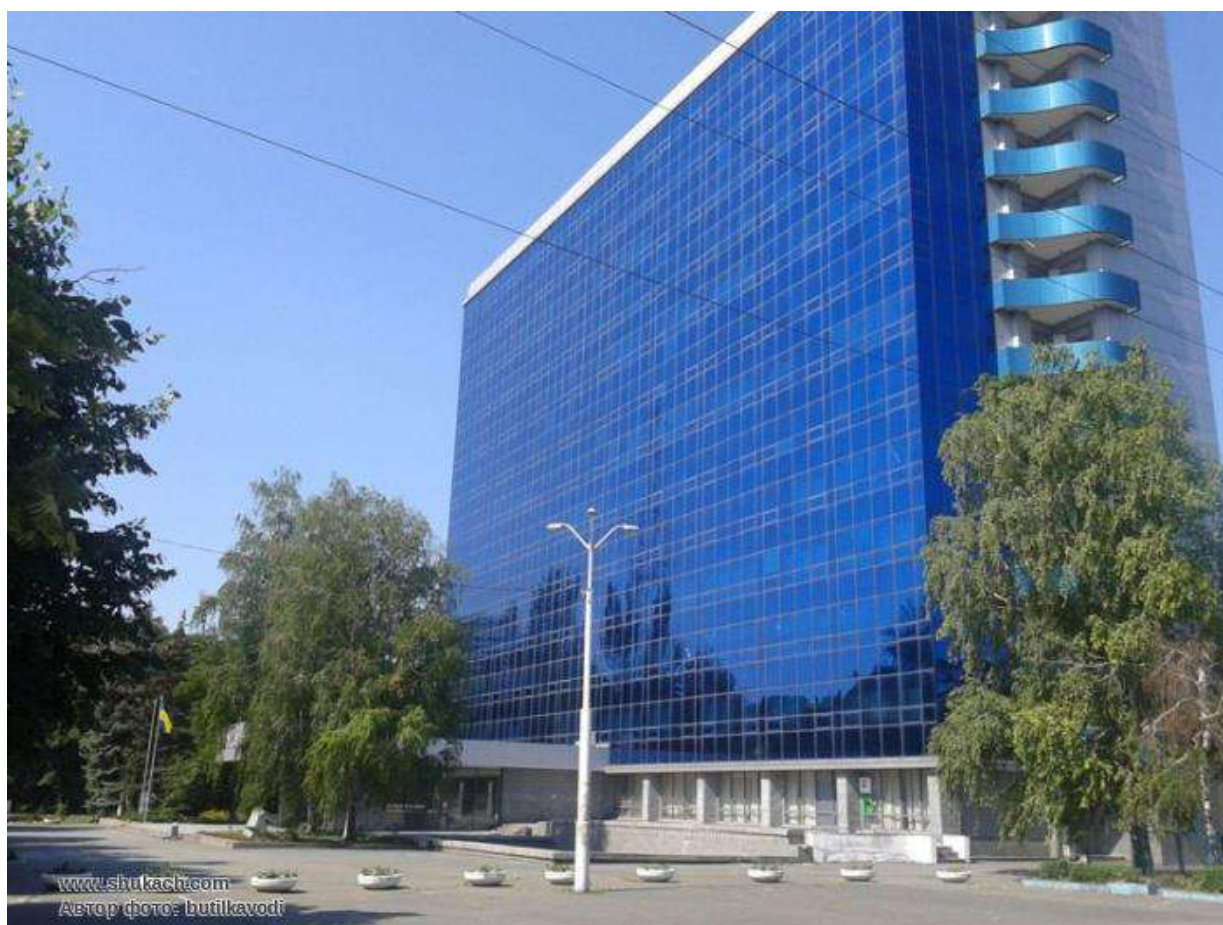


**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДНІПРОПЕТРОВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ОЛЕСЯ ГОНЧАРА**

**Інститут органічної хімії
НАН України**

XV ВСЕУКРАЇНСЬКА КОНФЕРЕНЦІЯ

**молодих вчених та студентів
з актуальних питань сучасної хімії**



МАТЕРІАЛИ КОНФЕРЕНЦІЇ

Дніпро
22-25 травня 2017 р.

XV всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 22-25 травня 2017 р.

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

**Інститут органічної хімії
НАН України**



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

Дніпро
22-25 травня 2017 р.

XV всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 22-25 травня 2017 р.

ПРОГРАМНИЙ ОРГАНІЗАЦІЙНИЙ КОМІТЕТ

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

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

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

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

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

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

Варлан Костянтин Єлисейович, зав. каф. хімії та хімічної технології ВМС ДНУ, к.х.н., доцент

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

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

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

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

Пальчиков Віталій Олександрович, зав. НДІ каф. органічної хімії ДНУ, с.н.с.

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

Маторіна Катерина Вячеславівна, доцент каф. аналітичної хімії ДНУ, к.х.н., доцент

АДРЕСА ОРГКОМІТЕТУ:

Хімічний факультет (16 корпус),

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара

вул. Козакова, 22

Дніпро, 49010, Україна

XV всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 22-25 травня 2017 р.

УДК 54(063)

ББК 24я431

Т 67

ISBN

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара
Інститут органічної хімії НАН України

Голова оргкомітету

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

Т67 «XIV Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії» Дніпро, 2017, - 64 с.

ISBN

УДК 54(063)

ББК 24я431

Т 67

СЕКЦІЯ АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ

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

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

ФІЗИКО-ХІМІЧНІ МЕТОДИ АНАЛІЗУ БЮВЕТНОЇ ВОДИ

Карповець А.В., Савостьонок Д.О., Гончарова І.В.

Київський національний торговельно-економічний університет,

02156, м. Київ, вул. Кіото, 19

e-mail: karpovets.a@mail.ru

Вода у житті людини відіграє важливу роль. Сьогодні в залежності від екологічної ситуації та постійного втручання людини у природу водні ресурси забруднюються шкідливими речовинами, такими як: пестициди, важкі метали, нітрати, нітрити, антиоксиданти, консерванти, ціаніди [1, 2].

Метою роботи було дослідження якості 18 зразків бюветної води Деснянського району м. Києва. Проби бюветної води було проаналізовано за хімічними та фізико-хімічними показниками. Досліди проводили в лабораторіях кафедри товарознавства, управління безпечністю та якістю КНТЕУ при 20° С. Визначали твердість, активну кислотність та вміст заліза в питній бюветній воді згідно з ДСанПіН 2.2.4-171-10 [3].

Для визначення твердості води використовували комплексонометричний метод, який заснований на взаємодії катіонів Ca^{2+} і Mg^{2+} з трилоном Б в аміачному буферному розчині ($\text{pH} = 9,5$) з утворенням внутрішньо-комплексних сполук. За результатами дослідження визначено, що води бюветів по вул. Жукова, 29 та вул. Курчатова, 8-б не відповідають вимогам стандарту 7 ммоль·екв/л.

Активну кислотність бюветної води визначали методом рН-метрії. В дослідних зразках питної води з бюветів активна кислотність знаходилась в межах норми стандарту $\text{pH} = 6,5-8,5$.

Для визначення вмісту заліза застосовували спектрофотометричний метод, який заснований на утворенні червоно-фіолетової комплексної сполуки феруму(III) з сульфосаліциловою кислотою при $\text{pH} = 1,8-2,5$. Кількість заліза практично в усіх зразках бюветної води перевищувала норму 0,2 мг/л, що пов'язано із застарілими металевими трубами.

Отже, фізико-хімічні методи аналізу мають велике значення при дослідженні якості та безпечності питної бюветної води.

Література:

1. Курик М.В. Проблеми якості питної води в Україні / М.В. Курик, Г.М. Семчук, В.Ф. Скубченко // Физическая экология человека. – 2012. – № 2. – С. 45-53.
2. Гончарова І.В. Фератна технологія очищення води природних джерел від нітритів / І.В. Гончарова // Товари і ринки. – 2015. – № 1. – С. 50-59.
3. Державні санітарні норми та правила «Гігієнічні вимоги до води питної, призначеної для споживання людиною»: ДСанПіН 2.2.4-171-10. – К.: Держспоживстандарт України, 2010. – 25 с.

ВПЛИВ КОНЦЕНТРАЦІЇ БАРВНИКА НА СПЕКТРАЛЬНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ СИСТЕМИ БРОМФЕНОЛОВИЙ ЧЕРВОНИЙ– ХІТОЗАН

Прачова М.С., Жук Л. П.

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара

49010, м. Дніпро, пр.. Гагаріна 72

e-mail: prachova@cf.dnu.dp.ua

Спектральні властивості кислотно-основного індикатора бромфенолового червоного (БФЧ) в присутності полісахариду хітозану (ХТ) змінюються в області рН від 3,8 до 7,1, що свідчить про утворення аддуктів.

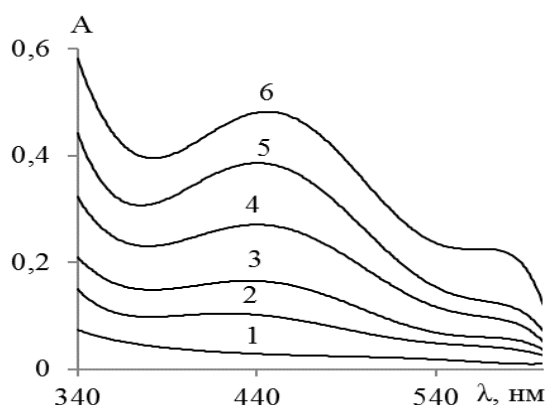


Рис. 1 – Спектри поглинання розчинів БФЧ (1, 2) та БФЧ–ХТ (1', 2') при рН 5,5 і $C_{\text{БФЧ}} \cdot 10^{-7}$, моль/л: 6 (кр. 1, 1'), 8 (кр. 2, 2'). $C_{\text{ХТ}} = 2 \cdot 10^{-6}$ моль/л; СФ – 46; $l = 1,0$ см

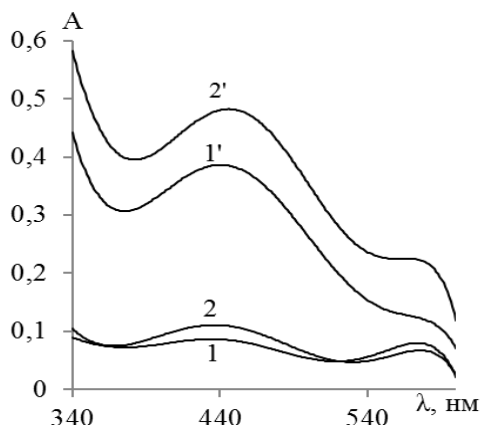


Рис. 2 – Спектри поглинання розчинів БФЧ–ХТ при рН 5,5 і $C_{\text{БФЧ}} \cdot 10^{-7}$, моль/л: 0 (кр. 1), 1 (кр. 2), 2 (кр. 3), 4 (кр. 4), 6 (кр. 5), 8 (кр. 6); $C_{\text{ХТ}} = 2 \cdot 10^{-6}$ моль/л; СФ – 46; $l = 1,0$ см

В спектрах поглинання розчинів БФЧ (рис.1, кр. 1, 2) у присутності хітозану (кр. 1', 2') спостерігається значне зростання оптичної густини збільшенні концентрації барвника: при концентрації БФЧ $6 \cdot 10^{-7}$ моль/л оптична густина порівняно з холостим розчином зростає у 3,5 рази, а з концентрацією $8 \cdot 10^{-7}$ моль/л майже у 5 разів. При цьому в розчинах барвника співставимі інтенсивності поглинання двох іонних форм. Взаємодія з ХТ спочатку відбувається переважно з HR^- формою БФЧ ($\lambda = 440\text{nm}$), та при подальшому зростанні концентрації барвника – з формою R^{2-} ($\lambda = 574\text{nm}$) (рис. 2).

Залежність оптичної густини розчинів БФЧ–ХТ при 440 нм від концентрації барвника лінійна, коефіцієнт кореляції складає 0,997, відхилення від лінійності помітні при 570 нм і починаються при концентрації барвника $8 \cdot 10^{-7}$ моль/л, що імовірно пов'язано з асоціацією часток БФЧ на полімерному ланцюгу між собою і утворення аддуктів різного складу. Отримані результати можуть бути корисними для визначення чистоти компонентів.

ВИЗНАЧЕННЯ СТЕРИНІВ ТА БАРВНИКІВ В ХАРЧОВИХ ПРОДУКТАХ

Волобой А.О., Мінаєва Ю.А., Пльонсак П.П., Сидорова Л.П.
Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,
49010, м. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72
e-mail: Sidorova_LP@i.ua

Запропоновано ідентифікувати рослинні жири в масложировій продукції за газорідинною хроматографічною методикою визначення стеринової фракції. Визначення фальсифікації вершкового масла за складом стеринової фракції (а саме за вмістом рослинних стеринів) є найбільш достовірним методом, який дозволяє виявити добавки масел рослинного походження від 2% і вище. При цьому на хроматограмі фіксують піки фітостеринів (кампастерина, стигмостерина), ці компоненти підтверджують факт фальсифікації.

Визначення стеринової фракції проводили на хроматографі Shimadzu 14В методом ГХ/ПІД на капілярній колонці. Пробопідготовка полягала в лужному гідролізі проби масложирової продукції з наступним екстрагуванням неполярним розчинником домішок, виділення стеринової фракції з неомиляємих речовин методом тонкошарової хроматографії.

Метод похідної спектрофотометрії дозволяє визначати харчові барвники у суміші без попереднього розподілу. Для дослідження був використаний різновид методів похідної спектрофотометрії, а саме метод нульового перетину. Визначення за його допомогою полягає у вимірюванні значення похідної одного компонента при довжині хвилі, при якій похідна другого компонента приймає нульове значення.

Були виміряні спектри розчинів E110 і E124 з концентрацією 10 мкг/мл. та спектр їх суміші у співвідношенні 1:1 з концентрацією обох барвників 10 мкг/мл. Для визначення E124 будували градуїований графік за значеннями його перших похідних при 482нм і 570нм (точка нульового перетину першої похідної спектру поглинання E110). Для визначення E110 - при 370 нм і 507 нм (точки нульового перетину першої похідною спектра E124).

Для визначення вмісту барвників E110 та E102 в суміші без попереднього розподілу використовували метод H-point standard addition method (HPSAM). Визначення за його допомогою полягає у вимірюванні оптичної густини суміші барвників, при якому концентрація одного компоненту є сталою, а іншого змінюється.

Для введення добавки барвника E102 в суміш вибрали довжин хвиль 460 і 510 нм (для першої серії розчинів: E110 – аналіт, E102 – домішковий компонент), а для барвника E110 - 400 і 440 нм (для другої серії розчинів E102 – аналіт, E110 – домішковий компонент). Таким чином була проаналізована модельна суміш барвників E110 та E102.

РОЗРОБКА ЕКСПРЕС-МЕТОДУ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ РУТЕНІЮ(IV) З ВИКОРИСТАННЯМ ІНДИКАТОРНИХ ПЛІВОК

Бондаренко М. А., Худякова С. М.

*Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,
49010, м. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72
e-mail: agatv95@yandex.ru*

Використання сорбентів різної природи в рутинному аналізі в значній мірі обумовлено впровадженням дешевих способів визначення аналіту. Актуальним завданням є розробка нових собційно-аналітичних систем для визначення мікродомішок йонів Рутенію.

У ході дослідження проводили іммобілізацію 3-феніл-2,6-димеркапто-1,4-тіопіроу (PhDT) у отверділий желатиновий шар плівок для офсетного друку із водного розчину з рН 3 за наявності неіоногенної похвехнево-активної речовини ОП-10. За даних умов у розчині домінує молекулярна форма PhDT, при цьому максимум поглинання при 455 нм на спектрі плівки з іммобілізованим реагентом зміщений батохромно на 20 нм у порівнянні зі спектром водного розчину. Зміщення λ_{max} є доказом взаємодії PhDT з середовищем желатинового гелю. Оптимальний час іммобілізації PhDT складає 90 хв, при цьому плівки набували рівномірного забарвлення у жовтий колір та були прозорими. За результатами спектрофотометричних вимірювань та з урахуванням матеріального балансу розраховано сорбційну ємність за PhDT для однієї індикаторної плівки (ІІІ) розміром (2.5×3) см, що складає 1,4 нмоль.

Для визначення йонів Ru(IV) за допомогою отриманої ІІІ враховували літературні зведення щодо оптимальної кислотності взаємодії даного йону з похідними димеркаптотіопіроу (DT), оскільки зазвичай інтервали кислотності у разі проведення реакції в розчинах та у фазі сорбентів можуть співпадати. Відомо, що у разі алкілпохідного DT у кислому середовищі перебігає процес відновлення Ru(IV) до Ru(III). До початку нашого дослідження в літературі не було описано особливості взаємодії Ru(IV) з PhDT. Встановлено, що у сильно кислому хлоридному середовищі (1–6 М HCl) між реагентами відсутній окисно-відновний процес. При цьому можливе утворення комплексу або іонного асоціату з молярним співвідношенням Ru(IV) : PhDT = 1:1, зважаючи на хімічні форми існування Ru(IV) та PhDT, що встановлено спектрофотометрично та амперометрично. Після контакту з розчинами Ru(IV) ІІІ змінювали своє забарвлення. Відповідні зміни відмічали за результатами вимірювання світлопоглинання таких ІІІ.

Отримані результати показали перспективність подальшого дослідження, що можуть бути покладені в основу розробки чутливого експрес-методу для визначення мікродомішок Ru(IV) у розчинах.

**СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ВЗАЄМОДІЇ
3-ФЕНІЛ-2,6-ДИМЕРКАПТОТІОПІРОНУ
З КОКОАМІНОПРОПІЛ БЕТАЇНОМ У ВОДНИХ РОЗЧИНАХ**

Дорошенко В.С., Худякова С.М.

*Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,
49010, м. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72
e-mail: viktoriya.doroshenko@i.ua*

Похідні димеркаптотіопірону (ДТ) відомі своїми комплексоутворювальними властивостями по відношенню до ряду кольорових та благородних металів (БМ), а у деяких випадках в реакціях домінує окисно-відновний процес. ДТ є ефективними модифікаторами матриць різної природи, у тому числі і за наявності поверхнево активних речовин (ПАР), наприклад, неіонної – ОП-7 або ОП-10. В аналітичній практиці ПАР використовують для модифікації хіміко-аналітичних властивостей органічних реагентів (ОР). Отримання іонних асоціатів – один із головних шляхів модифікації електронегативних або електропозитивних ОР іонами ПАР протилежного заряду. Таким чином, метою роботи є спектрофотометричне дослідження взаємодії 3-феніл-2,6-димеркапто-1,4-тіопірону (ФДТ) з кокаамінопропілбетаїном (КАПБ).

ФДТ у лужному середовищі існує переважно у двічідепротонованій водорозчинній формі, а у кислому ($\text{pH} < 1$) – у вигляді малорозчинної піронієвої солі, наприклад, у хлоридному середовищі – складу $\text{H}_3\text{L}^+\text{Cl}^-$. У разі суміші ФДТ з КАПБ (цвіттеріонною ПАР) за умов 0.25 М HCl було отримано розчин червоно-коричневого кольору, на відміну від жовтого розчину ФДТ за наявності ОП-10. Спектр світлопоглинання розчину останньої системи містить максимум при 350 нм, який згідно літературних даних відповідає максимуму світлопоглинання протонованих частинок ФДТ, солюбілізованих у міцелах ПАР. На спектрі суміші ФДТ з КАПБ наявні два інтенсивні максимуми при 450 нм та 480 нм, які частково перекриваються, що може свідчити про певну взаємодію компонентів у сильнокислому середовищі. За кривими насичення визначено молярне співвідношення ФДТ до КАПБ у певному аддукті, ймовірно, іонному асоціаті, яке складає 1:2. У разі збільшення pH від 2 до 8 спектри таких розчинів схожі за характером зі спектрами сумішей ФДТ з ОП-10. В останньому випадку при досягненні pH 6 наявність на спектрі нової смуги з максимумом при 380 нм свідчить про появу у розчині двічідепротонованої форми ФДТ і відсутність її взаємодії з КАПБ.

Отримані результати показали перспективність подальшого дослідження модифікуючого впливу КАПБ на ДТ та можуть бути покладені в основу розробки сорбційно-аналітичних систем на основі матриць різної природи для концентрування мікродомішок БМ.

**ОСОБЕННОСТИ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ
ПИРОКАТЕХИНОВОГО ФИОЛЕТОВОГО С Mo(VI) И W(VI)**

Дубовый В.П., Бевзюк Е.В., Снигур Д.В., Чеботарёв А.Н.

Одесский национальный университет имени И.И. Мечникова

65082, г. Одесса, ул. Дворянская, 2

e-mail: denis270892@yandex.ru

Одной из важных задач химического анализа представляется контроль над содержанием тяжелых металлов в объектах различной природы. Интерес вызывают поливалентные металлы, такие как вольфрам и, особенно, молибден. Последний является эссенциальным и важным микроэлементом, который способен накапливаться в растениях и некоторых организмах. Основным методом определения молибдена(VI) является спектрофотометрия в виде его комплексов с органическими аналитическими реагентами. Однако, данные об оптимальных условиях комплексообразования и соответствующих химико-аналитических характеристиках разрознены и противоречивы. Таким образом, данная работа посвящена изучению и оптимизации условий взаимодействия молибдена(VI) и вольфрама(VI) с пирокатехиновым фиолетовым (ПКФ).

Комплексообразование ПКФ с Mo(VI) и W(VI) протекает в диапазоне кислотности pH 1÷4 ($pH_{\text{опт}}$ 1.5 и 1.1 соответственно). Определен состав комплексов Mo(VI) и W(VI) с ПКФ в двойных системах (1:1) и вычислены молярные коэффициенты светопоглощения ($\epsilon_{550} = 14000$ и $\epsilon_{555} = 15000$ соответственно). В присутствии бромида цетилпиридиния (ЦПBr) наблюдается bathochromный сдвиг полос поглощения комплексов, что связано с образованием ионных ассоциатов. Максимальный выход окрашенных продуктов в тройных системах наблюдается при pH 4.3 для Mo(VI) и pH 4.0 для W(VI). Соотношение компонентов в тройных системах «Mo(VI)/ W(VI)-ПКФ-ЦПBr» = 1:1:2. На основании совокупности спектрофотометрических данных установлен химизм комплексообразования Mo(VI) и W(VI) с ПКФ. В двойных и тройных системах координирующими частицами являются катионы $MoO_2(OH)^+$ и $WO_2(OH)^+$, а ПКФ вступает в реакцию в диссоциированной по сульфогруппе форме. В тройных системах катион цетилпиридиния участвует в образовании ионных ассоциатов за счет электростатического взаимодействия катионов цетилпиридиния с сульфо- и гидроксо-группами реагента. Рассчитаны молярные коэффициенты светопоглощения ионных ассоциатов «Mo(VI)-ПКФ-ЦПBr» и «W(VI)-ПКФ-ЦПBr» величины которых равны $\epsilon_{670} = 57000$ и $\epsilon_{670} = 61000$, а закон Бера соблюдается в диапазоне концентраций 0.3-25 мкг/мл и 0.2-23 мкг/мл соответственно.

**ВПЛИВ ЛАУРИЛСУЛЬФАТУ НАТРІЮ НА ОПТИЧНІ
ХАРАКТЕРИСТИКИ 3-ФЕНІЛ-2,6-ДИМЕРКАПТО-1,4-ТІОПІРОНУ
У ВОДНИХ РОЗЧИНАХ**

Швиденко А.Р., Худякова С.М.

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,

49010, м. Дніпро, пр. Гагаріна, 72

e-mail: shvydenko@cf.dnu.dp.ua

Розвиток наукового напрямку, пов'язаного з дослідженням та застосуванням поверхнево-активних речовин (ПАР) у хімічному аналізі є актуальним, що обумовлено їх унікальними властивостями: вони можуть виступати як у якості противойонів, так і у вигляді середовища. При цьому ПАР змінюють властивості реактантів, зокрема вихідних органічних реагентів (ОР): оптичні та сорбційні характеристики, таутомерні рівноваги, протолітичні або окисно-відновні властивості. На даний час відсутні літературні зведення щодо систематичного дослідження впливу колоїдних ПАР різної природи на поведінку похідних димеркаптотіопірону (ДТ), а також на характер протікання аналітичних реакцій за їх участі, у тому числі твердофазних. В останньому випадку виявлення певних закономірностей є доцільним, оскільки ДТ є перспективними для створення ефективних сорбційно-аналітичних систем. При цьому для отримання стабільного та оптимального аналітичного сигналу виникає необхідність у розробці певних підходів для забезпечення модифікуючого впливу ДТ. Мета дослідження – встановлення закономірностей впливу середовища лаурилсульфату натрію (ЛС) на оптичні характеристики водних розчинів 3-феніл-2,6-димеркапто-1,4-тіопірону (ФДТ) як модифікатора матриць для тест-визначення БМ.

Отримано абсорбційні спектри ФДТ у передміцелярних розчинах ЛС за умов однакової концентрації ФДТ та різної кислотності, відмічено їх особливості. Так, в інтервалі рН 2–4 наявний максимум світлопоглинання при 430 нм, як і у разі наявності нейоногенної ПАР – препарату ОП-7 або ОП-10. Однак, на фоні 0.5–4 М HCl спектри розчинів ФДТ суттєво відрізняються. У разі ОП-10 смуга світлопоглинання містить максимум при 350 нм, що відповідає позитивно зарядженим частинкам протонованої форми ФДТ, при цьому відсутній максимум у видимій області спектру. У випадку ЛС відсутній максимум при 350 нм, але наявний максимум при 415–420 нм, що зсунутий гіпсохромно на 10–15 нм в залежності від різного вмісту ЛС у разі однакової концентрації ФДТ та є менш інтенсивним, у порівнянні зі спектрами систем при рН 2–4. Спектрофотометрично та амперометрично за точками перегинів на кривих «насичення» та титрування ЛС розчином ФДТ відповідно на фоні 2 М HCl встановлено молярне співвідношення компонентів 1:1 у йонному асоціаті, утворення якого можливе, зважаючи на протилежно заряджені частинки реактантів.

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ БРОМФЕНОЛОВОГО СИНЬОГО У ПРИСУТНОСТІ ПОЛІАКРИЛАМІДНИХ ФЛОКУЛЯНТІВ

Петренко А.І., Чернявська А.Ю., Іваниця Л.О.

Дніпропетровський національний університет імені О. Гончара

49010, м. Дніпро, пр. Гагаріна, 72

e-mail: anna-chernyavska@mail.ru

Для удосконалення технології очищення води використовуються водорозчинні високомолекулярні сполуки, серед яких найбільш поширеними і універсальними є поліакриламідні флокулянти. Застосування синтетичних водорозчинних флокулянтів може бути пов'язане з додатковим забрудненням води хімічними речовинами (мономери, продукти окислення киснем води, а також взаємодії безпосередньо з забруднювачами), що володіють небезпечними токсичними і канцерогенними властивостями. Більшість флокулянтів є помірно токсичними, залишковий вміст цих речовин у питній воді не повинен перевищувати ГДК (в природних водах – на рівні 0,01 мг/дм³, а в питній воді – на рівні 0,1 – 0,4 мг/дм³). Тому визначення кількості флокулянтів у воді є актуальною задачею. Взаємодія органічних барвників з протилежно зарядженими водорозчинними полімерами використовується для надійного контролю вмісту останніх.

У роботі дослідили властивості бромфенолового синього (БФС) у середовищі, створеному введенням катіонного флокулянту поліакриламідного типу FO 4650 (густина заряду і молекулярна маса полімеру складають 55% і 4·10⁶ г/моль, відповідно). При виборі аніонного реагенту керувалися кислотно-основними властивостями барвника (існуванням у широкому інтервалі рН моноаніонної форми) та відсутністю побічних взаємодій з іонами більшості металів.

Модифікуючу дію полімерного флокулянту FO 4650 порівнювали з аналітичними ефектами, що виникають у організованому середовищі, створеному цетилпіридиній хлоридом (ЦПХ). Встановлено, що введення FO 4650 приводить до зміщення $\lambda_{\max}$ моноаніонної форми БФС на 10 нм у довгохвильову область, у обох випадках зсувається рН_{1/2} у кислу область. Константи стійкості (K_{ст}) асоціатів БФС–модифікатор та молярні коефіцієнти світлопоглинання (ϵ) вищі у разі використання FO 4650.

Таблиця. Спектрофотометричні та протолітичні властивості БФС у присутності катіонних модифікаторів різної природи

Модифікатор (С, мг/л)	$\lambda_{\max}$, нм ($\Delta\lambda$, нм)*	$\epsilon \cdot 10^{-4}$, (л/моль см)	рН _{1/2} (Δ рН _{1/2})*	K _{ст}
FO 4650 (17,5)	600 (10)	2,76	3,54 (0,58)	1,31·10 ¹⁰
ЦПХ (1,8)	600 (10)	1,80	3,84 (0,28)	6,17·10 ⁵

* $\Delta\lambda = \lambda_{\max}(\text{БФС} + \text{модифікатор}) - \lambda_{\max}(\text{БФС})$; Δ рН_{1/2} = рК_{БФС} – рН_{1/2}(БФС + модифікатор)

ОДНОЧАСНЕ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ СУМІШІ ХАРЧОВИХ БАРВНИКІВ

Шкутенко Ю.В., Сидорова Л.П.

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

e-mail: Sidorova_LP@i.ua

Метод похідної спектрофотометрії дозволяє визначати харчові барвники у суміші без попереднього розподілу. Для дослідження був використаний різновид методів похідної спектрофотометрії, а саме метод нульового перетину. Визначення за його допомогою полягає у вимірюванні значення похідної одного компонента при довжині хвилі, при якій похідна другого компонента приймає нульове значення.

Для спектрофотометричного визначення суміші харчових барвників використовували E110 з концентрацією 12 мг/мл та E102 – 6 мг/мл, вимірювали оптичну густину в діапазоні хвиль 350–520 нм (рис.1).

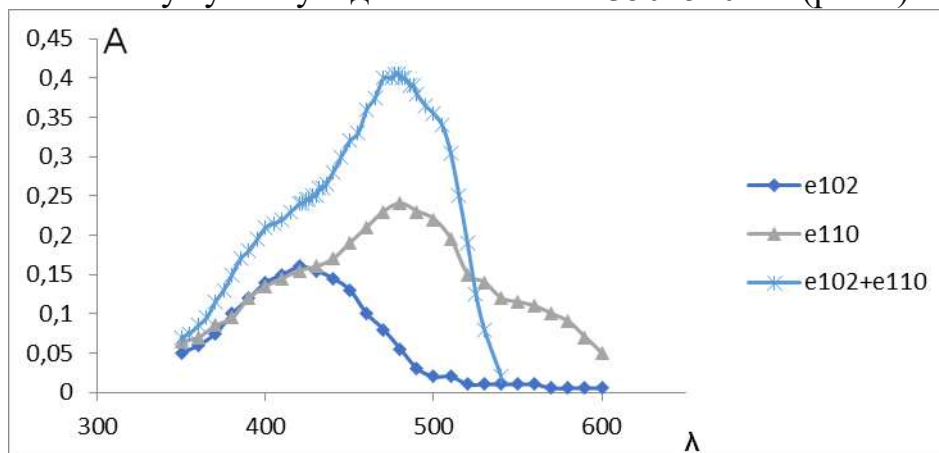


Рисунок 1. Спектри поглинання барвників E110 та E102, та їх суміші.

Для визначення E102 будували градуїований графік за значеннями його перших похідних при 483 нм (точка нульового перетину першої похідної спектру поглинання E110). Для визначення E110 - при 427 нм і 538 нм (точки нульового перетину першої похідною спектра E102). Рівняння градуїованих характеристик, діапазон лінійності і коефіцієнт регресії представлені в таблиці 1. Отримані рівняння і коефіцієнти регресії свідчать, про лінійність на вибраному інтервалі концентрацій барвників.

Таблиця 1. – Рівняння градуїованих залежностей для E110 і E102

Довжина хвилі, нм	Рівняння	Коефіцієнт регресії	Діапазон, мкг/мл
483	$y = 0,0011x + 0,0008$	$R^2 = 0,9925$	2-14
427	$y = 0,0003x + 0,0007$	$R^2 = 0,9864$	2-14
538	$y = 0,0009x - 0,0014$	$R^2 = 0,9731$	2-14

ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ЦІАНОКОБАЛАМІНУ

Кулик Є.Ю., Маторіна К.В.

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

Джерелом вітамінів для організму людини переважно є харчові продукти, але за певних умов можливим є розвиток авітамінозу та гіповітамінозу. Одним зі шляхів подолання яких є певна дієта та прийом вітамінних препаратів. Вітамін В₁₂ (ціанокобаламін) впливає на обмін білків та нуклеїнових кислот, необхідний для процесу кровотворення, функціонування нервової системи, утворення епітеліальних клітин, росту та процесів регенерації. При його недостатності виникає мегабластна анемія. Добова потреба складає 0,002 мг. Актуальною проблемою сучасної аналітичної хімії залишається контроль якості лікарських засобів та розробка простих та чутливих методик визначення фармацевтично важливих речовин. Ці потреби задовольняє напрямок з розробки йон-селективних електродів, чутливих до йонів органічної та неорганічної природи, у тому числі макромолекул полімерів.

Виготовлені пластифіковані мембранні електроди (матриця – полівінілхлорид, розчинник – циклогексанон, пластифікатор – дибутилфталат) та твердоконтактний електрод типу «покриту дріт» (підложка – медична сталева голка). У якості ЕАР використовували асоціати ціанокобаламіну (ЦК) з аніонним барвником магнезоном (МГ), а також осади, утворенні при додаванні молібдофосфорної кислоти (МФК) до розчину ЦК. У якості оптимального внутрішнього розчину для електродів обрано розчин ЦК з $C=7,5 \cdot 10^{-5}$ М, приготований на фоні 1 М розчину KSCN. Порівняльна характеристика сконструйованих електродів наведена у таблиці 1.

Таблиця 1 – Електродно-аналітичні характеристики електродів, оборотних до ціанокобаламіну

Тип електроду	ЕАР	pC	S, мВ/рС	Час відгуку, хв	C _{min} , моль/л
Мембранний	МГ-ЦК	4,0-7,0	40	3	$1,0 \cdot 10^{-7}$
	МФК-ЦК	4,0-6,0	59	3	$1,0 \cdot 10^{-6}$
Твердотільний	МФК-ЦК	4,0-6,0	59	2	$1,0 \cdot 10^{-6}$

Розроблені сенсори, оборотні до вітаміну В₁₂, були апробовані на реальних об'єктах: розчин для ін'єкцій «Ціанокобаламін» $((3,70 \pm 0,09) \cdot 10^{-4}$ моль/л); таблетована форма вітаміну В₁₂ «Sundown Naturals» $((2,40 \pm 0,04) \cdot 10^{-5}$ моль/л), таблетована суміш вітамінів В₁-В₆-В₁₂ «Неуробекс-Форте» $((2,21 \pm 0,07) \cdot 10^{-7}$ моль/л), відносне стандартне відхилення не перевищує 6%.

**ВИЗНАЧЕННЯ ФЛОКУЛЯНТІВ ТИПУ ФО З
НІТРОФЕНІЛФЛУОРОНОМ ТА КУПРУМОМ(II)**

Заболотна Н.І., Чернявська А.Ю.; Іваниця Л.О.

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,

49010, м. Дніпро, пр. Гагаріна, 72

e-mail: nata.zabik@gmail.com

Для водопідготовки та підвищення ефективності процесу очистки стічних вод, зниження операційних витрат використовують катіонні флокулянти типу ФО, що мають різні молекулярні маси та густину заряду ($\Gamma DK=2$ мг/л).

Для усунення стехіометричних комплексів, що виникають внаслідок користування полікатіонів з високою густиною заряду, запропоновано вводити іон металу як третій компонент, що утворює стійкий комплекс з органічним реагентом та підвищує чутливість та селективність визначення. Спектрофотометричні методики використовуються для визначення багатьох полімерів, але для флокулянтів серії ФО подібні методики не описані.

У роботі нами досліджене утворення комплексів купрум(II) з о-нітрофенілфлуороном (о-НФФ) та катіонними флокулянтами поліакриламідного типу ФО с різною молярною масою та густиною заряду ($M_r \cdot 10^6$; густина заряду): FO4650 (4; 55%), FO4400 (4; 30%), FO4700 (4; 70%), FO4990 SH (8; 95%).

Дослідженню подвійну систему Cu(II)-о-НФФ та потрійну систему Cu(II)-о-НФФ-ФО при рН 5. При введенні флокулянтів ФО відбувається зміна аналітичних властивостей комплексу Cu(II) з о-НФФ, що супроводжується батохромним зміщенням максимума світлопоглинання з 560 нм до 600 нм ($\Delta\lambda=40$ нм) та гіперхромним ефектом.

Підібрані оптимальні умови спектрофотометричного визначення флокулянтів ФО не залежно від густини заряду у модельних водних розчинах за допомогою усередненого градувального графіка методом «введено-знайдено». Результати представлені у таблиці.

Таблиця. Результати визначення флокулянтів ФО методом «введено-знайдено» за усередненим градувальним графіком ($n=4$, $P=0,95$)

Марка флокулянта	Введено, мг/л	Знайдено, мг/л	S_r	Похибка визначення, %
FO 4400	1,6	$1,63 \pm 0,02$	0,007	1,9
FO 4650		$1,41 \pm 0,12$	0,047	11,9

Похибка визначення флокулянтів ФО з різною густиною становить не більше 11,9%.

ЕЛЕКТРОДНО-АНАЛІТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ МЕМБРАН, ЧУТЛИВИХ ДО ПОЛІВІНІЛПІРОЛІДОНУ ТА ІОНІВ ЦИНКУ

Гордон А. В., Маторіна К. В.

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

Потенціометричні сенсори мають багато чисельні переваги у порівнянні з традиційними методами аналізу, забезпечують точність, відтворюваність, швидке та селективне визначення різноманітних іонів та молекул органічної та неорганічної природи, дозволяють проводити неdestructивний on-line моніторинг певного виду часток у малому об'ємі зразку без попередньої пробопідготовки. При формуванні супрамолекулярних ансамблів для нових сенсорів особливо важливими є оптимізація комбінації компонентів мембрани, зміна якої дозволяє отримати багатокомпонентні системи з унікальними транспортними властивостями відносно широкого кола часток. Потрійні металополімерні комплекси (ПМПК) є цікавими аналітичними формами, хіміко-аналітичні характеристики яких дозволяють їх успішно використовувати, як у спектрофотометрії, так й іонометрії.

Мета роботи – створення пластифікованого сенсору для одночасного визначення полівінілпіролідону ($M_r=8 \cdot 10^3$, ПВПД) та іонів цинку (II) з ЕАР – ПМПК (еріохром чорний Т – ПВПД - Zn (II)). Як альтернативну ЕАР використовували осади, отриманні при взаємодії ПВПД з молібдофосфорною кислотою (МФК) (табл. 1). У якості оптимального внутрішнього розчину для електродів обрано розчини Zn (II) або ПВПД з $C=5 \cdot 10^{-4}$ моль/л, час кондиціонування -1 доба. Крутизна електродної функції відповідає, а іноді й перевищує теоретичне значення Нернстівської функції, межа виявлення досягає $n \cdot 10^{-6}$ моль/л. Отримані електродно-аналітичні характеристики сконструйованих сенсорів свідчать про можливість їхнього ефективного застосування як індикаторних електродів

Таблиця 1

Хіміко – аналітичні характеристики синтезованих мембран, чутливих до ПВПД та іонів Zn (II)

ЕАР	Визначуваний компонент	pH	pC	S, мВ/pC	Час відгуку, хв	C_{min} , М
ПМПК	Zn (II)	8,0-8,5	3,3 –5,3	31	2	$7 \cdot 10^{-6}$
ПМПК	ПВПД	8,0-8,5	3,0–5,0	22	3	$9 \cdot 10^{-6}$
ПВПД–МФК	ПВПД	4,0-5,0	3,3–5,3	28	3	$7 \cdot 10^{-6}$

Отримані результати можуть бути використані для визначення Zn(II) та ПВПД у водних розчинах, екстрактах та рідких формах лікарських препаратів («Неогемодез», «Медіхронал»; краплях для очей «Цинк сульфат», таблетованих формах «Цинктерал», «Цинковітал»).

ХІМІКО-АНАЛІТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ СИСТЕМ ДИКЛОФЕНАК НАТРІЮ – КАТІОННИЙ БАРВНИК

Чернопольська Ю. А., Маторіна К. В.

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

Контроль якості лікарських препаратів є одним із основних завдань сучасної аналітичної практики. Актуальною задачею залишається розробка методик аналізу, які дозволяють проводити експресне визначення діючої речовини, визначення фальсифікованої, некодифікованої та простроченої фармацевтичної продукції без попередніх довготривалих стадій пропідготовки. На жаль, методики, які затверджені Державною Фармакопеею України, такими властивостями не володіють. Для визначення диклофенаку натрію (ДК) відомі гравіметричні, потенціометричні, хроматографічні, флуориметричні та спектрофотометричні методи.

Метою даної роботи є встановлення хіміко-аналітичних властивостей систем ДК-катіонний барвник та їх використання в аналізі. Методом спектрофотометрії у видимій області спектру встановлено утворення асоціатів ДК з такими катіонними барвниками, як: метиленовий синій (МС), метиленовий зелений (МЗ), метиленовий фіолетовий (МФ) та сафранін Т (СТ).

За найкращі аналітичні форми вибрані асоціати ДК з МЗ та МС. Для встановлення оптимальних умов утворення іонних асоціатів ДК з катіонними барвниками досліджували вплив кислотності середовища, концентрації барвника та ДК, час утворення асоціатів. Визначені оптимальні умови утворення асоціатів: 1) для асоціату ДК-МЗ - $C(\text{ДК})=10^{-5}$ М, $C(\text{МЗ})=2 \cdot 10^{-5}$ М, $\lambda=605$ нм, рН 2,0-5,1 ($\epsilon=2,3 \cdot 10^3$); 2) для асоціату ДК-МС - $C(\text{ДК})=10^{-5}$ М, $C(\text{МЗ})=2 \cdot 10^{-5}$ М, $\lambda=680$ нм, рН 2,0-6,0 ($\epsilon=5,2 \cdot 10^3$). Час утворення вищезазначених асоціатів не перевищує 5 хвилин. Спектральні характеристики пропонуємих аналітичних форм для визначення ДК у водних розчинах не змінні протягом 8 годин (оптична густина розчинів змінюється не більше, як на 0,6 – 1,0 %).

Отримані дані дозволяють розробити нову ефективну методику спектрофотометричного визначення ДК у розчинах для ін'єкцій «Диклак», «Вольтарен», «Диклобер» за допомогою іонних асоціатів з катіонними барвниками МЗ та МС.

НОВИЙ МЕТОД ГОМОГЕННОЇ МІКРОЕКСТРАКЦІЇ

Кабашна К.В., Заруба С.В., Вишнікін А.Б.

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

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

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

В даній роботі запропоновано новий флотаційно-мікроекстракційний метод. Він ґрунтується на екстракційному вилученні аналітів з використанням як екстрагентів жирних кислот. У якості основного екстрагенту було обрано пеларгонову кислоту. З застосуванням кислот можна легко реалізувати принципи гомогенної мікроекстракції. Показано, що при додаванні розчину аміаку або лугу пеларгонова кислота переходить у гомогенний розчин у вигляді солі, а при додаванні кислоти знову утворюється двофазна система. Також ця сполука має сприятливу температура плавлення і при заморожуванні утворює тверду фазу, яку легко відокремити. Водночас виявилося, що карбонові кислоти погано екстрагують більшість комплексних сполук. Тому можна сподіватися на високу селективність таких методик.

Знайдено, що досягти повного вилучення можна з використанням утворення малорозчинних сполук, які утворюються між катіонними комплексами та гетерополіаніонами. Як приклад розроблено методику визначення заліза. При додаванні фенантроліну і за необхідності відновника залізо(II) утворює комплексну сполуку червоного кольору. Ступінь екстракції цього комплексу суттєво нижче за 100%. При додаванні 12-молфібдофосфорної кислоти на межі розподілу фаз утворюється плівка іонного асоціату. Для переведення у гомогенну фазу запропоновано додавати етиловий спирт. Показано, що навіть при високому співвідношенні об'ємів водної та органічної фази досягається ефективне концентрування. Флотація до цих пір не застосовувалася в мікроекстракції у вказаному варіанті. Ми вважаємо, що флотація може виявитися більш ефективним способом концентрування, в якому буде досягатися ефективне повне вилучення аналіту при дотриманні високого коефіцієнту концентрування. На даний час детектування відбувається методом спектрофотометрії. Планується використання атомно-абсорбційної спектроскопії у полуменовому або електротермічному варіантах.

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ МАГНЕЗОНУ ХС В ПРИСУТНОСТІ ПОЛІВІНІЛОВОГО СПИРТУ

Ляшенко Ю.Ю., Жук Л.П.

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара

49010 м. Дніпро, пр. Гагаріна, 72

e-mail: yulyalyashenko2013@yandex.ua

Широке застосування полівінілового спирту (ПВС) в різних галузях промисловості та медицини, його роль «захисного колоїду» в аналітичних методиках потребує детального вивчення.

Показано зміну спектральних властивостей металохромного азореагента магнезону ХС (МГ) в присутності ПВС в широкому інтервалі кислотності середовища (рис. 1, 2). В спектрах поглинання наявні незначні батохромні зсуви максимумів смуг поглинання супроводжуються дворазовим зменшенням оптичної густини в кислому і нейтральному середовищі (рис. 1, кр. 1', 2') та триразовим її зростанням в лужному середовищі (кр. 3').

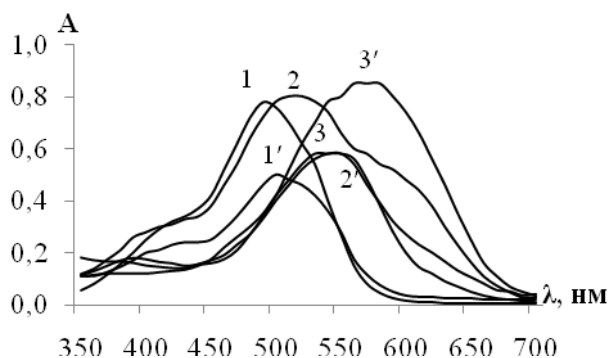


Рис. 1 – Спектри поглинання розчинів магнезону ХС у відсутності (1,2,3) та присутності ПВС (1',2',3') при рН: 4,0 (1,1'), 8,0 (2,2') та 11 (3,3'). $C_{\text{МГ}}=4 \cdot 10^{-5}$ моль/л; $C_{\text{ПВС}}=0,02\%$. СФ-26; $l=1$ см

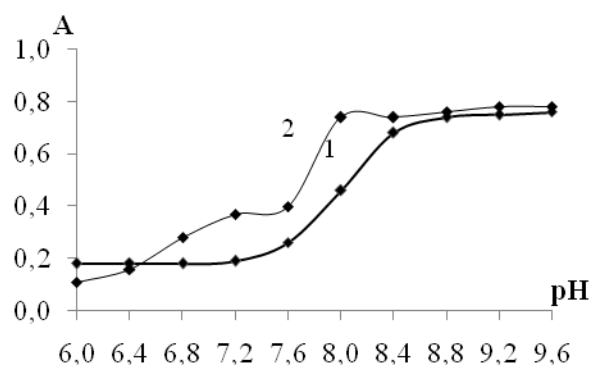


Рис. 2 – Залежність оптичної густини розчинів МГ (1) та МГ-ПВС (2) від рН при λ : 520 (1) та 565 (2) нм $C_{\text{МГ}} = 4 \cdot 10^{-5}$ моль/л; $C_{\text{ПВС}} = 0,02\%$. СФ-26; $l=1$ см

Рівновага, яка встановлюється в розчинах барвника в інтервалі рН від 4 до 8, описується рівнянням $\text{H}_2\text{R}^- \leftrightarrow \text{H}^+ + \text{HR}^{2-}$. В присутності ПВС (рис. 2, кр. 2) фіксується наявність двох рівноваг, імовірно пов'язаних з вибіркоким зв'язуванням поліелектроліту з таутомерними формами барвника. Зазначені зміни свідчать про взаємодію ПВС з магнезоном ХС і утворення аддуктів в інтервалі рН від 3 до 11. Утворювані аддукти можуть впливати на результати аналізів, проте можуть бути використані як аналітичні форми для визначення кількісного вмісту ПВС в реальних об'єктах.

ДОСЛІДЖЕННЯ СИСТЕМИ БРОМФЕНОЛОВИЙ ЧЕРВОНИЙ – PURO FLOCK 920 ПРИ ЗМІННІЙ КОНЦЕНТРАЦІЇ БАРВНИКА

Алхімова М.М., Жук Л.П.

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара

49010, м. Дніпро, пр. Гагаріна, 72

e-mail: alkhimova2011@yandex.ru

Для ефективного застосування аналітичних реагентів важливо враховувати вплив усіх компонентів. Спектрофотометрично вивчена поведінка системи бромфеноловий червоний (БФЧ)-Puro Flock 920 (PF 920) при зміні концентрації барвника. При рН 5,5 барвник існує в двох іонних формах (HR^- , $\lambda=440\text{нм}$ та R^{2-} , $\lambda=574\text{нм}$). Збільшення концентрації барвника супроводжується пропорційним зростанням короткохвильового максимуму та батохромним зсувом довгохвильового максимуму (до 20 нм) (рис.1, 2), що може бути пов'язано з асоціацією часток БФЧ між собою.

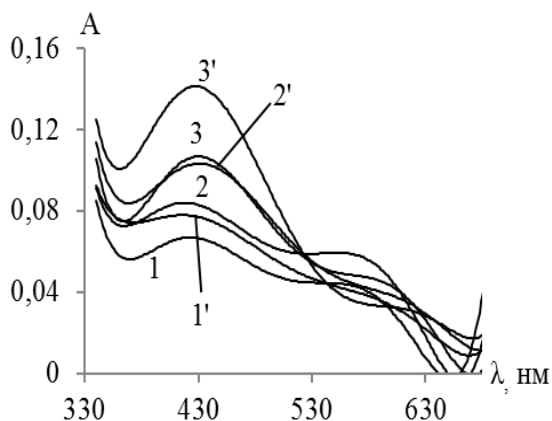


Рис. 1 – Спектри поглинання розчинів БФЧ (1–3) та БФЧ-PF920 (1'–3') при рН 5,5. $C_{\text{БФЧ}}=0,8 \cdot 10^{-5}$ моль/л (крива 1), $1,2 \cdot 10^{-5}$ моль/л (крива 2), $1,6 \cdot 10^{-5}$ моль/л (крива 3), $0,8 \cdot 10^{-5}$ моль/л (крива 1'), $1,2 \cdot 10^{-5}$ моль/л (крива 2'), $1,6 \cdot 10^{-5}$ моль/л (крива 3'). $C_{\text{PF920}}=4 \cdot 10^{-4}$ г/мл, $l=1$ см, СФ-26

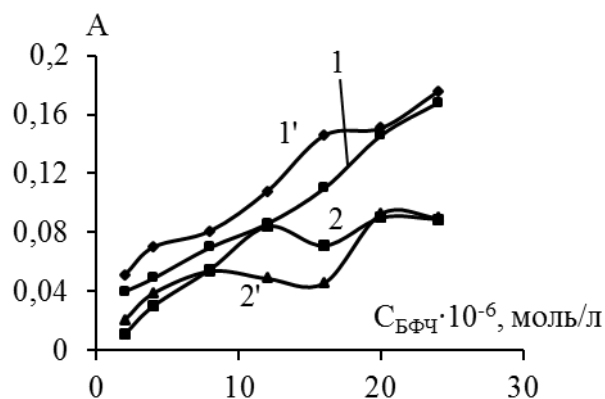


Рис. 2 - Залежність оптичної густини розчинів БФЧ (1-2) та БФЧ-PF 920 (1'-2') від концентрації БФЧ (моль/л) при рН 5,5, $\lambda=440$ нм (крива 1-1') і 570 нм (крива 2-2'), $C_{\text{PF920}}=4 \cdot 10^{-4}$ г/мл, $l=1,0$ см; СФ-26

В присутності PF 920 аналогічні ефекти спостерігаються при нижчих концентраціях барвника (рис. 1, кр. 3 і 2'), а при подальшому зростанні концентрації відзначається зсув довгохвильового максимуму до 640 нм ($\Delta\lambda$ складає 66 нм). Димерні частки в розчинах БФЧ починають утворюватися при концентрації барвника $1,2 \cdot 10^{-5}$ моль/л, тоді як в присутності PF 920 – при $4,0 \cdot 10^{-6}$ моль/л (рис.2), і при концентрації $2,0 \cdot 10^{-5}$ моль/л будемо мати тримерні асоціати.

Отримувані агрегати можуть сприяти підвищенню селективності аналітичних реакцій барвника з поліелектролітами.

АТОМНО-АБСОРБЦІЙНЕ ВИЗНАЧЕННЯ МЕТАЛІВ В ҐРУНТАХ РОЗТАШОВАНИХ ПОБЛИЗУ АЕС ТА ТЕС

Кравцева А.П., Смітюк Н.М.

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара, 49010, м. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72

Будь-яка діяльність людини, що потребує виробництва енергії, завдає шкоди навколишньому середовищу. Дії такого роду виникають як на теплових електростанціях, що перетворюють енергію різних видів органічного палива в електричну, так і на атомних електростанціях.

Ступінь забруднення тепловими електростанціями навколишнього середовища залежить від їх типу та потужності. Викиди діоксидів сульфуру та карбону, а також золи мають місце на всіх ТЕС, різниця полягає лише в обсязі цих викидів. Існує гостра проблема, що пов'язана з вугільними ТЕС – золовідвали. Мало того що для їх облаштування потрібні значні території, вони ще й є місцями нагромадження важких металів і володіють підвищеною радіоактивністю. Важкі метали та радіація потрапляють у навколишнє середовище повітряним шляхом або з ґрунтовими водами.

Вплив АЕС на навколишнє середовище при дотриманні технології будівництва і експлуатації є порівняно меншим, ніж на інших технологічних об'єктах. Однак, навколо АЕС спостерігається поширення радіоактивних відходів, які можуть містити радіонуклід цезій-137 та інші метали.

Проведено визначення вмісту металів в пробах ґрунтів, які відібрані поблизу АЕС та ТЕС (рис.1). Зразки ґрунту розкладали розчином «царської водки». Одну з серії обробляли ультразвуком протягом 15 хвилин при частоті 22 кГц та інтенсивності 3,88 Вт/см². Вимірювання проводили на атомно - абсорбційному спектрофотометрі «С-115 ПКС».

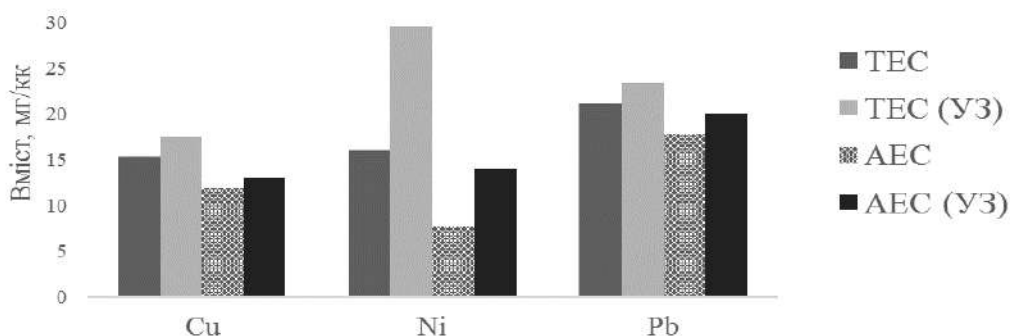


Рис. 1 - Вміст Cu, Ni та Pb в пробах ґрунту взятих біля ТЕС та АЕС.

Встановлено, що вміст купруму, нікелю та плюмбуму в аналізованих пробах не перевищує гранично-допустимі концентрації цих елементів в ґрунтах. При дії ультразвуком протягом 15 хвилин спостерігається більше вилучення металів.

ПРИСКОРЕННЯ ПРОБОПІДГОТОВКИ РОСЛИН ПРИ ДІЇ МІКРОХВИЛЬОВОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ

Дробот В. Є., Кулішова Ю. О., Смітюк Н.М.

*Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,
49010, м. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72*

Відомо, що використання мікрохвиль (МХ) значно скорочує час проведення аналізу, так як у разі використання МХ-пробопідготовки зразок руйнується за рахунок підвищення температури середовища і МХ-випромінювання. Це сприяє прискоренню процесів, які відбуваються у розчинах: масопереносу, дифузії та хімічних взаємодій між твердою поверхнею досліджуваного зразка та розчинником.

Проведено розкладання зразків кукурудзи, пшениці та сої розчином хлоридної кислоти (1:1) при дії мікрохвильового випромінювання різної потужності у мікрохвильовій пічі Lifetec з потужністю 160-800 Вт. Вміст металів у мінералізаті визначали атомно-абсорбційним методом в полум'ї ацетилен-повітря на спектрофотометрі С-115 ПКС.

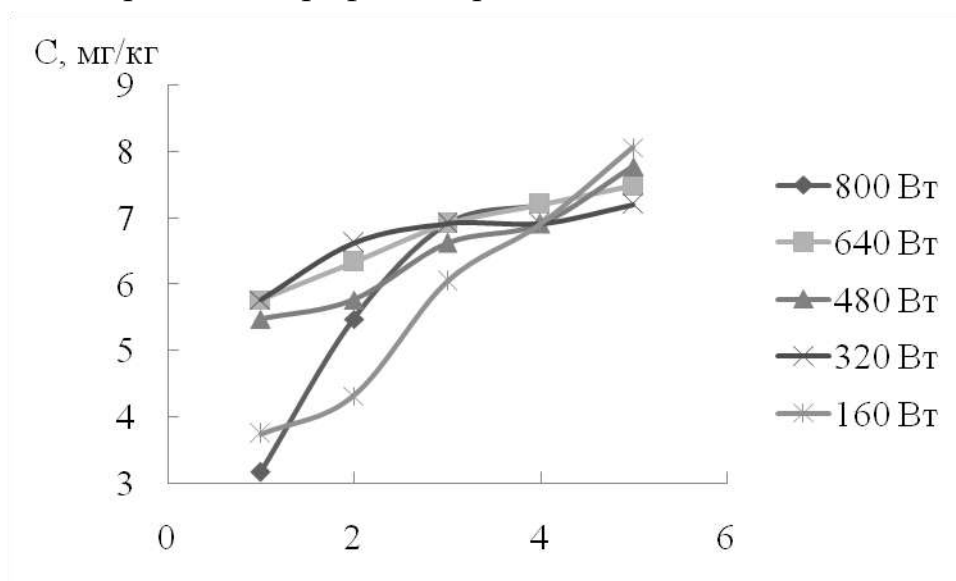


Рис. 1 Залежності вмісту купруму в мінералізатах зразків кукурудзи від часу обробки МХ випромінюванням різної потужності

Встановлено, що використання мікрохвильового випромінювання на стадії пробопідготовки зразків рослин значно скорочує час мінералізації. Найбільший ступінь вилучення спостерігається при потужності 160 Вт та часу 4,30 хв, що в 25 разів швидше звичайної кислотної мінералізації кип'ятінням.

ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ ФЛОКУЛЯНТА PURO FLOCK 920

Іщенко Г.С.*, Жук Л.П.

*Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,
49010, м. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72*

e-mail: anna_ishchenko@mail.ua

Робота з флокулянтами потребує відомостей про їх властивості. Потенціометрично відтитровано Puro Flock 920 розчинами NaOH та HCl. За результатами титрування, використовуючи формулу :

$$pH = pK_{ef}(\alpha) + \lg\left(\frac{\alpha}{1-\alpha}\right) = pK_0 + \Delta pK(\alpha) + \lg\left(\frac{\alpha}{1-\alpha}\right)$$

обчислено значення степені дисоціації α та $pK_{ef}(\alpha)$ і побудовано графік залежності $pK_{ef}(\alpha)$ від α (рисунок).

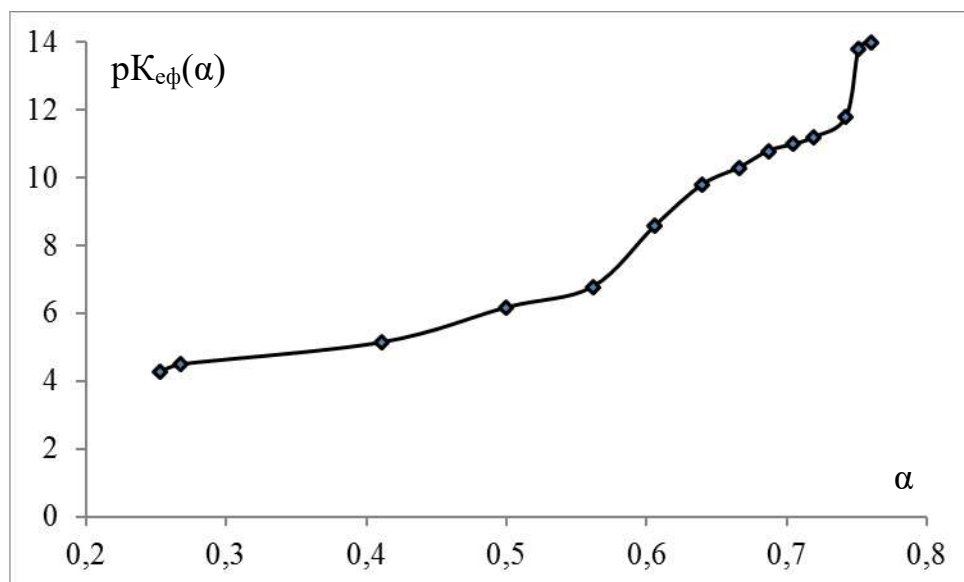


Рисунок – Крива залежності $pK_{ef}(\alpha)$ від степені дисоціації розчину Puro Flock 920

Вид кривої (рис.) свідчить про наявність двох різновидів активних груп в поліамфоліті. Характеристичну константу pK_0 кислоти визначали екстраполяцією залежності pK_{ef} від α на значення $\alpha = 0$, звідкіля встановили $pK^a = 4,25$, що відповідає константі дисоціації поліакриламід у та $pK^a = 9,21$ – 3-метилвінілпіридину. Розрахована ізоелектрична точка ІЕТ складає 6,725, та визначена ізоіонна точка ІІТ склала 3,8. Після екстракції розчинів зразка Puro Flock 920 результати титрування не змінилися, що свідчить про те, що Puro Flock 920 є співполімером поліакриламід у з 3-метилвінілпіридином.

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

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ЧАЙНИХ ПОЛІФЕНОЛІВ З ВИКОРИСТАННЯМ 18-МОЛІБДОДИФОСФАТУ

Товстоног Н., Денисенко Т.О., Мех Ю.В., Вишнікін А.Б.

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,

49010, г. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72

e-mail: : denisenko_tatyana@i.ua

Чорний чай – це багатокомпонентна система, що містить близько 500 різних речовин, їх поєднання є унікальним і не може бути замінено ніякими іншими сполуками. Основну харчову цінність та антиоксидантну активність чаю визначає комплекс фенольних сполук (ФС). Чайні поліфеноли загалом чинять позитивний вплив на організм людини. Проте, як показують останні дослідження, не усі ФС однаково корисні. Так полімерні поліфеноли, які переважають в чорному чаї, підвищують ризик виникнення тромбів та утворенню каменів в нирках і сечовому міхурі.

У даній роботі в якості аналітичного реагенту для визначення чайних поліфенолів запропоновано гетерополікомплекс структури Доусона – 18-молібдодифосфат (18-МФК) [1]. У результаті реакції відновлення ГПК поліфенолами утворюються інтенсивно забарвлені сполуки – гетерополісині (ГПС). У попередніх роботах було показано, що флавоноїди загалом відновлюються значно легше, аніж більшість представників інших класів поліфенолів, і їх повне окислення відбувається у менш лужному середовищі. У цій роботі зроблено спробу знайти умови, де б швидкість реакції різних поліфенолів з 18-МФК значно розрізнялася і на цій основі розробити методику їх одночасного визначення.

Досліджено залежність часу реакції утворення ГПС від природи відновника, концентрації 18-МФК або поліфенолів, рН розчину. Показано, що для окислення рутину (флавоноглікозид) та галотаніну (полімерний поліфенол) оптимальними значеннями рН є 7,4 та 10,2, відповідно. За цих значень рН за 15 хв та за концентрації реагенту 0,2 ммоль/л встигає прореагувати більш ніж 96 % ФС. Градувальний графік для визначення рутину є лінійним в інтервалі концентрацій 4 – 40 мкмоль/л, описується рівнянням $A = -0,05 + 2,3 \cdot 10^4 (\text{pH } 7,4 \text{ та } 10,2)$ ($R^2 = 0,994$). Для галотаніну відповідні параметри складають – 0,4 – 8 мкмоль/л, $A = -0,086 + 1,69 \cdot 10^5 (\text{pH } 7,4)$, $R^2 = 0,979$; $A = -0,046 + 2,05 \cdot 10^5 (\text{pH } 10,2)$, $R^2 \approx 0,996$.

На підставі отриманих даних зроблено висновок, що швидкості реакцій рутину та галотаніну розрізняються недостатньо сильно, а отже можна визначити тільки їх суму. У присутності танінів результат визначення рутину при рН 7,4 є завищеним. рН 10,2 можна рекомендувати для визначення суми полімерних поліфенолів та флавоноглікозидів. Оптична густина суміші рутину та галотаніну підпорядковуються правилу адитивності.

[1] – Денисенко Т.А., Цыганок Л.П., Вишнікин А.Б. Аналитика и контроль. 2015. – Т. 19, № 3. – С. 242–251.

СЕКЦІЯ ОРГАНІЧНА ТА ФАРМАЦЕВТИЧНА ХІМІЯ

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

Секретар: Пальчиков Віталій Олександрович, зав. НДЛ каф. органічної
хімії ДНУ, с.н.с.

РОЗРАХУНОК ЕНЕРГІЇ АДСОРБЦІЇ ПОЛІ- ТА НІТРОАРОМАТИЧНИХ ЕКОЛОГІЧНИХ ЗАБРУДНЮВАЧІВ НА ВУГЛЕЦЕВИХ ПОВЕРХНЯХ

Асоян Д. Г.*

*Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,
49010, м. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72
e-mail: asoyan2010@mail.ru*

Адсорбція на вуглецевих поверхнях отримує останнім часом велике значення, так як це явище відіграє значну роль в деяких процесах, таких як кристалізація, гетерогенний каталіз і стабілізація наночастинок. Незважаючи на великий інтерес до розробки нових технологій для перерахованих процесів, оцінка механізму адсорбції досліджуваних сполук (особливо органічних забруднюючих речовин), як і раніше, неоднозначна.

Метою даної роботи є розрахунок величин енергії адсорбції на вуглецевих поверхнях низки молекул, в тому числі полі- та нітроароматичних сполук, як є екологічними забруднювачами. Розрахунки проводились у наближенні M06-2X/6-31+G(d,p). Отримані в результаті оптимізації геометрії структури відповідають комплексам π - π -типу (див. рис. 1).

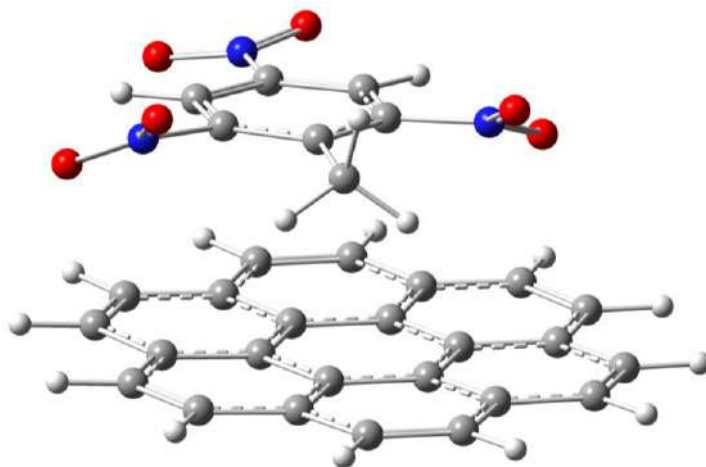


Рис. 1 – Структура комплексу «тринітротолуол - коронен», розрахована у наближенні M06-2X/6-31+G(d,p).

Результати розрахунків свідчать про те, що енергія зв'язування зменшується в ряду тринітротолуол, динітротолуол > триазол > антрацен, фенантрен > нітробензен > ізомерні триазини та тетразини > бензен.

*Науковий керівник: д.х.н., проф. Оковитий С.І.

ЗВОРОТНЄ ПЕРЕГРУПУВАННЯ D₃-ТРИСГОМОКУБАНОВОГО КАРКАСУ

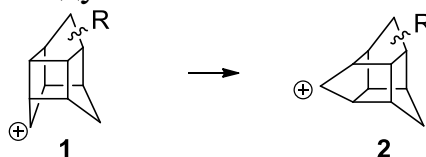
Гайдай О.В., Левандовський І.А., Жигadlo Є.Ю., Носовська О.Ю.

НТУУ “КПІ ім. Ігоря Сікорського”,

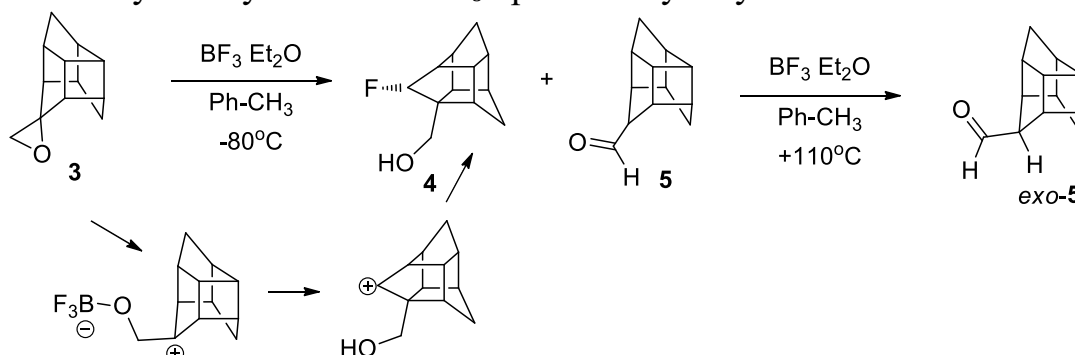
03056, Київ, пр. Перемоги 37

e-mail: laba123@bigmir.net

Практично всі відомі способи одержання похідних D₃-трисгомокубану **2** полягають у перегрупованні 4-заміщених пентацикло[5.4.0.0^{2,6}.0^{3,10}.0^{5,9}]ундеканів (C₅-трисгомокубанів) **1**. Такий підхід пояснюється тим, що D₃-трисгомокубан є стабіломером серед насичених вуглеводнів складу C₁₁H₁₄.



В результаті перегруповання Майнвальда оксиранового похідного C₅-трисгомокубану **3** в присутності ефірату BF₃ при низькій температурі з реакційної суміші, як основну домішку було виділено фтороспирт **4**. В той час як утворення фторогідринів в подібних умовах – звичайне явище, пояснити утворення **4** можна перегрупованням каркасу при утворенні карбокатиону в 4-му положенні C₅-трисгомокубану.



Структуру фтороспирту **4** легко довести наявністю розщеплених сигналів на ¹H та ¹⁹F ЯМР спектрах, однак для визначення конфігурації у F-заміщеному положенні було проведено РСА кристалу **4**.

За підвищеної температури реакційна суміш (**4** та **5**) перетворюється у екзо-8-C₅-трисгомокубан карбальдегід (**5**), що вказує на можливе зворотнє перегруповання D₃-трисгомокубанового похідного у C₅-трисгомокубанове. Для підтвердження цього фтороспирт **4** було виділено із суміші і введено умови перегруповання з BF₃ при 110°C і в результаті одержано лише екзо-5. Факт зворотнього перетворення фтороспирту **4** у альдегід C₅-трисгомокубану (**5**) є першим випадком перегруповання D₃-трисгомокубан→C₅-трисгомокубан.

СИНТЕЗ ДЕКАГІДРОІЗОХІНОЛІНОВОГО ФРАГМЕНТУ З ЕПОКСИ- 2-МЕТИЛЕНЦИКЛОГЕКСАНАЦЕТАТУ

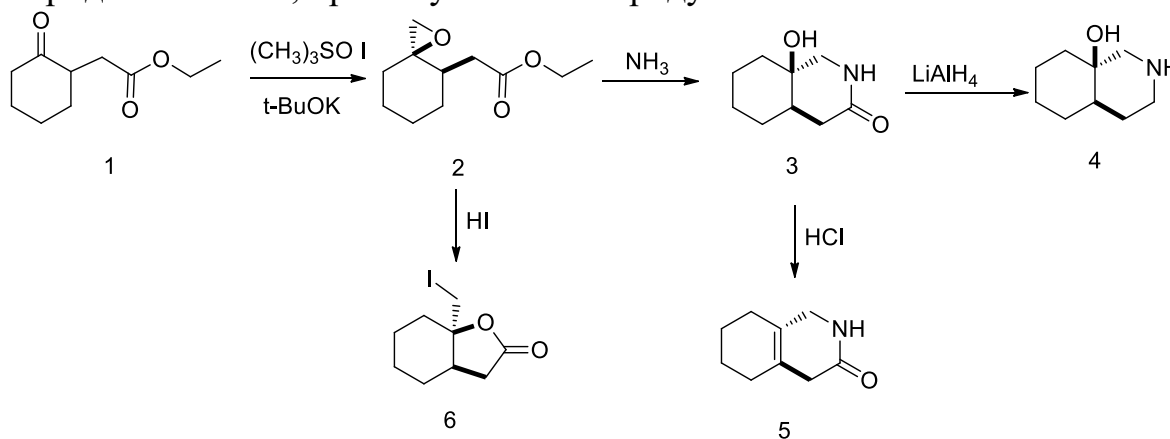
Носовська О.Ю., Гайдай О.В., Левандовський І.А.

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
03056, Київ, пр-т Перемоги, 37,
e-mail: laba123@bigmir.net

З метою отримання δ -лактаму **4**, конденсованого з циклогексаном, було досліджено розкриття епоксидного циклу різними нуклеофільними реагентами. Об'єктом нашого дослідження став епоксид **2**, що було отримано з циклогексаноноцтової кислоти **1**.

Згідно з [1] *син*-епоксид **2** утворюється діастереоселективно в умовах реакції метилування кетону **1** за Корі – Чайковським. Було описано можливості отримання 5- та 6-членних циклів, використовуючи різні нуклеофільні реагенти. Оксиран **2** було розкрито дією HI, іодолактон **6** було отримано як єдиний продукт розкриття епоксиду.

Подіявши іншим нуклеофілом – аміаком – на епоксид **2**, було отримано продукт внутрішньомолекулярної циклізації в одну стадію – лактам **3**. *Транс*- Стереохімія лактаму **3** була запропонована з огляду на схему механізму реакції. Лактам **3** було відновлено до 8-гідроксидекагідроізохіноліну **4**. Останній піддається дегідратації дією хлоридної кислоти, причому алкен **5** є продуктом.



Декагідроізохіноліновий фрагмент є компонентом, що входить до структури великої кількості алкалоїдів. Сполуки, що містять цей фрагмент, проявляють інгібіторну активність по відношенню до oxidosqualene cyclase. [2]

Наведений метод може бути використаний для отримання різноманітних заміщених *транс*-декагідроізохінолінів.

1. Y. Tsuda, A. Ishiura, S. Takamura. *Chem. Pharm. Bull.* **1991**, 39, 2797.
2. T. Hoshino, N. Kobayashi, E. Ishibashi, S. Hashimoto. *Biosci. Biotech. Biochem.*, **1995**, 59, 602.

АЦИЛИРОВАНИЕ 1,3-ДИМЕТИЛБЕНЗИМИДАЗОЛИН-2-ОНА ХЛОРАНГИДРИДАМИ АРОМАТИЧЕСКИХ КИСЛОТ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МАЛЫХ КОЛИЧЕСТВ $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$

Тахиров Ю.Р., Курязов Р.Ш., Садикова С.Б., Атауллаев З.М.

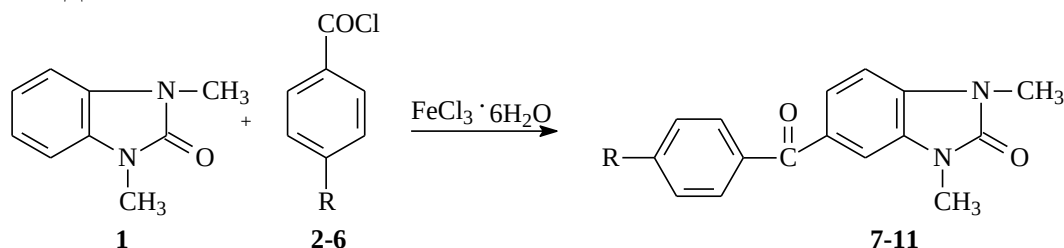
Ургенчский Государственный университет,

220100, Ургенч, ул. Х.Алимджана 14

e-mail: sadikova-ximik@mail.ru

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

Реакции 1,3-диметилбензимидазолин-2-она (**1**) с хлорангидридами ароматических кислот (**2-6**) в присутствии $1 \cdot 10^{-2}$ молей $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ проводили в без растворителя при температуре 150-160⁰С. В результате реакций синтезированы соответствующие 1,3-диметил-5(6)-ароил-бензимидазолин-2-оны.



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

Выявлены оптимальные условия реакции ацилирования и определена граница применения малого количества катализатора. Как показали наши исследования, реакции проведенные при мольном соотношением реагентов 1:2-6: $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ = 1:1,5:1·10⁻² в без растворителя протекают при более низкой температуре (150-160⁰С). По данному методу выходы соединений **7-11** выше, чем проведенных с использованием нитробензола.

Строение синтезированных соединений доказана методами ИК-спектроскопии, масс-спектрометрии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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

ЗАЛЕЖНІСТЬ БАР'ЄРІВ ІНВЕРСІЇ АТОМА НІТРОГЕНУ В N-ПОХІДНИХ ФОРМАЛЬДІМІНІВ ВІД КОНСТАНТ ЗАМІСНИКІВ

Чертихіна Ю.А., Куцик-Савченко Н.В., Ліб О.С., Просяник О.В.

*Український державний хіміко-технологічний університет, м. Дніпро
sulfamid25@yandex.ua*

Методом DFT (B3LYP/6-311+G(d,p)) в рамках NBO для ізоелектронних формальдімінів $H_2C=NX$ 1-9 розраховані бар'єри інверсії атома Нітрогену (ΔE_i), різниця енергій неподіленої пари електронів (НПЕ) атома N між перехідним і основним станами інверсії (ΔE_{nN}) та відсоток p-характеру НПЕ в основному стані (% p):

X	H(1)	Me(2)	NH ₂ (3)	OH(4)	F(5)	SiH ₃ (6)	PH ₂ (7)	SH(8)	Cl(9)
ΔE_i	113,9	117,9	141,8	237,6	311,7	30,9	47,3	89,6	194,4
ΔE_{nN}	509,1	405,1	435,3	562,5	655,6	358,5	394,0	495,6	655,2
%p	61,02	69,36	66,65	57,56	50,86	71,18	67,54	59,33	51,41

Встановлено, що значення ΔE_i імінів 1-9 задовільно корелюють з константами електронегативності замісників біля атому N (χ , $r=0,95$) і змінюються симбатно значенням ΔE_{nN} ($r=0,86$), %p($r=0,81$) та індукційних констант (σ_i , $r=0,75$). Це свідчить, що головним чинником різкого збільшення бар'єрів інверсії при переміщенні по періоду зліва направо на ~ 194 (іміни 2-5) і ~ 163 кДж/моль (іміни 6-9) і різкого зменшення при зміщенні вниз по групі на 87-148 кДж/моль є зростання електронегативності та σ -електроноакцепторності замісників біля атома N. Вплив двох- та чотирьохелектронних внутрішньомолекулярних взаємодій має другорядне значення. При цьому, вони повинні сприяти зростанню бар'єрів інверсії в ряду імінів $3 < 4 < 5$ та $8 < 7 < 6$ при русі вздовж періоду і в ряду імінів $2 < 6$, $3 < 7$, $8 < 4$ та $9 < 5$ при русі вниз по групі.

При окремому розгляді імінів 2-5 та 6-9, які містять при атомі Нітрогену елементи 2-го або 3-го періоду, вказані кореляції значно поліпшуються ($r=0,95-1,00$). Це вказує, що при кореляціях бар'єрів інверсії з константами замісників слід окремо розглядати замісники, що містять біля атома Нітрогену елементи різних періодів. Знайдені кореляції вперше на прикладі імінів за допомогою розрахунків підтверджують відомі теоретичні положення: бар'єри інверсії при заміні гетероатома біля атома Нітрогену зростають із збільшенням значень ΔE_{nN} та із зменшенням доли p-орбіталі в НЕП імінного атома Нітрогену.

ЕЛЕКТРОХІМІЧНА ДЕСТРУКЦІЯ ГАЛОГЕНПОХІДНИХ ФЕНОКСИОЦТОВИХ КИСЛОТ

Загорулько С.Ю., Дмитрікова Л.В.

*Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,
49010, м. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72*

e-mail: l_dmitrikova@mail.ru

У зв'язку з постійним збільшенням біологічностійких та токсичних органічних речовин в стічних водах важливою стадією водопідготовки є їх попередня окисна деструкція сполуками: H_2O_2 , NaOCl , O_3 . Найбільш ефективним окисником по відношенню до більшості органічних токсикантів є $\text{OH}^\bullet$ радикали, які утворюються в так званих системах Фентона (електро-Фентона, фотоелектро-Фентона) або при електрохімічному окисненні води на окисних анодах. Більш екологічним та перспективним вважають метод прямого анодного окиснення забрудників на PbO_2 -анодах модифікованих різними добавками.

Метою роботи було вивчення процесу деструкції гербіцидів, галогенпохідних феноксиоцтових кислот (ФОК), методом прямого анодного окиснення на PbO_2 -анодах модифікованих різними добавками.

Конверсію ФОК, гербіцидів: 2,4-дихлор-ФОК (2,4-Д), 2,4,5-трихлор-ФОК (2,4,5-Т), а також бромпохідних – 4-бром-ФОК (4-Б), 2,4-дибром-ФОК (2,4-ДБ) та 2,4,5-трибром-ФОК (2,4,5-ТБ) проводили в фосфатному буфері з $\text{pH} = 6,68$ в комірці з розділеними анодним і катодним простором на PbO_2 -анодах модифікованих іонами Ni^{2+} .

Змінення концентрації органічних сполук та ароматичних фрагментів їх окиснення контролювали спектрофотометричним методом за розміром та положенням максимумів поглинання в області 230 та 280 нм.

Виходячи з даних спектрів поглинання та хімічного споживання кисню (ХСК) встановлено, що ФОК (початкова концентрація органічних сполук 0,1 мМ), як і 4-Б, окиснюється до аліфатичних кислот за 2 години. Із збільшенням числа замісників в ароматичному ядрі час конверсії бромпохідних ФОК значно збільшується (до 4 годин для 2,4,5-ТБ). Важливо відзначити, що кількість атомів хлору в ароматичній сполуці не впливає на час конверсії і для 2,4-Д, 2,4,5-Т складає 2 години. В процесі окиснення гербіцидів до аліфатичних кислот відбувається накопичення хлорид-іонів в розчині і на час зникнення максимумів поглинання на УФ-спектрах складає 95% від їх розрахованої концентрації за формулою сполуки. Таким чином на момент утворення аліфатичних кислот процес дехлорування ФОК вже закінчився, а хлорзаміщені аліфатичні кислоти не утворюються. Отже, в процесі прямого анодного окиснення на PbO_2 -анодах відбувається повна конверсія хлор- та бромпохідних ФОК в нетоксичні аліфатичні кислоти.

СИНТЕЗ 1-(2,4-ДИМЕТИЛФЕНІЛ)-ЕТАНСУЛЬФОНІЛ ХЛОРИДА

Самойленко В.О.

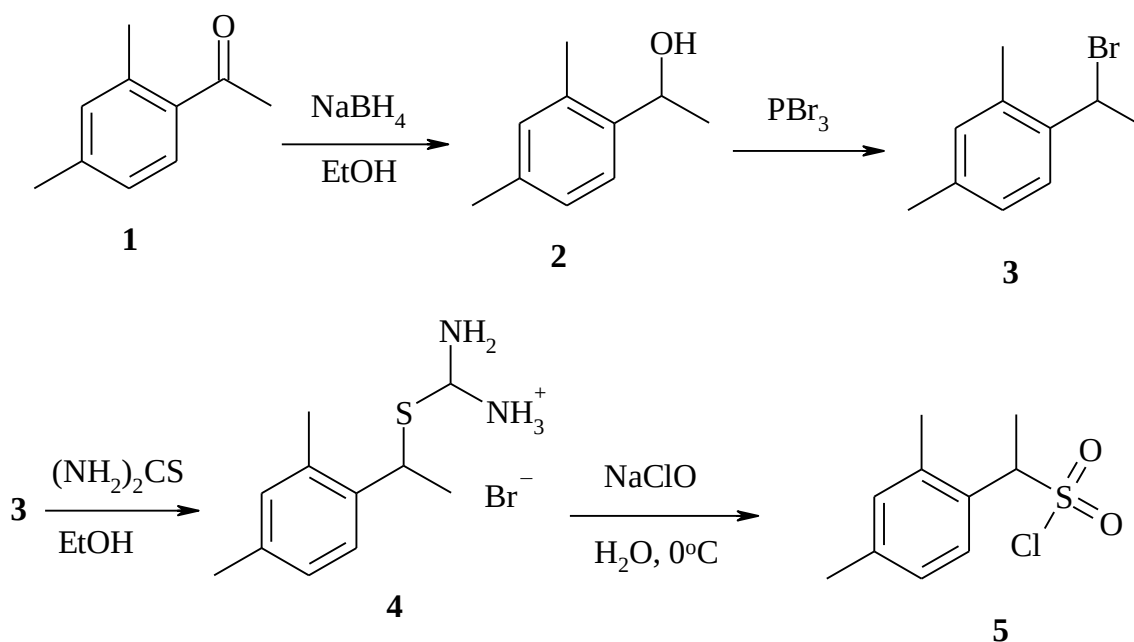
Дніпропетровський національний університет ім. Олеся Гончара

49010, м. Дніпро, пр. Гагаріна, 72

E-mail: vladlena.samoylenko@ukr.net

Як свідчать літературні дані, синтез алкілсульфоніл хлоридів, які містять в α -положенні арильний замісник, є проблематичним – як правило, процес ускладнюється елімуванням сульфонільної групи з утворенням відповідних алкенілбензолів. Більш того, ця реакція стає єдиною, що перебігає в класичних умовах отримання сульфоніл хлориду – при нагріванні натрієвих солей сульфокислот з галогенідами фосфора.

З використанням як вихідної сполуки 2,4-диметилацетофенону (1) нами реалізовано синтетичну схему отримання відповідного сульфоніл хлорида (5). Ключовою стадією процесу було отримання ізотіуронієвої солі (4) з її подальшим окисненням у сульфохлорид (5). Такий підхід раніше було успішно використано різними авторами для отримання різноманітних алкіл- і бензилсульфоніл хлоридів.



Слід зазначити, що отриманий сульфохлорид (5) є доволі лабільною сполукою, яка за звичайної температури дуже швидко розкладається з утворенням комплексної суміші речовин, тому кінцевий продукт було опосередковано ідентифіковано перетворенням у стабільний сульфонамід.

**КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ІНГІБУВАННЯ
КАЗЕЇН КІНАЗИ 2 ПОХІДНИМИ ФЛАВОНОЛУ**

Біліченко М.О., Щука Н.М., Оковитий С.І.

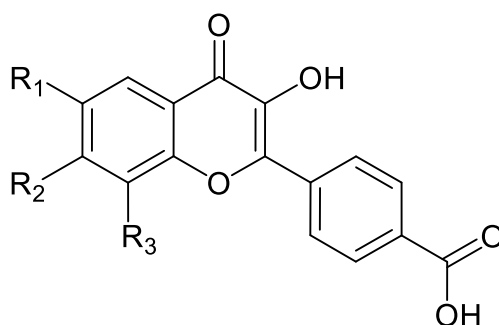
Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,

49010, м. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72

e-mail: marybelle10@mail.ru

Правильне уявлення про спорідненість до зв'язування білка по відношенню до ліганда лежить в основі сучасних методів розробки лікарських препаратів. Казеїн кіназа 2 (СК2), яка належить до родини сирін/треонін кіназ, відіграє найважливішу роль у контролі еукаріотичного клітинного циклу. Виникнення багатьох видів ракових пухлин пов'язують з аномальною активністю СК2. Було встановлено, що своєчасне введення інгібітора до СК2 може призвести до апоптозу ракових клітин на початкових стадіях захворювання та перешкодити їх подальшому розростанню. Це дозволяє припустити, що інгібітори кінази СК2 можуть бути використані в якості протипухлинних агентів з гарним терапевтичним діапазоном дії.

Метою нашої роботи був розрахунок енергій зв'язування комплексів СК2/ліганд. Розрахунки проводились за наступним алгоритмом: I) створення структур комплексів на основі кристалічної структури «СК2α - 4'-карбокси-6,8-дибромовфлавонол» (PDB ID: 4UBA); II) модифікація структур інгібітору; III) молекулярно-динамічний аналіз комплексів СК2/ліганд за допомогою програми AMBER; IV) оптимізація геометрії комплексів та його складових за допомогою методу PM7 в програмі MORAS та V) розрахунок енергій зв'язування як різниці ентальпій утворення протеїн-лігандних комплексів та вихідних структур інгібітору та протеїнкінази.



Розраховані величини співставлені з аналогічними параметрами, отриманими в результаті докінгу за програмою AutoDock Vina.

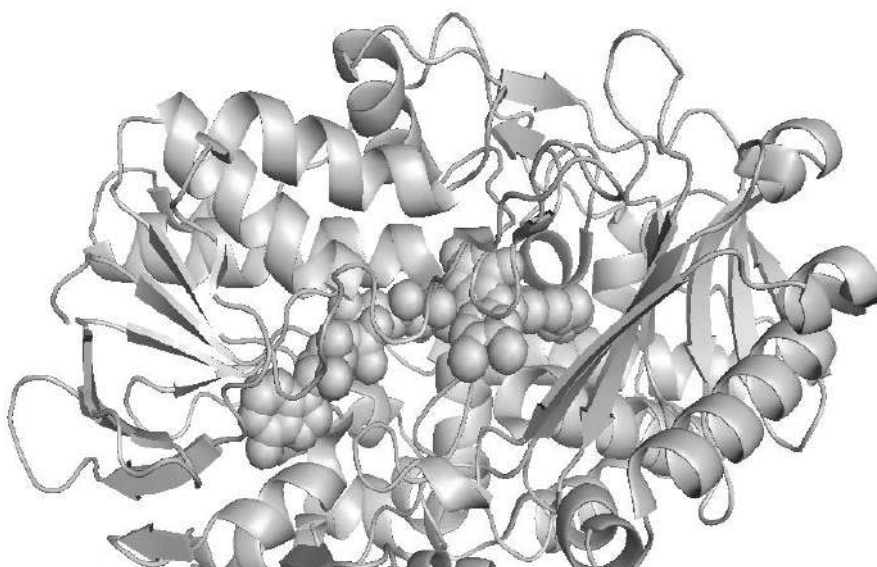
Розраховані величини ентальпій зв'язування добре узгоджуються з даними біохімічного тестування *in vitro*.

3D-QSAR МОДЕЛЬ ДЛЯ ПОТЕНЦІЙНИХ ІНГІБІТОРІВ МОНОАМІНОКСИДАЗИ В ЛЮДИНИ

Аліхонов А.А.

*Донецький національний медичний університет,
міжнародний медичний факультет,
м. Кропивницький, вул. Велика Перспективна 1*

Моноаміноксидаза-В (МАО В) каталізує окислювальне дезамінування арилалкіламінів нейромедіаторів, при якому кисень окислюється до гідрогенпероксиду. За рахунок ряду біохімічних процесів, з віком, експресія МАО В в нервовій тканині збільшується, що може викликати окисне пошкодження мітохондріальної ДНК і призвести до розвитку хвороби Паркінсона. Таким чином, МАО В виступає в якості перспективної мішені для розробки лікарських препаратів, що потенційно можуть бути використані для лікування цієї хвороби.



На основі аналізу структури та активності відомих на сьогодні інгібіторів МАО В, а також даних рентгеноструктурного аналізу даного ферменту, нами розроблено 3D-QSAR модель, яка була використана для пошуку нових потенційно ефективних інгібіторів моноаміноксидази. В результаті, виявлено молекулярні фрагменти, які мають вагомий внесок у інгібування, і змодельовано кілька сполук, які є потенційно більш активними за існуючі на сьогоднішній день інгібітори МАО В, і можуть бути запропоновані для подальших клінічних досліджень як біологічно активні речовини для лікування хвороби Паркінсона.

БІОЛОГІЧНА АКТИВНІСТЬ НОВИХ ПОХІДНИХ ПІРИДИНОВИХ СОЛЕЙ

Грищенко Г. О.¹, Крамарьов С. М.²

¹*Придніпровська державна академія будівництва та архітектури*

²*Дніпропетровський державний агро-економічний університет*

E-mail: anna-hryshchenko@mail.ru

Все більшу зацікавленість проявляють дослідники різних сфер діяльності до екологічно чистих і біологічно обґрунтованих речовин класу піридинових солей. Гетероциклічні піридинові солі нікотинамід у проявляють великий арсенал біологічної активності. У теперішніх умовах невідривною частиною посилення технологій культивування сільськогосподарських культур є використання біологічно активних сполук (індукторів імунітету, регуляторів росту).

Нами було синтезовано нові сполуки піридинового ряду з фталімід-N-оксильним аніоном [1]. З речовиною N-бензилпіридиній 3-карбоксамід фталімід-N-оксил було проведено дослідження на біологічну активність в сфері сільського господарства – дія ароматизованої сполуки на ячмінь ярий сорту «Донецький 12».

Було встановлено, що нова речовина проявляє ріст регулюючу активність зернової культури. Дана властивість органічної сполуки виявляється лише в концентрації 0,001 % водному розчині. Зі зростанням концентрації водного розчину фітогормональна дія N-бензилпіридинію 3-карбоксамід фталімід-N-оксилу значно зменшується.

Дослідження продовжується в даній області.

Література:

- [1] Грищенко Г.О. Реакції 1-N-заміщених піридинових солей з фталімід-N-оксильними солями / Г.О. Грищенко // Сучасні тенденції розвитку науки в Україні: матеріали міжнародної науково-практичної конференції молодих вчених. – Рівне, 2016. – С. 171.

**НОВІ НІТРО- ТА АМІНОЗАМІЩЕНІ
ПІРАЗОЛО[3,4-d]ПІРИДАЗИН-7-ОНИ**

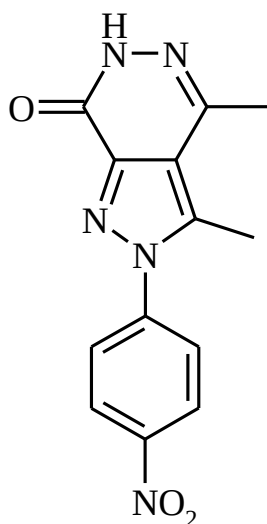
Коваленко С.О.

Дніпропетровський національний університет ім. Олеся Гончара

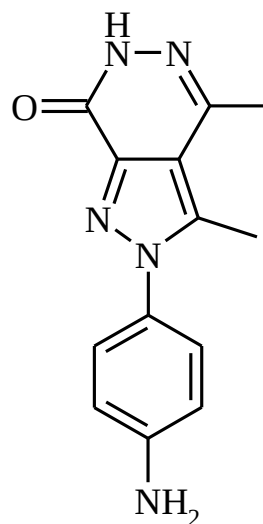
49010, м. Дніпро, пр. Гагаріна, 72

E-mail: swet_lana3556@mail.ru

Піразоло[3,4-d]піридазинони відносяться до перспективних біологічно активних речовин, які володіють протираковою, протівірусною, антибактеріальною та іншими видами біологічної активності. В продовження досліджень, виконаних протягом кількох останніх років на нашій кафедрі, в роботі запропоновано прості синтетичні підходи до піразоло[3,4-d]піридазинонів (**1**, **2**), які містять нітро- та аміногрупи в ароматичному кільці.



1



2

Структуру синтезованих гетероциклів (**1**, **2**) підтверджено за допомогою даних спектрів ЯМР ^1H та хромато-мас-спектрів.

МЕХАНІЗМ ВЗАЄМОДІЇ 3,4-ЕПОКСИСУЛЬФОЛАНУ З ВОДОЮ В ПРИСУТНОСТІ КАТАЛІЗАТОРА

Решетняк А. В., Пальчиков В. О., Оковитий С. І.

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

e-mail: reshetnyak199656@gmail.com

Інтерес до хімії 3,4-дизаміщених сульфоланів (тіолан-1,1-діоксидів) обумовлений широким використанням цих похідних в сучасному органічному синтезі для дизайну нових drug-like сполук. За допомогою методу РСМ/М06-2Х/6-31++G(d,p) нами було проведено квантово-хімічне дослідження механізму взаємодії 3,4-епоксисульфолану **1** з молекулою води в присутності наступних молекул як каталізаторів: NH_3 , $\text{C}_6\text{H}_5\text{NH}_2$ та H_2O . В ході дослідження було встановлено, що на першій стадії найбільш вигідним є перегрупування епоксидної сполуки в аліловий спирт **2** (шлях *a*), а потім відбувається *син*- та *анти*- приєднання нуклеофілу (гідроксид-аніону) до подвійного зв'язку сполуки **2**. Показано, що шляхи утворення стереоізомерних діолів **3a** та **3b** характеризуються близькими величинами енергій активації. Найбільш ефективним є каталіз молекулою аміаку (шляхи *d* та *e*). Експериментальні дані підтверджують наявність суміші діолів **3a** та **3b** при обробці епоксиду **1** надлишком водного розчину аміаку.

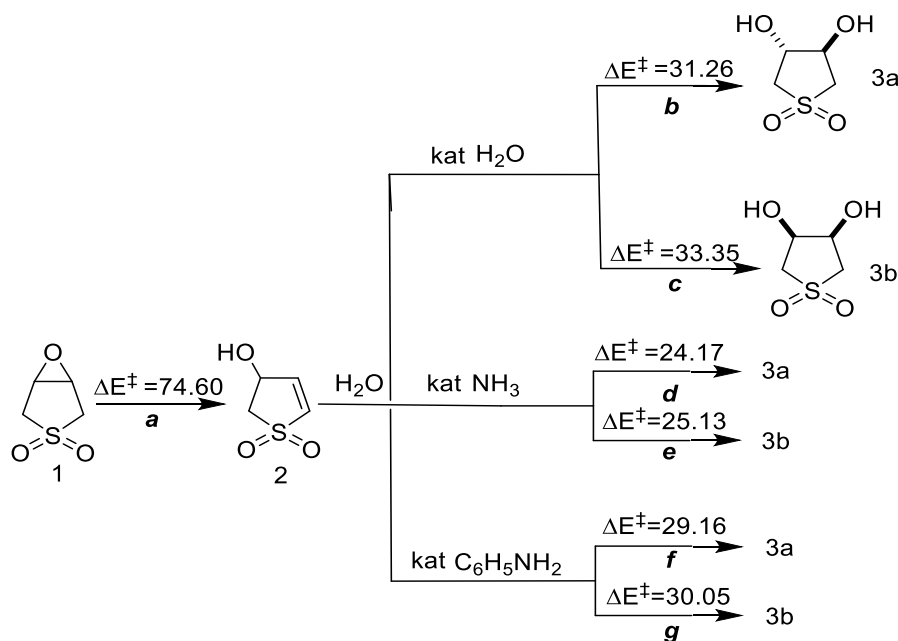


Схема 1. Можливі шляхи взаємодії 3,4-епоксисульфолану з молекулою води (каталізатори – вода, аміак, анілін). Значення енергій активації ($\Delta E^\ddagger$) вказані в кДж/моль.

ПОШУК ІНГІБІТОРІВ АКВАПОРИНУ 1

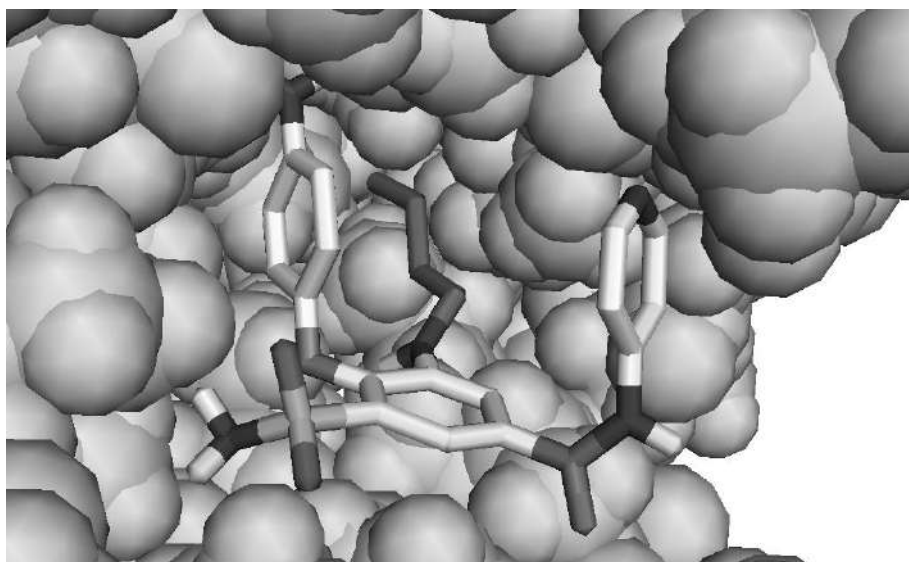
Колісник Т. І.

*Донецький національний медичний університет,
м. Кривий Ріг, вул. Велика Перспективна 1*

Мембранний білок аквапорин 1 (AQP1) являє собою водний канал, знайдений у багатьох тканинах і потенційно залучений в кілька людських патологій. Селективні інгібітори AQP1 запропоновані як нові засоби для лікування глаукоми, набряку головного мозку і деяких видів онкозахворювань. Проте, тільки далеко не всі сильнодіючі і хімічно безпечні.

В даній роботі пошук потенційно ефективних інгібіторів AQP1 був здійснений на основі відомих на сьогоднішній день інгібіторів даного білка. Модельні сполуки утворені шляхом модифікації замісників у молекулі інгібіторів. Дані сполуки змодельовано у програмі PCModel 8.00.1. Структура білка взята з банку білкових молекул PDB (1J4N). Докінг проведено за допомогою програми AutoDock Vina.

За результатами проведеного молекулярного докінгу виявлено ряд сполук потенційно більш ефективних щодо інгібування AQP1 ніж відомі на сьогоднішній день інгібітори. Застосування правила п'яти Ліпінського до даних сполук для оцінювання подібності до лікарських речовин (абсорбція, розподіл, метаболізм і виділення) не показало жодного відхилення від правила, що свідчить про можливість вибраних сполук стати ефективними лікарськими засобами.



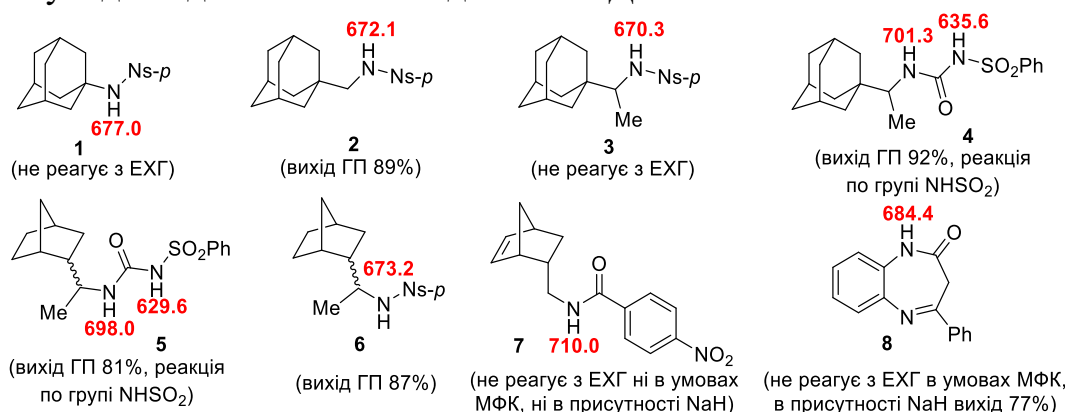
В результаті виконання роботи нами запропоновано кілька потенційних інгібіторів аквапорину, які можуть стати ефективними лікарськими засобами в терапії глаукоми, набряку головного мозку і онкозахворювань.

КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ВЗАЄМОДІЇ КАРКАСНИХ СУЛЬФОНАМІДІВ З ЕПІХЛОРГІДРИНОМ

Кирилова Д.В., Мондрусова М.С., Пальчиков В.О., Оковитий С.І.
Дніпропетровський національний університет ім. Олеся Гончара
49010, Дніпро, пр. Гагаріна 72. E-mail: darinakir.dk@gmail.com

Синтез нових гліцидильних похідних (ГП) каркасних сульфонамідів є способом введення в структуру біологічно активної речовини термінального епоксидного фрагменту, здатного до широкого кола подальших синтетичних перетворень.

Важливим результатом експериментів з гліцидилювання каркасних похідних є виявлення стеричного фактора – пасивуючої дії адамантанового каркаса в реакціях сульфонамідів з епіхлоргідрином (ЕХГ). Іншим вагомим фактором може бути легкість депротонування субстрату, що у свою чергу є важливим етапом у механізмі реакції за участю МФК. На схемі наведено розраховані у наближенні M06-2X/6-31++G** значення спорідненості до протону відповідних аніонів амідів **1-8** в кДж/моль.



Значення спорідненості до протону для сульфонамідів **1-3, 6** практично не відрізняються. Це дозволяє очікувати подібної реакційної здатності цих сполук в реакціях з ЕХГ, однак амід **1, 3** не дають продукту взагалі, що очевидно викликано внеском стеричного фактора. Знижене значення спорідненості до протону NHSO₂-груп сульфонілсечовин **4, 5** у порівнянні з сульфонамідами **1-3, 6** передбачає підвищення реакційної здатності сульфонілсечовин і регіоселективність їх взаємодії з ЕХГ за NHSO₂-групами, що повністю узгоджується з експериментальними даними. Пасивність амідів **7** та **8** в реакціях з ЕХГ в умовах МФК підтверджується дещо більшими значеннями спорідненості до протону відповідних субстратів у порівнянні із всіма іншими амідами **1-6**. Можливість уведення гліцидильного фрагменту в молекулу бензодіазепіну **8** (у більш жорстких умовах), у порівнянні із повністю пасивним амідом **7**, підкреслює роль легкості депротонування субстрату (сили відповідної NH-кислоти) в протіканні реакції.

ОТРИМАННЯ N-АМІНОМЕТИЛ-3-НІТРОФТАЛІМІДУ

Оскаленко Ю.В., Бондаренко Я. С.

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,

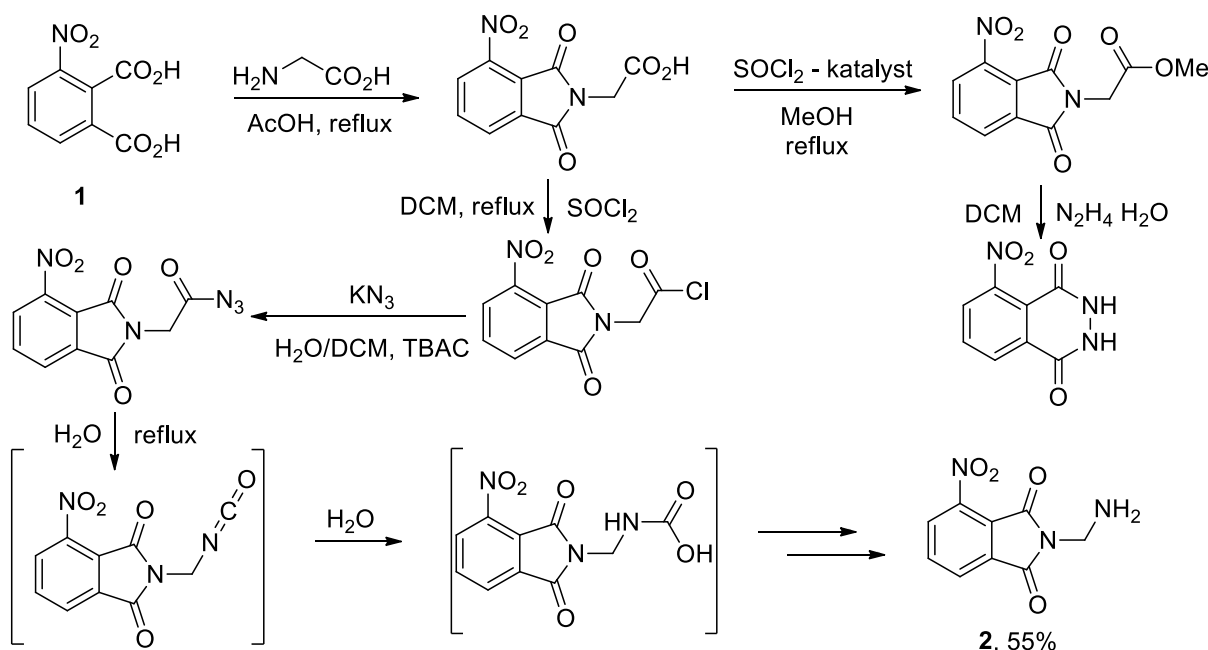
49010, м. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72

e-mail: lozitskaya.julia@yandex.ua

3-Нітрофталева кислота (**1**) та її похідні знаходять широке застосування, в різноманітних областях хімії: в якості складових термостабільних полімерів у аерокосмічній техніці – у складі композитних матеріалів^a, можуть бути використані у синтезі несиметричних амідів, гетероциклічних систем^{b,c}. Значну увагу останнім часом приділяється розробці методів синтезу та вивченню реакційної здатності амінофталімідів, здебільшого із аміногрупою у ароматичному кільці. В той же час методи отримання N-амінометил-3-нітрофталімиду (**2**) та його похідних здебільшого базуються на реакції аміноалкілювання 3-нітрофталімиду.

З огляду на наведені вище дані, ми сформулювали наступну мету даного дослідження – розробка альтернативних методів синтезу N-амінометил-3-нітрофталімиду (**2**).

N-амінометил-3-нітрофталімиду (**2**) був отриманий в результаті низки перетворень з виходом 55%.



References

^aTamami, B. et all. *Designed Monomers & Polymers*, **2007**, 10 (2), 167.

^bZhoua, W. et all. *Med. Chem. Commun.*, **2016**, 7, 292.

^cBailleux. V. et all. *Chem. Pharm. Bull.*, **1994**, 42 (9), 1817.

**СЕЛЕКТИВНЕ α -БРОМУВАННЯ
3-(2,4-ДИМЕТОКСИБЕНЗОЇЛ)ПРОПАНОВИХ
КИСЛОТ ТА ЇХ ПОХІДНИХ**

Соколюк К.С., Тарабара І. М.

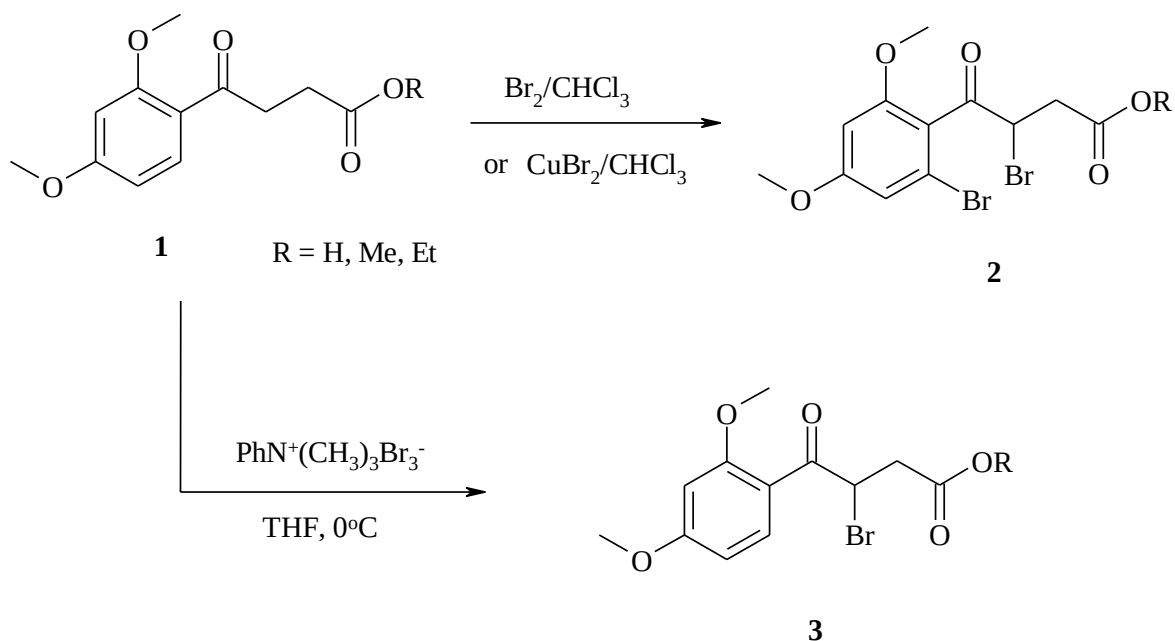
Дніпропетровський національний університет ім. Олеся Гончара

49010, м. Дніпро, пр. Гагаріна, 72

E-mail: katerina.sokolyuk@mail.ru

Сполуки, що містять галоген в α -положенні до карбонільної групи, є цінними напівпродуктами в органічному синтезі завдяки високій реакційній здатності та, як наслідок, безлічі можливих варіантів подальшого використання. Як відомо, одним з варіантів їх отримання є пряме галогенування, однак, останнє за наявності активуючих замісників може ускладнюватись галогенуванням ароматичної системи. Дійсно, на прикладі кислот та їх похідних (1), які містять таке «активоване» бензольне кільце, нами було показано, що дія як вільного брому, так і значно більш м'якого CuBr_2 призводить до отримання суміші продуктів, серед яких превалюють продукти дибромовування (2).

З літератури відомо, що одним з альтернативних нетрадиційних бромуючих агентів є фенілтриметиламоній трибромід, застосування якого в залежності від будови субстрату та умов реакції може призводити до утворення альтернативних продуктів бромовування. Нами показано, що дія останнього на сполуки (1) при охолодженні дозволяє отримати виключно цільові α -бромзаміщені кислоти та їх похідні (3).



За даними спектрів ЯМР ^1H і хромато-мас-спектрів чистота отриманих продуктів (3) становить більше 95%.

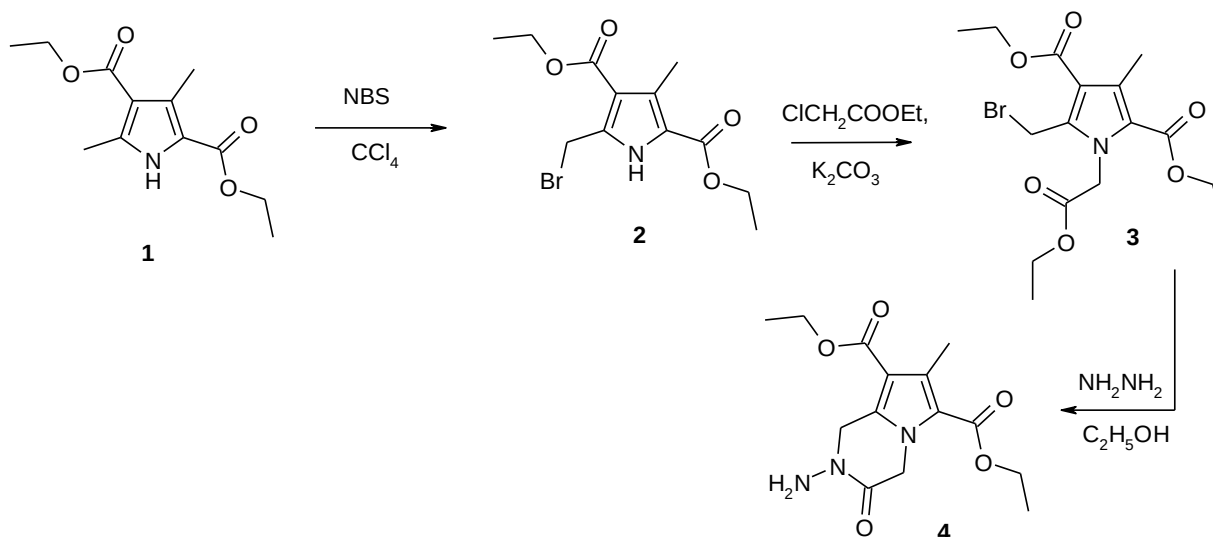
НОВИЙ НАПРЯМОК СИНТЕЗУ N-АМІНОПІРОЛОПІРАЗИНІВ

Матвєєва В.А., Петухова О.І.

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

Похідні піролопіразинів завдяки своїй різноманітній фармакологічній дії, зокрема протипухлинній, антимікробній, противірусній є перспективними попередниками для синтезу нових біоактивних сполук.

Враховуючи зазначене та в продовження досліджень можливості отримання похідних піролопіразинів реакцією гетероциклізації похідних 2,4-диметил-3,5-дикарбоєтоксид-1Н-піролу нами запропоновано новий напрямок синтезу піролопіразинів з використанням галогенопохідних піролу як вихідних сполук.



Ключовий об'єкт дослідження, бромпохідне 2 отримано галогенуванням вихідного 2,4-диметил-3,5-дикарбоєтоксид-1Н-піролу під дією NBS у присутності перекису бензоїлу, як промоутера реакції. Алкілювання сполуки 2 під дією етилхлорацетату в присутності карбонату калію в DMF призводить до утворення відповідного продукту реакції 3.

Внутрішньомолекулярна циклізація отриманого похідного 3 спиртовим розчином гідразин гідрату призводить до утворення піролопіразиної системи 4.

СЕКЦІЯ

ХІМІЯ ТА ХІМТЕХНОЛОГІЯ

ВИСОКОМОЛЕКУЛЯРНИХ ТА

ПРИРОДНИХ СПОЛУК

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

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

РОЗРОБКА МЕТОДУ ОЧИСТКИ 1, 1' ДІАЦЕТИЛФЕРОЦЕН

Смольникова Т.Ю., Нестерова О.Ю

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,

49010, м. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72

e-mail: smolntatyana@yandex.ru

Дослідження ракетної технології, має велике значення для розвитку авіаційно-космічної промисловості. Тверде ракетне паливо повинне мати надзвичайно стабільну швидкість горіння. Для досягнення цієї мети один з кращих способів є додавання каталізатора швидкості горіння в ракетне паливо.

В якості регуляторів швидкості горіння сумішевого ракетного твердого палива (СРТП) найбільш широко використовуються рідкі похідні фероцену, які мають достатню стабільність і термодинамічну спорідненість з паливною масою, мають високу каталітичну активність. 1,1'Діетилфероцен (ДАФ-2) використовується як присадка до палив, що підвищує швидкість їх горіння, в сумішевих твердих ракетних паливах – в якості штатного регулятора швидкості горіння .

Основним методом отримання ДАФ-2 є відновлення діацетилфероцену, який отримують при ацелюванні фероцену подвійним надлишком ацетилгалогениду. Таким чином, виробництво ДАФ-2 включає стадію отримання фероцену, стадію синтезу діацетилфероцену та стадію відновлення діацетилфероцену до діетилфероцену. Щоб отримати чистий і якісний діетилфероцен, необхідно використовувати очищений діацетилфероцен.

Основним методом очищення діацетилфероцена є його перекристалізація від таких домішок як моноацетилфероцен, фероцен. Перекристалізацію запропоновано проводити з суміші ацетон-вода в співвідношенні 1:3, оскільки моноацетилфероцен і фероцен в воді практично не розчиняються. Для підвищення розчинності діацетилфероцена додають ацетон. Діацетилфероцен-сирець розчиняють в водно-ацетоновій суміші при нагріванні до 60°C і фільтрують від домішок, що не розчинились. Потім, при охолодженні діацетилфероцен випадає в осад, а домішки залишаються на фільтрі. Тим самим ми отримуємо чистий продукт, для подальшого використання.

Для здійснення цього процесу на виробництві нами запропонований друк-фільтр RoLab, оснащений обігрівачем обечайкою, яка підтримує температуру суміші і дозволяє виконати дану операцію. Гарячий маточник з продуктом направляється в наступний друк-фільтр, де при перемішуванні відбувається охолодження маточного розчину і швидка кристалізація чистого продукту, який фільтрують і сушать в конічній сушарці.

ВИРОБНИЦТВО ФЕРОЦЕНУ. СТАДІЯ ОЧИСТКИ

Шуриберко К.В., Нестерова О.Ю.

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,

49010, м. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72

e-mail: k-shyrubenko@rambler.ru

Фероцен є металоорганічною сполукою з формулою $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$. Це тип металоорганічної хімічної сполуки, що складається з двох цикlopентадієнільних кілець, пов'язаних з центральним атомом металу.

Фероцен і його похідні використовують в якості паливних присадок для каталізу горіння, зниження величини димоутворювання, у вулканізації полімерних композицій, у фармацевтичній індустрії.

Головними способами синтезу фероцену є:

- реакція хлориду заліза і реактивом Гриньяра,
- реакція цикlopентадієну з пентакарбонілом заліза,
- реакція цикlopентадієну з хлоридом заліза і діетиламіном.

Фероцен можна очищати від домішок за допомогою сублімації та за допомогою перегонки з водяною парою. До останньої вдаються при необхідності очищення або виділення з реакційної суміші нерозчинних або важкорозчинних у воді висококиплячих органічних сполук. Переваги цього методу перед звичайною перегонкою або перекристалізацією особливо яскраво проявляються в тих випадках, коли очищається продукт забруднений великою кількістю смолистих домішок або який розкладається при температурі кипіння навіть під вакуумом, а також коли треба очистити продукт за температури набагато нижчої від температури його кипіння, тому очищати таким способом фероцен економічно вигідніше.

Для процесу перекристалізації використовується напірний фільтр, що обертається BHS (тип RPF), який призначений для безперервного напірного фільтрування. Обробка осаду (коржа) являє собою складний закритий процес, що складається з декількох незалежних один від одного етапів. Вивантаження фільтраційного осаду може проводитися при атмосферному тиску.

Поки барабан обертається, в напірному фільтрі можуть проходити різні стадії процесу. Після поділу суспензії на фільтрат і фільтраційний осад (корж) можливе виконання наступних робочих операцій:

- одно- або багатоступінчате промивання осаду;
- циркуляційне промивання;
- суспендування;
- заміна розчинника;
- випарювання, екстракція;
- механічна або термічна дегідратація фільтраційного осаду.

МОДИФІКАЦІЯ КРИСТАЛІЧНОЇ СТРУКТУРИ ТЕТРАЗЕНУ

Тихомирова І.А., Спорягін Е.О.

*Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,
49010, м. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72
e-mail: tihomirova778@bk.ru*

Тетразен – хімічна сполука $C_2H_6N_{10} \cdot H_2O$. Моногідрат 5-(4-амідин-1 тетразен) тетразолу.

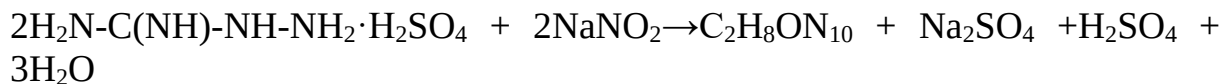
Жовтуваті клиновидні кристали. У насипному вигляді являє собою пухку кристалічну масу з насипною щільністю $0,45 \text{ г/см}^3$. Майже не розчинний у воді і в органічних розчинниках.

Має сильні вибухові властивості.

Тетразен, як ініціююча вибухова речовина, використовується в капсулях наколювальної дії в якості сенсibilізатору (збільшувач чутливості) до азиду свинцю або трінітрорезорцинат свинцю.

Відомий спосіб отримання тетразену: з аміногуанідин сульфату і нітриту натрію.

Даний спосіб заснований на осадженні кристалів речовини в результаті дозування підігрітого розчину аміногуанідин сульфату до підігрітому розчину нітриту натрію при підтримці температури в баку осадження $50-62^\circ\text{C}$. Вихід тетразен 65% .



Температура спалаху 160°C (при 5-секундної затримки).

Продукт, який отримують за даною технологією, має досить негативні експлуатаційні характеристики, серед них: голчаста форма кристалів, відсутність сипучості, вкрай низька насипна щільність ($0,40-0,45 \text{ г/см}^3$), висока електризуємість.

За технічною суттю і вирішенням задачі найбільш близьким до заявленого винаходу є спосіб одержання гранульованого тетразену, який утворюється в процесі змішування розчинів аміногуанідин сульфату і нітриту натрію з додаванням оцтової кислоти.

Реакційну масу нагрівають до $55-70^\circ\text{C}$ і витримують 60-90 хвилин.

В результаті отримують сипучий гранульований продукт, гранули («розетки») якого складаються з компактних агрегатів дрібних кристалів (вихід продукту $80-88\%$).

ПРИМЕНЕНИЕ ТОЧЕЧНОЙ ОТРЫВНОЙ ЛИТНИКОВОЙ СИСТЕМЫ В ПЕРЕРАБОТКЕ ПЛАСТМАСС МЕТОДОМ ЛИТЬЯ ПОД ДАВЛЕНИЕМ.

Овчинникова М.В., Суровцев А.Б.

Днепропетровский национальный университет имени Олеся Гончара

49010, г. Днипро, пр-т Гагарина, 72

E-mail: rita-ovchinnikova@mail.ru

Изделия из пластмасс стали постепенно завоевывать мир благодаря тому, что по своим качественным характеристикам они легко соперничают с такими материалами, как металлы, стекло и дерево, а по многим показателям и превосходят их. Собственно, свойства пластмасс как материала и послужили причиной интенсивного развития промышленного изготовления пластмассовых изделий.

На сегодняшний день наиболее популярный способ производства пластмассовых изделий - это литье пластмасс под давлением. Оно предполагает возможность автоматизации процесса, дает прекрасные результаты за небольшой промежуток времени и не нуждается ни в какой дополнительной работе с выпущенной продукцией.

Обычно полученные детали можно перерабатывать вторично, поэтому литье пластмасс является еще и экологичным процессом.

К преимуществам данной технологии можно отнести высокую точность получаемых изделий, возможность получать изделия сложной формы, большие тиражи изделий с относительной дешевизной единицы продукции. Недостатком является высокая стоимость технологического оборудования - пресс-формы, а также периодичность производства и необходимость использования ручного труда в процессе выгрузки готового продукта.

Нами предложено применение системы автоматического выталкивания изделий и отделения литника от него, за счет литья через точечный литник, с помощью чего возможно отделение литника от изделия в процессе разъема формы. Как правило, место отрыва литника не требует последующей механической обработки. Это приводит к уменьшению затрат ручного труда и обеспечивает бесперебойную работу.

СЕКЦІЯ
ХАРЧОВА ХІМІЯ ТА СУЧАСНІ
ХАРЧОВІ ТЕХНОЛОГІЇ

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

Секретар: Применко Владислав Геннадійович, ст. викладач каф. харчових
технологій ДНУ

**КОМПУНУВАННЯ ЗАЛУ РЕСТОРАНУ ПРИ 4-Х ЗІРКОВОМУ
ГОТЕЛІ BLUE REEF, РАЙОН MARSA ALAM, EGYPT**

*Бабіч П.В., Багалій І.В., Мельников К.О., Меркулова О.С.
Дніпропетровський національний університет ім. О. Гончара,
49010, м. Дніпро, просп. Гагаріна, 72*

Розвиток туристичної галузі сьогодні є надзвичайно актуальним, оскільки туризм є одним із важливих чинників стабільного і динамічного збільшення надходжень до бюджету. Стан розвитку галузі не відповідає потенційним можливостям нашої країни, яка має все необхідне для розвитку туристської індустрії.

У контексті вище зазначеного актуальним є розміщення в Україні готельно-ресторанних комплексів, розрахованих на обслуговування туристів, а також можливість варіації розстановки обідніх столів у залі ресторану в залежності від сезону.

У даній роботі ми будемо розглядати готельно-ресторанний комплекс «Blue Reef», що розміщений неподалік Червоного моря. Він був споруджений у 2003 році. Остання реновація відбувалася у 2014 році. До складу комплексу входить Red Sea Restaurant – ресторан приблизно на 300 осіб з системою «все включено», яка діє з 10:00 до 23:00. Подаються напої місцевого виробництва: безалкогольні напої, місцеве пиво, вино, чаювання з 17:00 до 18:00. Ресторан має 2 торгових зали. Додатково там знаходиться закрита веранда.

Одним з наслідків реновації була зміна розміщення столів з урахуванням збільшення кількості відвідувачів, а саме – збільшення кількості 6-місних столів до 10, оскільки у закладах ресторанного господарства подібного типу кількість таких столів за нормою складає 3-4 шт. на 100 посадочних місць.

Таким чином, можна зробити висновок, що для нашої країни було б перспективним розміщення подібного готельно-ресторанного комплексу.

РОЗРОБКА ТЕХНОЛОГІЇ ВИРОБНИЦТВА КАРАМЕЛЬНОГО ТОПІНГУ, ЗБАГАЧЕНОГО СЕЛЕНОМ

Багалій І.В., Меркулова О.С., Головка М.П., Применко В.Г.

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара

49010, м. Дніпро, просп. Гагаріна, 72,

e-mail: vlad-primenko@yandex.ru

Селен чинить антиоксидантну дію на організм людини та захищає його від виникнення ряду захворювань: атеросклерозу, онкологічних захворювань тощо. Саме тому, актуальним є збагачення продуктів харчування речовинами органічного походження, які містять селен, і введення таких продуктів у раціон людини.

За останні десять років в Україні популярності серед населення здобули різноманітні топінги. До них відносять солодкі кольорові сиропи, які відрізняються вмістом смакових, ароматичних добавок і густиною. У структурах ресторанного господарства формату HoReCa та домогосподарствах їх використовують для прикрашання і надання визначених і/або додаткових смакових властивостей десертам, каві та іншим напоям. Перспективним напрямом є розроблення технології солодких соусів, а саме топінгів функціонального призначення, що передбачає поєднання традиційної сировини з дієтичними добавками з метою вирішення завдання щодо підвищення харчової цінності, зниження дефіциту макро- та мікроелементів.

Серед усього асортименту пропонованих сучасною харчової індустрією топінгів особливе місце поряд з шоколадним і фруктово-ягідними належить карамельному. Як об'єкт моделювання було обрано карамельний соус. У якості дієтичної добавки та джерела селену виступає розроблена нами інноваційна добавка дієтична селен-білкова (ДДСБ) «Неоселен», що містить у своєму складі органічні сполуки селену. Технологія виробництва карамельного топінгу, збагаченого селеном складається з наступних етапів: нагрівання цукру з водою до розчинення і утворення карамельного кольору, поступове додавання вершкового масла з інтенсивним перемішуванням, закінчення теплової обробки і обережне додавання вершків при безперервному помішуванні, охолодження до кімнатної температури і додавання ДДСБ «Неоселен» в гідратованому вигляді для більш рівномірного її розподілення по масі.

Аналіз розробленої продукції показав, що введення ДДСБ «Неоселен» у солодкі соуси типу топінги: дозволяє розширити асортимент продукції оздоровчого призначення, не впливає на органолептичні показники якості розробленого продукту у порівнянні з соусом-аналогом. Топінг, виготовлений згідно запропонованої технології, може бути рекомендований для широкого вживання як дітей так і дорослих.

ДОСЛІДЖЕННЯ ВОДОПОГЛИНАЛЬНОЇ ТА ВОДОУТРИМУВАЛЬНОЇ ЗДАТНОСТІ ПРОДУКТІВ ПЕРЕРОБКИ ГОРІХІВ

Новік Г.В.¹, Курач Ю. О.¹, Шидакова-Каменюка О.Г.²

¹ Дніпропетровський національний університет,
49010, м. Дніпро, пр. Гагаріна, 72

² Харківський державний університет харчування та торгівлі
anna.novik.82@mail.ru

На сьогодні горіхи є перспективним видом нетрадиційної харчової сировини, зокрема для олійно-жирової промисловості. Процес вилучення олій передбачає отримання супутніх вторинних продуктів – шроту або жмиху, які можуть використовуватись в різних галузях харчової промисловості для збагачення виробів корисними для організму людини речовинами. Особливістю хімічного складу вторинних продуктів переробки горіхів є наявність значної кількості харчових волокон, яким притаманні високі гідрофільні властивості. Це необхідно враховувати у разі виготовлення будь-яких виробів з застосуванням таких добавок.

У зв'язку з цим метою досліджень було вивчення водоутримувальної (ВУЗ) та водопоглинальної (ВПЗ) здатностей вторинних продуктів переробки горіхів – дієтичних добавок «Шрот кедрового горіху» (ШКГ) та «Шрот грецького горіху» (ШГГ).

Зазначені показники оцінювали за кількістю вологи, що можуть утримати добавки за температури 20°C (ВУЗ) або в інтервалі температур від 30°C до 90°C (ВПЗ). ВУЗ та ВПЗ визначали шляхом центрифугування за відношенням маси води, зв'язаної добавкою, до маси добавки.

Дослідження показали, що водоутримувальна здатність ШГГ становить 272 %, що на 21,6 % вище ніж у ШКГ (ВУЗ дорівнює 224 %). Це можна пояснити тим, що харчові волокна ШГГ представлені в основному целюлозами та геміцелюлозами, які містять значну кількість гідроксильних груп, що зумовлює їх високу гідрофільність. Харчові волокна ШКГ на 60% представлені лігніном, здатність якого до поглинання та утримування вологи значно нижча. Що корелює з дослідженнями водопоглинальної здатності добавок. Відмічено підвищення значення ВПЗ у обох досліджуваних зразках за температури 90°C, що зумовлене активізацією набухання харчових волокон. Зокрема, значення ВПЗ для ШКГ становить 368 %, а для ШГГ – 389 %, тобто на 5,8 % вище. Це можна пояснити покращенням здатності лігніну до утримування вологи за умов підвищення температури.

Таким чином визначено, що дієтичним добавкам ШКГ та ШГГ притаманні високі водоутримувальні та водопоглинальні властивості, що необхідно враховувати під час розробки технологій харчових продуктів з їх використанням.

ПЕРСПЕКТИВИ ВИКОРИСТАННЯ ДДСБ «НЕОСЕЛЕН» У ТЕХНОЛОГІЇ ПЛОДОВО-ЯГІДНИХ СОУСІВ ОЗДОРОВЧОГО ПРИЗНАЧЕННЯ

Меркулова О.С., Багалій І.В., Головка М.П., Применко В.Г.
Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара
49010, м. Дніпро, просп. Гагаріна, 72
e-mail: vlad-primenko@yandex.ru

У сучасних умовах харчування має відповідати вимогам раціонального харчування, сприяти підтримці задовільного стану здоров'я тощо. Серед продукції ресторанного господарства та харчової промисловості важливе місце займають соуси, які набувають певного значення під час виготовлення багатьох страв або їх презентації.

Аналіз ситуації, що склалася на продовольчому ринку України, свідчить, що асортимент плодово-ягідних соусів украї вузький. Розроблення новітніх технологій і використання сировини вітчизняного виробництва дасть можливість знизити собівартість, розширити асортимент та задовольнити потреби споживача.

За даними досліджень підприємств, які виготовляють соусну продукцію, кожний третій споживач ладен увести соусну продукцію із новими смаками та добавками в щоденне меню з метою його урізноманітнення, поліпшення його корисності. Спираючись на побажання респондентів збалансувати хімічний склад фруктових систем, було прийняте рішення про уведення до рецептурного складу соусів інгредієнтів, здатних їх збагатити на органічні сполуки селену.

Нами була розроблена рецептура вишневого соусу «Селенового», прототипом якого є рецептура №837 «Соус вишневий» за Збірником рецептур страв та кулінарних виробів. До складу розробленого соусу добавка дієтична селен-білкова (ДДСБ) «Неоселен», яка містить селен (на 1000 г добавки 7,89 г селену). ДДСБ вносили, виходячи із середньодобової потреби у селені: на 100 г соусу – 17,5 мг добавки.

Технологія приготування соусу полягає в наступному: ягоди приймають, сортують, видаляють плодоніжку та кісточку, промивають, додають цукор та залишають при температурі 8...10°C на 2...3 год для виділення соку, після чого варять 15...20 хв. Готовий соус охолоджують і, ретельно перемішуючи, додають ДДСБ «Неоселен» у гідратованому вигляді.

Кількість добавки, що уводиться, не змінює органолептичні властивості готового продукту.

Вищезазначені фактори обумовлюють ефективність створення нових оздоровчих продуктів, зважаючи на те, що на сьогодні гостро поставлена проблема селенодефіциту та, беручи до уваги ненасиченість ринку плодово-ягідних соусів.

АНАЛІЗ РЕСУРСНОЇ ПРОТОПЕКТИНОВОЇ СИРОВИНИ ДЛЯ ОТРИМАННЯ ПЕКТИНОВОГО КОНЦЕНТРАТУ

Трепядько Д.О., Корж Р.В., Бортишевський В.А.

Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України,

02090, Київ, вул Мурманська, 1

e-mail: trepadko.d@gmail.com

Пектин являє собою цінну сировину для виробництва пектинових клеїв для буріння, текстилю, формування і закалювання деталей металообробної промисловості, поліграфічних матеріалів, а також джерело D-галактуронової кислоти. Завдяки здатності до комплексоутворення з важкими металами пектин є незамінною речовиною у виробництві фармацевтичних продуктів лікувально-профілактичного призначення. В харчовій промисловості він застосовується як структуроутворювач і згущувач, зокрема, при виробництві желейних виробів (мармеладу, зефіру), фруктових желейних консервів (конфітури, джеми, повидло, начинки), кисломолочних продуктів (йогуртів і начинка до них), десертів, морозива, спреда, майонезу, кетчупів. В косметичній промисловості пектин використовують як структуро- і гелеутворювач, емульгатор, стабілізатор рН, антиоксидант, плівкоутворювач і зволожуючий агент.

Виробництво пектину в світі досягає 28 - 30 тис. т / рік. Третину світового продукту складає пектин яблучного походження, решта — цитрусового. Як сировину для виробництва пектину можна застосовувати також буяковий жом, кошики соняшника, відходи слив, груш, айви, моркви, перцю, гарбузів, баклажанів. Вітчизняне промислове виробництво стандартизованого харчового пектину відсутнє. Основними причинами відсутності пектинового виробництва в харчовій промисловості України є застосування малоефективних методів концентрування та очищення пектинових екстрактів, відсутність вискоєфективного енергозощадного обладнання пектинового виробництва. Тому розроблення і впровадження ефективної комплексної технології переробки рослинних відходів з отриманням високоякісного пектинового концентрату є актуальним завданням.

Мета роботи полягала у дослідженні ресурсної сировини для отримання пектинового концентрату у середовищі надкритичного флюїду та доведення його до стандартизованих нормативів. Було оцінено наявну в Україні викидну протопектинової сировини, виконано її вибір і збір за методом середньої вибірки у кількостях, необхідних для лабораторних досліджень (від 0,10 до 0,20 кг). Зібрану сировину методами технічного і елементного аналізів було досліджено на вологість, вміст карбону, гідрогену, сульфуру, нітрогену, загального вмісту білків, загальну зольність, а також вміст окремих мікроелементів.

ДОСЛІДЖЕННЯ ВУГЛЕВОДНОГО СКЛАДУ ПРОДУКТІВ ПЕРЕРОБКИ ГОРІХІВ

Новік Г.В.¹, Петова О.М.¹, Шидакова-Каменюка О.Г.²

¹ Дніпропетровський національний університет,
49010, м. Дніпро, пр. Гагаріна, 72

² Харківський державний університет харчування та торгівлі
anna.novik.82@mail.ru

На сьогоднішній день актуальним є створення борошняних кондитерських виробів збагачених на необхідні для організму людини речовинами. Цінним джерелом таких речовин є продукти переробки горіхів, зокрема, що залишається після видалення з них олій.

У зв'язку з цим метою досліджень було вивчено вуглеводний склад продуктів горіхової сировини, а саме дієтичних добавок «Шрот кедрового горіху» (ШКГ) та «Шрот грецького горіху» (ШГГ).

Встановлено, що досліджувані зразки, майже не відрізняються за вмістом вуглеводів, зокрема до складу ШКГ входить 45,86%, до ШГГ – 45,19%. Вуглеводний склад добавок наведено у таблиці.

Таблиця – Вуглеводний склад продуктів переробки горіхів, %

Найменування речовини	ШКГ	ШГГ
Моноцукриди	3,67	6,23
Олігоцукриди	7,56	12,53
Крохмаль:	15,84	15,45
у т.ч. амілоза	11,76	1,03
амілопектин	4,08	14,42
Харчові волокна:	18,79	10,99
у т.ч. геміцелюлози	12,65	5,16
целюлоза	0,9	1,85
лігнин	0,04	0,025
пектинові речовини	5,2	3,95

Відмічено, що ШГГ містить більшу кількість моно- та олігоцукридів. За вмістом крохмалю досліджувані зразки майже не відрізняються, але крохмаль ШКГ в основному представлений амілозою, а ШГГ – амілопектином. Також добавки характеризуються високим вмістом харчових волокон.

Наявність крохмалю та харчових волокон у досліджуваних продуктах переробки горіхів значною мірою буде зумовлювати поведінку зазначених добавок у різних технологічних системах, тобто перспективними є подальші дослідження у напрямку вивчення функціональних властивостей ШКГ та ШГГ.

ПЛОДОВО-ОВОЧЕВІ СУХІ ЕКСТРАКТИ У РАЦІОНАХ ХАРЧУВАННЯ МОЛОДІ

Грецька О. В., Кондратюк Н. В.

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

Плоди і овочі містять багато вітамінів, мінеральних речовин, органічних кислот, харчових волокон та інших речовин, необхідних нашому організму. Кожному представнику плодово-овочевої групи притаманний власний вітамінний склад.

Але окрім знань про кількісний та якісний вітамінний склад ґрунтових та садових культур, необхідно бути обізнаними про зміни цього складу під час зберігання та у ході різних видів термічної обробки. Так, було проведено аналітичний огляд існуючої інформації про вплив різних видів кулінарної обробки на корисні складові овочів і зроблено висновки, що найбільшою мірою вітаміни зберігаються не тільки у свіжих овочах та фруктах, а ще у висушених за асептичних умов та за невисоких температур (55...60 °C). Саме сухі плодово-овочеві (екстракти) порошки є найдоцільнішими з погляду вітамінізації раціонів харчування студентства. Плодово-овочеві сухі екстракти є постачальниками мінеральних речовин, необхідних для покращення метаболізму: калію, кальцію, магнію, фосфору, заліза, та ряду мікроелементів. Безцінна користь сухих екстрактів полягає в тому, що вони містять органічні кислоти (яблучну, лимонну та ін.), які стимулюють секрецію травних залоз та позитивно впливають на процеси травлення.

Плодово-овочеві сухі екстракти зберігають увесь корисний спектр дії свіжих продуктів, проте мають досить тривалі строки зберігання. Тому їх можна рекомендувати у якості збагачувальних компонентів або сумішей до будь-якої страви.

Крім того, наразі опрацьовується технологія виготовлення соусів, паст та пюре на основі плодово-овочевих екстрактів; розробляються технологічні схеми та здійснюється підбір обладнання і устаткування для створення умов максимального збереження мікробіологічної чистоти та вітамінного складу готових продуктів.

**РОЛЬ ХАРЧОВИХ ПРОДУКТІВ
З ПРОБІОТИЧНИМИ МІКРООРГАНІЗМАМИ
У ВИРІШЕННІ ПРОБЛЕМ ХАРЧУВАННЯ СТУДЕНТІВ**

Поліванов Є.А., Кондратюк Н. В.

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

Проблема харчування студентів в Україні є актуальною і потребує якнайшвидшого вирішення. Підвищена розумова діяльність, висока фізична активність, швидкий темп життя – все це призводить до «перекусів» і найчастіше продуктами з підвищеним вмістом вуглеводів, жиру, що негативно відображається на молодому організмі і спричиняє його розлади. Найбільше від неправильного харчування страждає шлунково-кишковий тракт (ШКТ).

Одним з рішень цієї проблеми є розробка та введення у раціони харчування молоді пробіотичних продуктів, як важливого засобу реабілітації та профілактики захворювань ШКТ, а також підтримки організму, особливо у періоди підвищених фізичних та розумових навантажень.

Для того, щоб підтримувати і відновлювати своє здоров'я, пробіотичні продукти харчування на основі живих мікроорганізмів, їх метаболітів, та середовищ, в яких вони реалізують свої корисні властивості, край необхідно споживати щодня. Зараз спостерігається тенденція до змін засобів внесення пробіотичних культур до рецептурної суміші загальнодоступних продуктів. Виробники застосовують різні способи доставки мікрокультур для того, щоб вони мали змогу принести якомога більше користі для тієї вікової групи населення, для якої призначені.

Важливим також є формування нормативної бази для розробки й використання функціональних продуктів на основі пробіотиків, організація комплексу заходів, направлених на забезпечення населення ефективними, безпечними і доступними засобами корекції порушень кишкового та інших мікробіоценозів, а також пропаганда, популяризація та розширення інформації про спектр та дію пробіотичних продуктів, їх користь для організму, особливо для молодого.

РЕГУЛЮВАННЯ ХАРЧОВИХ РАЦІОНІВ ШЛЯХОМ СПОЖИВАННЯ ПРИРОДНИХ ПІДСОЛОДЖУВАЧІВ

Падалка А.М., Кондратюк Н. В.

*Дніпропетровський національний університет ім. Олеся Гончара
49010, м. Дніпро, пр. Гагаріна, 72, Україна*

Надмірне споживання солодкої їжі завжди є причиною ожиріння, цукрового діабету, гіпертонії, ішемічної хвороби серця, аритмії та серцевої недостатності, а також інсульту та інфаркту. Однак відмовитись від солодкого людина не в змозі, оскільки солодощі знімають нервові навантаження, стимулюючи утворення ендорфінів – гормонів, що викликають у людини відчуття задоволення, щастя, гарного настрою тощо. В результаті відсутності солодкого смаку у харчуванні з'являється пригнічений настрій, депресія, агресивність, до того ж цукор є суттєвим джерелом енергії.

Слід пам'ятати, що майже усі солодощі (цукерки, кондитерські вироби, цукор, мед тощо) підвищують рівень цукру в крові, тому, у разі загострення проблеми виникнення цукрового діабету, виключаються з харчового раціону. Технологіями харчування було запропоновано альтернативний підхід – внесення до харчової суміші підсолоджувача - солодкого екстракту з листя стевії.

Стевія не просто чудово замінює цукор, вона є унікальною природною цілительською багатьох захворювань. Стевія не тільки надає організму вітаміни, мінерали, ферменти, амінокислоти, а ще й зменшує відчуття голоду, тому входить до складу багатьох фітонапоїв, призначених для схуднення. Крім того, вона має антисептичну дію, оскільки здатна пригнічувати бактеріальні та вірусні мікроорганізми. Однією з фізіологічних особливостей рослини є захист організму людини від несприятливих умов зовнішнього середовища – виведення радіонуклідів, важких металів, нейтралізація та видалення токсинів, шлаків, покращення роботи серцево-судинної системи, щитовидної залози, нормалізація мікрофлори кишечника після тривалого прийому антибіотиків, зміцнення імунітету та нервової системи.

Солодку медову траву можна вживати без обмежень, орієнтуючись лише на потребу організму в солодких продуктах.

Отже, листя стевії та екстракт (стевіозид) – унікальні замінники цукру: смачні, натуральні, корисні для здоров'я тих, хто невдовзі збирається стати висококваліфікованими кадрами на ринку праці нашої держави. Треба лише прислухатись до природи!

СЕКЦІЯ

ФІЗИЧНА ТА НЕОРГАНІЧНА ХІМІЯ

Керівник: Коробов Володимир Іванович, зав. каф. фізичної та неорганічної хімії ДНУ, к. х.н., доц.

Секретар: Чернушенко Олена Олександрівна, доцент каф. фізичної та неорганічної хімії ДНУ, к.х.н., доц.

**БУДОВА КОМПЛЕКСІВ ХРОМУ (III) З ЕТИЛГЛІЦИНОМ,
АЛАНІНОМ ТА ФЕНІЛАЛАНІНОМ**

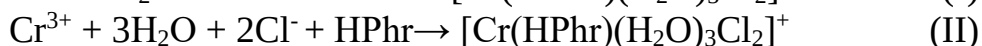
Жулковська Е.І., Чернушенко О.О.

*Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,
49010, м. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72*

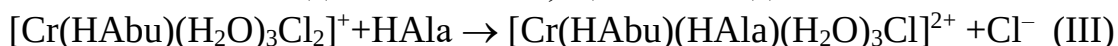
e-mail: zhulkovskaya@list.ru

Найважливіша біологічна роль хрому полягає в регуляції синтезу жирів, вуглеводного обміну та рівня глюкози в крові, він здатний впливати на гомеостаз холестерину. При дефіциті хрому порушується здатність включення амінокислот гліцину, серину, метіоніну і α -аміномасляної кислоти в серцевий м'яз.

Комплексні сполуки хрому (III) з монодентатно координованим етилгліцином та фенілаланіном отримали прямою взаємодією хлориду хрому(III), узятих в молярному співвідношенні метал: амінокислота 1:1 :



При взаємодії комплексу $[\text{Cr}(\text{HAbu})(\text{H}_2\text{O})_3\text{Cl}_2]^+$ з α -аланіном, відбувається заміщення йону хлору амінокислотою. У такий спосіб отримано змішанолігандний комплекс, що містить дві амінокислоти:



Формули сполук I-III виведені на підставі елементного аналізу, електронної та ІЧ спектроскопії, даних кондуктометричних вимірювань. Октаєдричне оточення хрому (III) встановлено на підставі даних електронної спектроскопії: спостерігаються смуги, зумовлені d-d переходами, дозволеними за спіном ${}^4\text{T}_{1g} \leftarrow {}^4\text{A}_{2g}$ та ${}^4\text{T}_{2g} \leftarrow {}^4\text{A}_{2g}$. Результати розрахунку параметрів кристалічного поля: $Dq = 1640 \text{ cm}^{-1}$, $B = 627 \text{ cm}^{-1}$ і $\beta = 0.61$ для (I), $Dq = 1700 \text{ cm}^{-1}$, $B = 553 \text{ cm}^{-1}$ та $\beta = 0.54$ для (II), $Dq = 1740 \text{ cm}^{-1}$, $B = 701 \text{ cm}^{-1}$ і $\beta = 0.68$ для (III). Монодентатна координація амінокислот за допомогою кисню карбоксильної групи комплексів I-III підтверджена даними ІЧ спектроскопії: відсутні смуги поглинання валентних коливань $\nu(\text{COOH}) \sim 1730 \text{ cm}^{-1}$; відмічається значна різниця $\nu_{\text{as}}(\text{COO}^-) - \nu_{\text{s}}(\text{COO}^-)$, характерна для координованого карбоксилу: 220 cm^{-1} для сполуки $[\text{Cr}(\text{HAbu})(\text{H}_2\text{O})_3\text{Cl}_2]^+$, 210 cm^{-1} для сполуки $[\text{Cr}(\text{HPhr})(\text{H}_2\text{O})_3\text{Cl}_2]^+$ та 244 cm^{-1} для сполуки $[\text{Cr}(\text{HAbu})(\text{HAla})(\text{H}_2\text{O})_3\text{Cl}]^{2+}$; спостерігається набір частот для протонованої та незв'язаної з металом аміногрупи $-\text{NH}_3^+$ групи: широка смуга що відповідає валентним коливанням $\nu(\text{NH}) 2800 - 3210 \text{ cm}^{-1}$, та деформаційним коливанням $\delta_{\text{d}}(\text{NH}_3^+) \sim 1580 \text{ cm}^{-1}$. Отримано комп'ютерну модель просторової будови сполуки (II-III). Розраховані геометричні параметри комплексу (II-III) з використанням HF/6-31.

КІНЕТИКА ТА МЕХАНІЗМ ЕЛЕКТРОВІДНОВЛЕННЯ АКВАКОМПЛЕКСІВ КОБАЛЬТУ(II)

Антипова А.Ю., Борщевич А.О., Варгалюк В.Ф., Борщевич Л.В.
Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,
49010, м. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72
e-mail: Borshchevich@i.ua

Електролітичні кобальтові покриття знайшли застосування в техніці завдяки комплексу цінних фізико-хімічних властивостей. Кобальт зазвичай використовується для виготовлення деталей, до яких застосовують вимоги високої міцності при підвищених температурах, корозійної стійкості в атмосфері газів, що містять сірку, визначених магнітних властивостей. Різноманітні магнітні властивості кобальтових покриттів використовують в космічній і комп'ютерній техніці, а високу відбивну здатність при виготовленні рефлекторів і дзеркал.

Метою роботи було встановлення механізму та кінетичних особливостей перебігу процесу електровідновлення аквакомплексів кобальту(II) із кислих розчинів.

На підставі аналізу результатів квантово-хімічних розрахунків (GAMESS, метод функціоналу густини у версії B3LYP) кластерів $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_n]^z(\text{H}_2\text{O})_{6-n}$ для $z=0,1,2$ і $n=1\div 6$, показано, що електровідновлення аквакомплексів $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ відбувається стадійно з утворенням рівноцінних інтермедіатів $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4]^+$, $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_3]^+$ і кінцевого продукту $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})]^0$. Йони кобальту не виявляють каталітичну дію на реакцію виділення водню, проте, один із проміжних продуктів їх двоелектронного електровідновлення схильний до участі в реакції, в наслідок якої утворюється гідроксид. Показано вплив на механізм електровідновлення аквакомплексів кобальту(II) акрилат-аніонів.

Кінетичні дослідження процесу електровідновлення аквакомплексів кобальту(II) із перхлоратних розчинів на мідному електроді дозволили встановити, що на катодній ділянці вольтамперограми спостерігається наявність двох хвиль: перша при $E=-1,0$ В, а друга при потенціалі близько $-1,5$ В.

Введення у розчин акрилової кислоти приводить до появи на катодній гілці лише однієї характерної хвилі, яка з'являється при $E=-1,25$ В і її висота закономірно зростає при збільшенні концентрації органічної кислоти. Було встановлено, що сама акрилова кислота є каталізатором реакції виділення водню.

Виявлено незначний вплив температури на електровідновлення аквакомплексів кобальту(II).

ЕЛЕКТРОДНІ ПРОЦЕСИ ЗА УЧАСТІ КАТІОНІВ КУПРУМУ У ПРИСУТНОСТІ МАЛЕЇНОВОЇ КИСЛОТИ

Замишляєнко Я. М., Щукін А. І., Варгалюк В.Ф., Полонський В.А.
Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,
49010, м. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72
e-mail: zamyshlyayenko@cf.dnulive.dp.ua

У попередніх дослідженнях було виявлено, що присутність акрилової кислоти в електроліті міднення сприяє утворенню дисперсних мідних осадів. Це пояснюється утворенням хімічно стійких сполук з іонами Cu^+ . Метою даної роботи стало дослідження впливу найпростішого двоосновного аналогу акрилової кислоти – малеїнової кислоти (МК) – на процес електроосадження міді з водних розчинів.

Методом циклічної вольтамперометрії визначено вплив МК на електрохімічну поведінку катіонів купруму. Як видно з рис. 1, при додаванні МК катодний пік зміщується на 100 мВ у бік більш від'ємних потенціалів і продовжує зміщуватись з ростом концентрації. Його висота помітно зменшується, він стає пологим та менш виразним. Це загалом говорить про гальмування катодного процесу. Анодний пік зміщується на 50 мВ у бік більш позитивних потенціалів, а його положення не змінюється зі зростанням концентрації МК, але висота при цьому збільшується. Враховуючи вищезазначене, можна сказати, що присутність малеїнової кислоти спричиняє гальмування процесу електровідновлення Купруму на титанонітридному електроді, але прискорює анодне розчинення міді у порівнянні з базовим розчином.

За допомоги електронної мікроскопії виявлено, що введення малеїнової кислоти призводить до зменшення розмірів кристалітів, з яких складається осад електролітичної міді, порівняно з покриттям, отриманим із базового розчину (рис. 2).

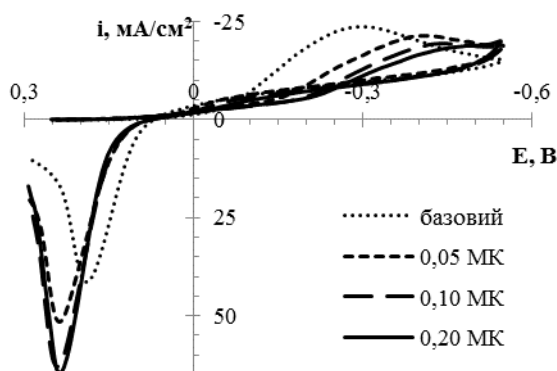


Рис. 1 – Вольтамперні залежності, отримані на титанонітридному електроді у базовому розчині та у присутності МК різної концентрації.

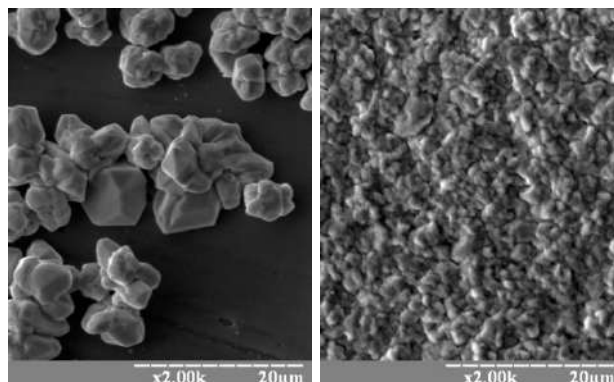


Рис. 2 – РЕМ катодних мідних осадів, отриманих на титанонітридному катоді за густини струму 2 mA/cm^2 у базовому розчині (а) та за присутності 0,2 моль/л МК (б).

**КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ
КОМПЛЕКСОУТВОРЕННЯ КАТІОНІВ КОБАЛЬТУ(II)**

Попов А.Ю., Борщевич А.О., Варгалюк В.Ф., Борщевич Л.В.
*Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,
49010, м. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72
e-mail: Borshchevich@i.ua*

Комплексні сполуки перехідних металів – найважливіший клас речовин, які знаходять широке застосування у гальванотехніці. Визначення констант нестійкості комплексів (К) відіграє важливу роль в обґрунтуванні вибору ліганда, а також визначенні складу електроліту й співвідношення компонентів при нанесенні покриттів металами та їх сплавами. Наявність інформації про йонні рівноваги в розчинах електролітів, а також про їх кількісні характеристики є неодмінною умовою гнучкого управління процесом формування покриття заданого складу і структури.

Неодноразово робилися спроби знаходження кореляційних залежностей між величинами К і фізичними властивостями комплексів. Одним з параметрів, який застосовується при аналізі і прогнозуванні реакційної здатності комплексних сполук в певних типах хімічних процесів, зокрема – в каталітичних, є ефективний заряд центрального атома (z^*M). Ми вважали за доцільне розглянути на прикладі одного з представників зазначеної групи катіонів, а саме – катіонів Co^{2+} , взаємозв'язок між z^*M і логарифмом ступінчастих констант стійкості для заміщених різними лігандами аквакомплексів кобальту.

Вибір в якості об'єкта дослідження комплексів Co^{2+} обумовлений практичним інтересом до процесів виділення кобальту і його сплавів з комплексних електролітів, науково обґрунтований вибір складу яких неможливий без надійних відомостей про їх термодинамічні характеристики.

На підставі аналізу результатів квантово-хімічних розрахунків (з використанням програмного пакету GAMESS методом функціоналу густини у версії B3LYP) комплексних сполук іонів Co^{2+} з H_2O , NH_3 , OH^- , F^- , Cl^- , Br^- , I^- , Ac^- , CN^- , Alk^- загального виду $[Co(H_2O)_{6-n}L_n]^{2+nx}$ показано, що результат взаємодії їх структурних складових синхронно відображається на величинах ефективного заряду центрального атома (z^*_{Co}) і на величинах констант стійкості комплексів. Це зумовлює існування лінійних кореляційних залежностей $lgK = A + B \cdot z^*_{Co}$, параметри яких визначаються природою донорних атомів лігандів. Знайдені константи А та В для хлору (-6,3; 5,8), нітрогену (125,4; -69,9) й кисню (30,2; -17,7). Обчислені константи стійкості комплексів Co^{2+} з акрилат-іонами, відомості про які відсутні в літературі: $lgK_1=1,2$ та $lgK_2=4,3$.

КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЗАРОДЖЕННЯ І РОСТУ КЛАСТЕРІВ МІДІ ПРИ ЇЇ ЕЛЕКТРОВІДНОВЛЕННІ У ПРИСУТНОСТІ АКРИЛОВОЇ КИСЛОТИ

Осокін Є.С.*, Щукін А.І., Полонський В.А.

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара,
49010, м. Дніпро, пр-т Гагаріна, 72
e-mail: osokin@cf.dnu.dp.ua

Особливе місце в удосконаленні процесів гальванотехніки займає розвиток теорії дії органічних добавок, що застосовуються для покращення параметрів електролізу і властивостей металічних покриттів. Але й досі механізм впливу поверхнево-активних речовин на стадії розряду іонів металів остаточно не вивчений. Певного прогресу в цій сфері можна досягти, використовуючи сучасні методи квантово-хімічного моделювання.

У попередніх квантовохімічних дослідженнях було визначено, що при відновленні йонів Cu^{2+} за присутності акрилової кислоти (АК) утворюються π -комплекси Cu^+ , які при подальшому відновленні до Cu^0 зберігають структуру цього комплексу. Тобто кінцевим продуктом електровідновлення за даних умов є π -комплекс CuAK , де мідь знаходиться у нульовому ступені окиснення. Метою даної роботи було отримання даних щодо формування і подальшого росту кластерів міді, які формуються при електроосажденні за присутності АК.

Моделювання проводилось за допомогою програмного пакету Gaussian 09, з використанням функціоналу B3LYP. Сольватаційні ефекти враховувалися за допомогою моделі поляризаційного континууму. Атоми міді описувались базисним набором Wachters+f. Для атомів Карбону, Оксигену та Гідрогену застосовували набір 6-311G(d,p). У якості структурної одиниці при побудові кластеру використовували комплекс CuAK , а моделювання його росту проводилось шляхом послідовного приєднання частинки CuAK . Аналіз результатів розрахунків показав, що у ході росту кластеру π -зв'язок між атомами Купруму та молекулами АК

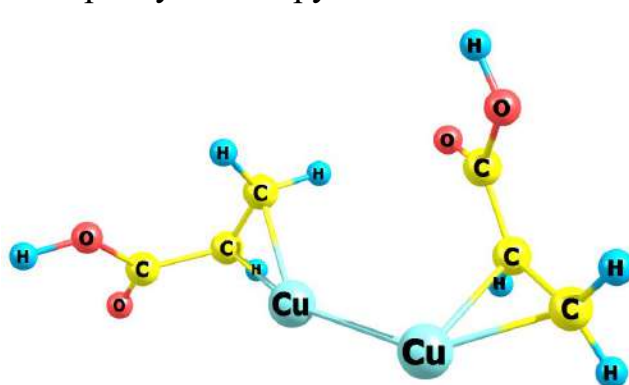


Рис. 1. Оптимізована структура кластеру $\text{Cu}_2(\text{AK})_2$

зберігається (рис. 1), при цьому останні формують оболонку навколо зростаючого кластеру. Така органічна оболонка може блокувати активні центри, що повинно призводити до формування дендритоподібних гальванічних осадів, що і спостерігається на практиці.

- Науковий керівник: д.х.н., проф. Варгалюк В.Ф.

XV всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 22-25 травня 2017 р.

Аліхонов А.А. 34	Кабашна К.В. 18	Пльонсак П.П. 7
Алхімова М. М. 20	Карповець А.В. 5	Поліванов Є.А. 56
Антипова А.Ю. 60	Кирилова Д.В. 39	Полонський В.А. 61,63
Асоян Д. Г. 26	Коваленко С.О. 36	Попов А.Ю. 62
Атауллаєв З.М. 29	Колісник Т.І. 38	Прачова М.С. 6
Бабіч П.В. 49	Кондратюк Н. В. 55,56,57	Применко В.Г. 50,52
Багалій І.В. 49,50,52	Корж Р.В. 53	Присяник О.В. 30
Бевзюк Е.В. 10	Кравцева А.П. 21	Решетняк А. В. 37
Біліченко М.О. 33	Крамарьов С. М. 35	Савостьянок Д.О. 5
Бондаренко М. А. 8	Кулик Є.Ю. 14	Садикова С.Б. 29
Бондаренко Я. С. 40	Кулішова Ю. О. 22	Самойленко В.О. 32
Бортишевський В.А. 53	Курач Ю. О. 51	Сидорова Л.П. 7,13
Борщевич А.О. 60,62	Курязов Р.Ш. 29	Смітюк Н.М. 21,22
Борщевич Л.В. 60,62	Куцик-Савченко Н.В. 30	Смольникова Т.Ю. 44
Варгалюк В.Ф. 60,61,62,63	Левандовський І.А. 27,28	Соколюк К.С. 41
Вишнікін А.Б. 18,24	Ліб О.С. 30	Спорягін Е.О. 46
Волобой А.О. 7	Ляшенко Ю.Ю. 19	Снигур Д.В. 10
Гайдай О.В. 27,28	Матвєєва В.А. 42	Суровцев А.Б. 47
Головко М.П. 50,52	Маторіна К.В. 14,16,17	Тарабара І. М. 41
Гончарова І.В. 5	Мельников К.О. 49	Тахиров Ю.Р. 29
Гордон А.В. 16	Меркулова О.С. 49,50,52	Тихомирова І.А. 46
Грецька О. В. 55	Мех Ю.В. 24	Товстоног Н.О. 24
Грищенко Г. О. 35	Мінаєва Ю.А. 7	Трепядько Д.О. 53
Денисенко Т.О. 24	Мондрусова М.С. 39	Худякова С.М. 9,10,11
Дмітрікова Л.В. 31	Нестерова О.Ю. 44,45	Чеботарєв А.Н. 10
Дорошенко В.С. 9	Новік Г.В. 51,54	Чернопольська Ю.А. 17
Дробот В. Є. 22	Носовська О.Ю. 27,28	Чернушенко О.О. 59
Дубовий В.П. 10	Овчинникова М.В. 47	Чернявська А.Ю. 12,15
Жигадло Є.Ю. 27	Оковитий С.І. 26,33,37,39	Чертихіна Ю.А. 30
Жук Л. П. 6,19,20,23	Оскаленко Ю.В. 40	Швиденко А.Р. 11
Жулковська Е.І. 59	Осокін Є.С. 63	Шидакова-Каменюка О.Г. 51,54
Загорулько С.Ю. 31	Падалка А.М. 57	Шкутенко Ю.В. 13
Заболотна Н.І. 15	Пальчиков В. О. 37,39	Шуриберко К.В. 45
Замишляєнко Я. М. 61	Петова О.М. 54	Щука Н.М. 33
Заруба С.В. 18	Петренко А.І. 12	Щукін А. І. 61,63
Іваниця Л.О. 12,15	Петухова О.І. 42	
Іщенко Г.С. 23		