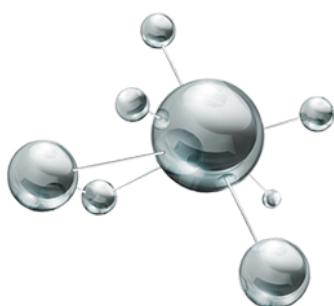


Міністерство освіти і науки України
Житомирський державний університет імені Івана Франка
Національний університет "Києво-Могилянська академія"
Донецький національний університет імені Василя Стуса
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького
Інститут фізики напівпровідників НАН України
Інститут хімії поверхні НАН України



V ВСЕУКРАЇНСЬКА НАУКОВА КОНФЕРЕНЦІЯ



**АКТУАЛЬНІ ЗАДАЧІ ХІМІЇ:
ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ПЕРСПЕКТИВИ**

МАТЕРІАЛИ КОНФЕРЕНЦІЇ

Житомир
2021

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ЖИТОМИРСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА
НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ “КИЄВО-МОГИЛЯНСЬКА АКАДЕМІЯ”
ДОНЕЦЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТУСА
ЧЕРКАСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ БОГДАНА ХМЕЛЬНИЦЬКОГО
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ НАПІВПРОВІДНИКІВ НАН УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ХІМІЇ ПОВЕРХНІ НАН УКРАЇНИ

V ВСЕУКРАЇНСЬКА НАУКОВА КОНФЕРЕНЦІЯ

«АКТУАЛЬНІ ЗАДАЧІ ХІМІЇ: ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ПЕРСПЕКТИВИ» ЗБІРНИК МАТЕРІАЛІВ КОНФЕРЕНЦІЇ



15 квітня 2021 р.

м. Житомир

**Житомир
Видавець О. О. Євенок
2021**

УДК 061 54(06)
ББК Гя431
А 43

Рекомендовано до друку рішенням Вченої ради Житомирського державного університету імені Івана Франка (протокол № 6 від 30 квітня 2021 року).

Посвідчення про реєстрацію в УкрІНТЕІ № 247 від 5 березня 2021 р.

Всеукраїнська наукова конференція «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи» (15 квітня 2021 року).

Матеріали конференції. – Житомир: Видавець О. О. Євенок, 2021. – 392 с., іл.

ISBN 978-966-995-262-2

Збірник містить тези доповідей, у яких викладені результати наукових досліджень у галузях неорганічної та фізичної хімії, матеріалознавства та нанотехнологій, аналітичної хімії та хімії навколишнього середовища, хімії органічних та високомолекулярних сполук, теорії та методики навчання хімії. Дослідження виконані у навчальних закладах та наукових установах України, Республіки Білорусь, Словаччини, Литви, Німеччини, Франції, Польщі, Грузії, Узбекистану, Бразилії, Португалії та Китаю.

Матеріали друкуються в авторській редакції.

Конференцію проведено відповідно до плану проведення наукових конференцій з проблем вищої освіти і науки в системі Міністерства освіти і науки України на 2021 рік (лист ІМЗО від 13.01.2021 № 22.1/10-37).

Співорганізатори конференції:

Національний університет "Києво-Могилянська академія"
Донецький національний університет ім. В. Стуса
Черкаський національний університет ім. Б. Хмельницького
Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України
Інститут хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України

Підтримка конференції: ТОВ «УкрХімАналіз»

Укладачі: *Н.В.Кусяк, В.В.Листван*

Рецензенти збірника:

Бойчук Ірина Дмитрівна – кандидат педагогічних наук, директор Житомирського базового фармацевтичного фахового коледжу Житомирської обласної ради
Заблоцька Ольга Сергіївна - доктор педагогічних наук, професор, зав. кафедри «Лабораторна діагностика» КВНЗ «Житомирський медичний інститут» Житомирської обласної ради
Дорохов Віктор Іванович - кандидат хімічних наук, доцент Поліського національного університету

Адреса редколегії:

10008, м. Житомир, вул. Пушкінська, 42,
природничий факультет Житомирського державного університету
імені Івана Франка.

ISBN 978-966-995-262-2

©Житомирський державний університет імені Івана Франка, 2021
© Видавець О. О. Євенок, видання, 2021

ОРГАНІЗАЦІЙНИЙ КОМІТЕТ КОНФЕРЕНЦІЇ

Науковий комітет конференції

<i>Киричук Галина Євгеніївна</i>	ректор ЖДУ імені Івана Франка, д.б.н., проф., (голова);
<i>Анічкіна Олена Василівна</i>	завідувач кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка, к.п.н., доц.;
<i>Боцян Тетяна Вікторівна</i>	проректор з наукової і міжнародної роботи ЖДУ імені Івана Франка, к.е.н., доц.;
<i>Вакулюк Поліна Василівна</i>	заступник декана факультету природничих наук, професор кафедри хімії НаУКМА, д.т.н., доц.;
<i>Гетьман Євген Іванович</i>	старший науковий співробітник науково-дослідної частини ДонНУ імені Василя Стуса, д.х.н., проф.;
<i>Голуб Олександр Андрійович</i>	декан факультету природничих наук НаУКМА, д.х.н., проф.;
<i>Горбик Петро Петрович</i>	зав. відділу наноматеріалів Інституту хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України, д.ф.-м.н., проф.;
<i>Жильцова Світлана Віталіївна</i>	в.о. завідувача кафедри біофізичної хімії і нанобіотехнологій факультету хімії, біології і біотехнологій ДонНУ імені Василя Стуса, к.х.н., доц.;
<i>Картель Микола Тимофійович</i>	директор Інституту хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України, д.х.н., проф., акад. НАН України;
<i>Кусяк Наталія Володимирівна</i>	доцент кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка, к.х.н.;
<i>Листван Віталій Володимирович</i>	доцент кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка, к.х.н.;
<i>Мінаєв Борис Пилипович</i>	завідувач кафедри хімії та наноматеріалознавства ЧНУ імені Богдана Хмельницького, д.х.н, проф.;
<i>Радіо Сергій Вікторович</i>	завідувач науковою частиною, доцент кафедри неорганічної, органічної та аналітичної хімії факультету хімії, біології і біотехнологій ДонНУ імені Василя Стуса, к.х.н., доц.;
<i>Розанцев Георгій Михайлович</i>	завідувач кафедри неорганічної, органічної та аналітичної хімії факультету хімії, біології і біотехнологій ДонНУ імені Василя Стуса, д.х.н., проф.;
<i>Романюк Руслана Костянтинівна</i>	декан природничого факультету, к.б.н., доц.;
<i>Томашик Василь Миколайович</i>	завідувач хіміко-технологічного відділу Інституту фізики напівпровідників ім. В. Є. Лашкарьова НАН України, д.х.н., проф.;
<i>Туров Володимир Всеволодович</i>	зав. відділу біомедичних проблем поверхні Інституту хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України, д.х.н., проф., чл.-кор. НАН;
<i>Тьортих Валентин Анатолійович</i>	зав. відділу хемосорбції та гібридних матеріалів Інституту хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України, д.х.н., проф.;
<i>Чеканов Максим Олександрович</i>	старший науковий співробітник відділу біомедичної хімії Інституту молекулярної біології і генетики Національної академії наук України, к.х.н.;
<i>Чумак Володимир Валентинович</i>	проректор з навчально-методичної та виховної роботи ЖДУ імені Івана Франка, к.х.н., доц.;
<i>Шендрик Олександр Миколайович</i>	декан факультету хімії, біології і біотехнологій, професор кафедри біофізичної хімії і нанобіотехнологій ДонНУ імені Василя Стуса, д.х.н., проф.

Локальний організаційний комітет

Житомирського державного університету імені Івана Франка

<i>Киричук Галина Євгеніївна</i>	ректор ЖДУ імені Івана Франка, д.біол.н., проф., (голова);
<i>Чумак Володимир Валентинович</i>	проректор з навчально-методичної та виховної роботи ЖДУ імені Івана Франка, к.х.н., доц.;
<i>Романюк Руслана Костянтинівна</i>	декан природничого факультету, к.б.н., доц.;
<i>Анічкіна Олена Василівна</i>	завідувач кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка, к.п.н.;
<i>Авдєєва Ольга Юріївна</i>	асистент кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка;
<i>Афанасьєва Анастасія Павлівна</i>	лаборант кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка;
<i>Білова Юлія Сергіївна</i>	лаборант кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка;
<i>Денисюк Роман Олександрович</i>	доцент кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка, к.х.н.;
<i>Камінський Олександр Миколайович</i>	ст.викладач кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка, к.х.н.;
<i>Кичкирук Ольга Юріївна</i>	доцент кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка, к.х.н.;
<i>Кондратенко Олена Улянівна</i>	асистент кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка;
<i>Кусяк Андрій Петрович</i>	ст.викладач кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка, к.х.н.;
<i>Кусяк Наталія Володимирівна</i>	доцент кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка, к.х.н.;
<i>Листван Віталій Володимирович</i>	доцент кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка, к.х.н.;
<i>Листван Володимир Миколайович</i>	доцент кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка, к.х.н.;
<i>Матвієнко Олена Василівна</i>	ст.лаборант кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка;
<i>Онищук Олександра Олегівна</i>	лаборант кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка;
<i>Тищенко Надія Петрівна</i>	лаборант кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка;
<i>Чайка Микола Володимирович</i>	асистент кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка, к.х.н..

**АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ
ТА ХІМІЯ НАВКОЛИШНЬОГО
СЕРЕДОВИЩА**

QUALITY ASSURANCE AND QUALITY CONTROL IN SPECTROSCOPIC DETERMINATION OF HEAVY METAL IONS ABSORPTION BY PLANTS

Lystvan V.V.¹, Lystvan K.V.²

¹Zhytomyr Ivan Franko State University, lystvan@ukr.net

²Institute of Cell Biology and Genetic Engineering NAS of Ukraine

Contamination of environment, particularly water pools by human industrial activity products become one of the most significant problem of today. Among the numerous organic and inorganic pollutants considerable part belongs to heavy metal ions, salts of which are widely used in different industries (textile, galvanizing, tannery, etc.). An increasing of the pollution requires the development of new effective methods of environmental decontamination, one of which is phytoremediation. An efficiency of this method is determined by some plants ability for an active absorption of the corresponding ions. Particularly some species called "hyperaccumulators" can absorb ions of certain metals in amounts up to 5 – 7 % of their dry weight.

We have been actively studying phytoremedial ability of different genus of plants, namely their ability for accumulation of heavy metal ions such as Cr^{6+} , Ni^{2+} ra Pb^{2+} . This research work required the elaboration of corresponding procedure of species preparation and determination of the metal ions containing, which ensure the accuracy and stability of the measured values.

An elaborated method provides wet digestion of air-dried plant shoots by concentrated nitric acid with next dilution of samples by distilled water and determination of the containing of corresponding ions in the obtained solution by atomic absorption spectroscopy (AAS). It has been established that full mineralization of the dry biomass requires 0.5 to 1 hour of refluxing with concentrated nitric acid. Hydrochloric acid addition has no significant effect on the speed or quality of species digestion.

An important aspect of every instrumental measurement method is its quality assurance and quality control. The main characteristics of precision, accuracy and repeatability are presented in table. %RSD and %RD were calculated after series of 15 measurements of the standard solutions of the corresponding metals which were prepared using high purity salts of the metals. Precision was monitored via the systematic measurement of the calibration solutions during the measurement process. Each sample was measured 2-3 times and the mean of these measurements was used for the final calculations. Dilution of digested samples was performed to obtain the concentration rates close to the middle of working measured range for corresponding ion. Sensitivity, minimum detection limit and working range are characteristics of used equipment (SELM I C-115M). Samples were prepared in such a way as to far exceed the detection thresholds for the metals.

Element	% RSD, n=15	% RD, n=15	Sensitivity (characteristics concentration), mg/l	Minimum detection limit, mg/l	Working range, mg/l
Nickel	2,90	5,80	0.06	0.002	0,5-10
Lead	1,99	-1,10	0.2	0.1	2-20
Chromium	4,12	-1,47	0.04	0.006	0,3-5

The obtained RSD and RD values are quite acceptable for corresponding ions measurement. Therefore the elaborated method can be considered suitable for the quantitative determination of the absorption of Nickel, Lead or Chromium ions which were absorbed from liquid medium by different parts of plants.

ЕКОХІМІЧНА ХАРАКТЕРИСТИКА ДОННИХ ОСАДКІВ ПІВНІЧНОГО ПРИЧОРНОМОР'Я

Альохіна Т.М.

ДНУ «Центр проблем морської геології, геоекології та осадового рудоутворення НАН України», Alohkina@gmail.com

Наявність забруднюючих речовин (ЗР) у воді, в тому числі морській, має непостійний випадковий характер, а їх концентрація залежить від багатьох факторів і дуже швидко змінюється. Тому більш репрезентативним вважаються показники стану забруднення морського середовища у донних осадах. Шляхом седиментації частково знижується концентрація забруднюючих речовин із води перенесенням у донні відкладення, де вони накопичуються і остаточно депонуються. Вміст ЗР у седименті є результатом довгострокового антропогенного впливу на морське середовище, і тому він характеризує осереднену інтенсивність цього процесу та його сумарний ефект, тобто є інтегрованою характеристикою забруднення.

Мета повідомлення – доповнити наявну екохімічну інформацію та схарактеризувати сучасний стан донних осаdkів східної частини української ділянки північного Причорномор'я (від м. Залізний Порт до півострова Карадай). Було обстежено ділянки узбережжя та шельфу: перша ділянка (1) знаходилась поблизу м. Залізний Порт; друга (2) – навколо острова Джарилгач; третя (3) – на околиці м. Скадовськ; четверта (4) – Каланчацький лиман неподалік півострова Карадай. Вивчались літологічні та хімічні показники стану донних осаdkів. Для цього використовували гранулометричний аналіз, фізико-хімічні показники, емісійну спектроскопію.

Встановлено, що в напрямку від півострова Карадай до Тендеровської коси узбережний осад закономірно змінює гранулометрію від глинистих алеврито-пелітів (в районі гирла р. Каланчак) до піщаних псамітів (узбережжя в районі м. Залізний Порт). Наноси поблизу м. Залізний Порт складені не замуленим кварцовим піском, аналогічний характер седименту шельфу навколо острова Джарилгач. Ділянки алеврито-пелітів чергуються із піщаними косами поблизу м. Скадовськ. Винос та осадження зважених речовин водами р. Каланчак формує склад та просторовий розподіл осаdkів у гирловій ділянці ріки і на узмор'ї в районі півострова Карадай та сприяє сорбції забруднюючих речовин, що надходять річкою до моря (рис.1). Питома щільність донних осаdkів співвідноситься із гранулометричним складом осаду і становить в середньому $2,50 \text{ г/см}^3$ на першій ділянці; $2,48 \text{ г/см}^3$ – на другій; $2,47 \text{ г/см}^3$ на третій досліджуваній ділянці та $2,42 \text{ г/см}^3$ в районі Каланчацького лиману.

Значення водневого показника (рН) донних осаdkів досліджених ділянок коливалось у вузькому діапазоні від 6,75 до 8,05 із тенденцією до підвищення лужності у бік м. Залізний Порт. Вміст водорозчинних солей було визначено на рівні 0,45 % у 100 г сухої проби для першої ділянки із поступовим збільшенням у напрямку півострова Карадай. Так, у другій ділянці вміст солей становив 0,48%; у третій – 0,61% і у четвертій ділянці вміст водорозчинних солей визначався на рівні 1,56% у 100 г сухої проби.

Присутність металів (в тому числі важких) в морських донних осадах обумовлюється як природними, так і антропогенними факторами. Метали, в залежності від природи їх походження, знаходяться в різних концентраціях в седименті морського дна і річкових наносах, що надходять до шельфу. В своїх природних концентраціях деякі метали відіграють суттєву роль в біохімічних процесах. З іншого боку, промислова діяльність і надходження металів із скидами стічних вод можуть значно розбалансувати природну рівновагу морського середовища.

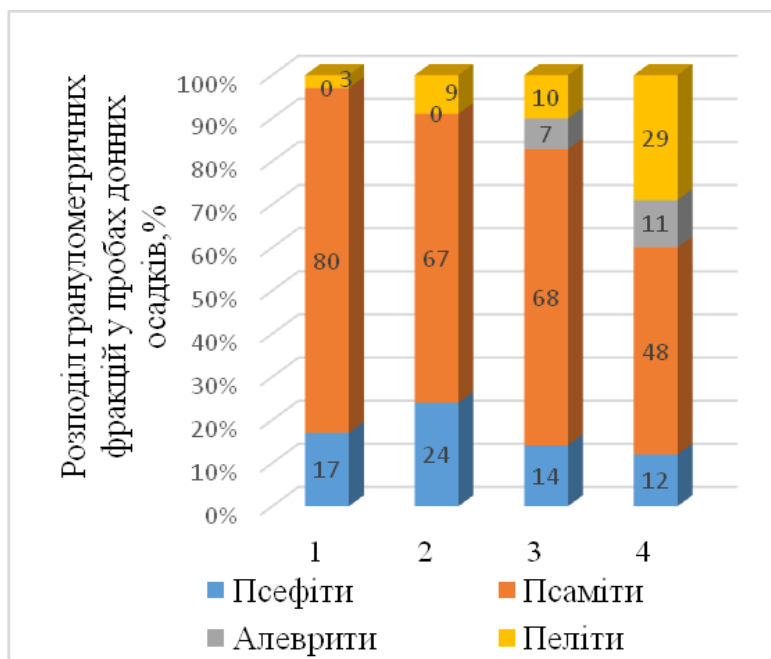


Рис. Усереднені значення гранулометричних фракцій у донних осадах досліджених ділянок: 1 – район поблизу м. Залізний Порт; 2 – ділянка навколо острова Джарилгач; 3 – ділянка поблизу м. Скадовськ; 4 – ділянка в районі Каланчацького лиману

Результати проведених спектральних досліджень дають змогу казати, що осади узбережжя відзначаються, подекуди, значним перевищенням кларкових рівнів таких елементів як Mn, Ti, Zr, Cu, Zn, U та відсутністю Ba. Можна зазначити, що геохімічна спеціалізація осадків – манган-циркон-титаново-мідна. Високий вміст Ti в цих пробах пояснюється природними процесами [1, 2].

Проби, відібрані на узрі води поблизу м. Скадовськ багаті на органічний залишок, що є продуктом деструкції прибережного скупчення водоростей, тому дана фракція осаду містить великий відсоток пелітів, які, в свою чергу, адсорбують низку токсичних елементів. Так, вміст Mn хоча і знаходить в межах ГДК проте в середньому втричі більший на третій ділянці ніж в інших досліджених районах; Ni – в 2 рази, Ti – в 10 разів, V – приблизно в 9 разів, Cr – в 5 разів, Zr – в 4 рази, Nb – в 2,5 разів, U – в 10 разів. Тоді як Yb та Zn в даній точці відсутні. Крім того, для таких важких металів як Cu та Zn визначено перевищення ГДК у 2,5 та 1,5 рази відповідно (в районі м. Скадовськ). Що стосується проб, відібраних поблизу с. Залізний порт, усереднені дані свідчать про відсутність аномальних значень. Визначено, порівняно високий вміст мангану, титану, циркону та цинку, що підтверджує визначену геохімічну спеціалізацію району.

Таким чином, рівень забруднення донних осадків східної частини української ділянки північного Причорномор'я токсичними металами, в цілому, слід вважати незначним, а донні відкладення характеризуються як умовно-чисті, або помірно-забрудненні.

1. Митропольський О.Ю., Наседкін Є.І., Оскіна Н.П. Екогеохімія Чорного моря. – К., 2006. – 279 с.
2. Шнюков Е.Ф., Зиборов А.Н. Минеральные богатства Черного моря. – К., 2005. – 285с.

МЕТОДИЧНІ ОСОБЛИВОСТІ ІЧ СПЕКТРОСКОПІЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ ГІДРАТОВАНИХ МОНО- І ПОЛІФОСФАТІВ

Антрапцева Н. М.¹, Біла Г.М.²

¹Національний університет біоресурсів і природокористування України,
aspirant_nubipu@ukr.net

²Національний університет харчових технологій

Висока чутливість методу ІЧ спектроскопії до особливостей зв'язку протонвмісних груп робить цей метод одним з важливих для аналізу форм і характеру зв'язку молекул води і гідроксильних груп, особливостей водневого зв'язку в гідратованих і протонуваних фосфатах.

На даний час принципіальної проблеми вибору приладу для ІЧ спектроскопічних досліджень не існує. Якість отриманого спектру і відповідно об'єм інформації, що він дає, в більшій мірі визначається вибором методики приготування зразку для аналізу та чистотою її виконання.

Для отримання спектрів твердих сполук частіше всього використовують два методи: метод імерсій в рідинах типу вазелінового масла і метод твердих імерсій речовини в галоїдних солях (частіше всього KBr, іноді KCl або AgCl). Обидва методи для отримання спектрів достатньо високої якості потребують подрібнення речовини до розмірів частинок, які порівнюються з довжиною хвилі випромінювання. Крім того, метод твердих імерсій для отримання достатньо прозорих таблеток окрім ретельного розтирання передбачає пресування сумішей при тискові 1 ГПа і розрідженні до 10 Па [1].

Оскільки більшість гідратованих фосфатів під час механічної обробки можуть змінювати склад і властивості, то цей клас сполук вважають одним із найбільш складних для отримання їх якісних ІЧ спектрів стандартними методами і кожний вид моно- і поліфосфатів потребує вибору індивідуальних режимів зйомки.

Статистика свідчить, що з деякими припущеннями зміною складу і стану речовини при стандартній обробці можна знехтувати лише для низьководних гідратів (менше 4 моль H₂O), які починають втрачати воду при атмосферному тиску при 100 °С. При роботі з гідратами потрібно враховувати можливість появи смуг ОН-груп продуктів гідролітичних реакцій фосфатів, що досліджуються, з галогенідами матриці [2].

В даній роботі як основні об'єкти дослідження використовували фосфати цинку-кобальту(II) тетрагідрати складу Zn₂Co(PO₄)₂·4H₂O і Zn_{2,5}Co_{0,5}(PO₄)₂·4H₂O. Враховуючи методичні особливості ІЧ спектроскопічних досліджень, зразки готували методом пресування фіксованої наважки зразка (0,047 мас.%) в матрицю калію броміду, для порівняння – у вигляді емульсії у вазеліновому маслі.

Для надійної ідентифікації смуг поглинання в області, що відповідає коливанням кристалізаційної води (4000–1400 см⁻¹), додатково використовували суспензію зразків в бутиловому спирті, нанесену на нейтральну підложку з CaF₂, аналогічно описаному в [3]. З метою віднесення смуг поглинання, що спостерігаються в ІЧ-спектрах, застосовували метод ізотопного заміщення. Дейтероаналоги фосфатів отримували в аналогічних умовах, використовуючи дейтерофосфатну кислоту і розчини вихідних солей у важкій воді. Запис ІЧ спектрів гідратованих фосфатів та їх дейтероаналогів проводили при кімнатній температурі та охолодженні зразків до температури рідкого азоту (-190 °С), використовуючи для зйомки одні й ті ж заpresовки.

Спектри, отримані з використанням обох методик, виявилися ідентичними. Одночасна присутність в спектрах фосфатів твердого розчину вузьких високочастотних і широких низькочастотних смуг поглинання вказує на різну навантаженість кожної ОН-групи молекул води та на їх участь в утворенні різних за міцністю і направленістю Н-зв'язків.

Порівняльний аналіз ІЧ спектрів фосфатів з різним вмістом цинку і кобальту(II) свідчить про те, що частоти валентних коливань ОН-груп молекул води залежать від співвідношення цинку і кобальту в октаедрах кристалічної структури фосфату. Із

збільшенням вмісту кобальту(II) в координаційному поліедри спостерігається закономірне зміщення максимумів смуг поглинання $\nu(\text{OH})$ в низькочастотну область, як в групі $\text{M}^{2+} - \text{OH}_2 \dots \text{OPO}_3$, так в групі $\text{M}^{2+} - \text{OH}_2 \dots \text{OH}_2$. Особливо чітко воно реєструється в ІЧ спектрах зразків, осаджених на CaF_2 (рис.)

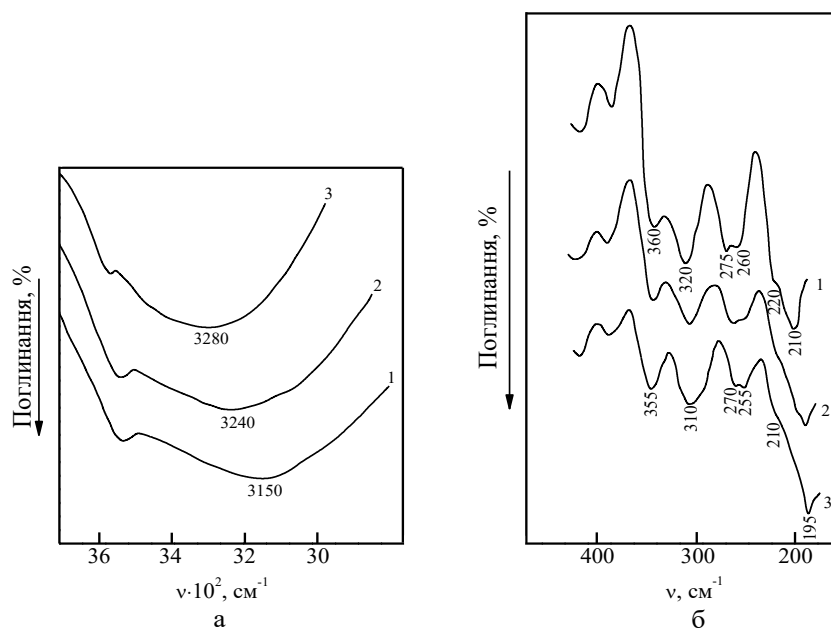


Рис. ІЧ спектри $\text{Zn}_2\text{Co}(\text{PO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (1), $\text{Zn}_{2.5}\text{Co}_{0.5}(\text{PO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (2) і $\text{Zn}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (3): а – в області $\nu(\text{OH})$, б – в низькочастотній області спектра (зразки наносили на CaF_2)

Енергія водневих зв'язків, оцінена по цьому зміщенню, зростає при переході від $\text{Zn}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ до $\text{Zn}_2\text{Co}(\text{PO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$. Збільшується при цьому і різниця в навантаженості OH -груп в одній тієї ж молекулі води, що свідчить про більш сильну поляризуючу дію кобальту на молекули води, які складають найближче координаційне оточення катіону.

Отже, під час систематичних ІЧ спектроскопічних досліджень гідратованих фосфатів для одержання якісних коректних даних виправданим є застосування таких основних методик:

- пресування фіксованої наважки зразка в матрицю KBr ; - у вигляді емульсії у вазеліновому маслі; - осадження суспензії зразків в бутиловому спирті на нейтральну підкладку з CaF_2 .

1. Nakamoto K. Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds, Part B. Applications in coordination, organometallic, and bioinorganic chemistry. – John Wiley & Sons, Inc. – 2009. – 424 p.

2. Макагун В.Н. Химия неорганических гидратов. – Мн.:Наука и техника, 1985. – 246 с.

3. Антрапцева Н.М. Коливання зв'язаної води в протонуваних фосфатах $\text{Co}(\text{II})\text{-Mn}(\text{II})$ // Збірник наукових праць SWorld. – 2014. – Т.36, №1.– С. 3–7.

ГІДРОХІМІЧНА ХАРАКТЕРИСТИКА ПОВЕРХНЕВИХ ВОД О. ЧЕХА, О. ВИТЯЗЬ ТА БЛАКИТНИХ ОЗЕР (М. СУМИ)

Більченко М.М., Касьяненко Г.Я.

Сумський державний педагогічний університет імені А.С.Макаренка,
bilchenkosspu@gmail.com

Інформація про хімічний склад природних вод має велике значення у системі моніторингу стану довкілля. Хімічний склад враховують під час використання води для всіх видів водопостачання та водокористування. Визначення гідрохімічних показників водних об'єктів є важливим для встановлення можливості повноцінного і раціонального користування водними ресурсами. Особливого значення гідрохімічні дослідження набувають у зв'язку з інтенсивним забрудненням поверхневих вод внаслідок господарської діяльності людини.

Існує широкий спектр рекреаційного використання річок та озер. При тому, що переважна їх більшість не має безпосередньо рекреаційного значення, річки та озера є невід'ємною складовою краєвиду і при наявності таких умов як чиста вода та атрактивність ландшафту відіграють велику роль у культурно-оздоровчій діяльності людей [1].

Об'єктом нашого дослідження є хімічний склад поверхневих вод озера Чеха, озера Витязь на озерній системі Блакитні озера.

Озеро Чеха знаходиться в густонаселеному районі міста Суми і входить до міської зони рекреації. Озеро Чеха розташоване у південно-східній частині міста Суми на заплаві річки Псел, має видовжену з південного заходу на північний схід форму, довжина озера 1075 м, ширина – 400 м, його площа становить близько 340000 м². Озеро має підземний притік і підземний стік. Тип живлення – змішаний. Вода озера є прісною із загальною мінералізацією до 0,6 г/дм³.

Озеро Витязь, яке знаходиться у південній частині міста Суми безпосередньо в долині річки Псел і, ймовірно, є частиною його старого русла. Озеро зорієнтоване з півночі на південь, його протяжність становить до 450 м, а найбільша ширина – до 120 м, глибина у місцях відпочинку до 2 м.

Блакитні озера, є однією із рекреаційних локацій міста Суми. Вода Блакитних озер живиться підземними джерелами, в озерній системі відсутні місця скиду промислових відходів та стоку зливової каналізації, що і зумовлює розвиток зони відпочинку мешканців міста. Блакитні озера – система двох водойм, розташованих у східній частині міста Суми, які мають гідрокар'єрне походження. Загальна довжина озерної системи близько 3800 м, ширина озер змінюється від 200 до 600 м. Озера штучно об'єднані протокою з річкою Псел.

Гідрохімічні показники визначені методами хімічного аналізу: йонселективна потенціометрія (хлориди, флуориди, нітрати та рН), фотоколориметрія (сульфати, нітрити), перманганатометрія і комплексонометрія (визначення загальної твердості води і хімічного споживання кисню) [2 – 4]. Відбір проб води та визначення гідрохімічних показників виконувалося згідно стандартних методик [3].

Хімічний аналіз проб виконаний у лабораторії хіміко-екологічного моніторингу кафедри хімії та методики навчання хімії Сумського державного педагогічного університету імені А.С.Макаренка та санітарно-гігієнічній лабораторії ДУ «Сумський обласний лабораторний центр МОЗ України».

Гідрохімічні дослідження поверхневих вод проведені протягом літнього сезону 2020 року, в період активного відпочинку міського населення. Проби води відбирались у довільних точках акваторії озер.

Встановлення хімічного складу поверхневих вод досліджуваних водойм дає змогу виявити рівень та можливі тенденції антропогенного впливу на їх якість.

Результати гідрохімічного аналізу з визначення катіон-аніонного складу, ХСК і рН води наведені у таблиці.

Таблиця

Гідрохімічні показники якості поверхневих озера Чеха, озера Витязь та Блакитних озер.

№ з/п	Гідрохімічні характеристики (показники якості води)	Одиниці виміру	ГДК, норма	Результати вимірювань		
				о.Чеха (2019 р.)	Блакитні озера (2020 р.)	о.Витязь (2020 р.)
1	Температура	°С		24	25	24
2	рН		6,5-8,5	7,80	7,89	8,24
Мінералізація та головні йони						
3	Загальна твердість	ммоль/дм ³	10	3,4	4,4	6,1
4	Карбонатна твердість	мг/ дм ³	-	220	168	184
5	Сульфати	мг/ дм ³	500	69,5	56,8	84,4
6	Хлориди	мг/ дм ³	350	32,6	16,6	18,7
7	Флуориди	мг/ дм ³	1,5	-	0,38	0,27
Біогенні компоненти						
8	Амоній	мг/ дм ³	2,6	0,42	-	-
9	Нітрати	мг/ дм ³	45	3,4	0,73	0,6
10	Нітрити	мг/ дм ³	3,3	0,06	0,03	0,02
11	Фосфати	мг/ дм ³	3,5	2,0	0,24	1,2
12	Ферум загальний	мг/ дм ³	0,3	0,22	0,25	0,28
Органічні речовини						
13	ХСК (перманганатна окиснюваність)	мгО/ дм ³	5,0	6,14	11,39	7,88

Порівняльний аналіз гідрохімічних показників з нормами ГДК дає підстави вважати, що вода о. Чеха, о. Витязь та Блакитних озер у цілому відповідає вимогам якості води культурно-побутового використання. На формування хімічного складу поверхневих вод озер впливають прямі і непрямі фактори, серед них – антропогенне навантаження, хімічний склад води підземних джерел. За хімічним складом досліджена вода має ознаки впливу антропогенного навантаження, значення ХСК(ПО) значно перевищує величину ГДК (5,0 мгО/дм³). Відзначається високий вміст фосфатів і сполук Феруму.

1. Моніторинг довкілля / За ред. В. Боголюбова. – Херсон, 2012. – 528 с.
2. Новиков Ю. В., Ласточкина К. О., Болдина З. Н. Методы исследования качества воды водоемов. – Москва, – 1990. – 400 с.
3. ДСТУ ISO 5667-6:2009 Якість води. Відбирання проб. Частина 6. Настанови щодо відбирання проб води з річок і струмків. – Київ, – 2009.
4. Протоколи досліджень якості поверхневих вод у місцях масового відпочинку м. Суми санітарно-гігієнічної лабораторії ДУ «Сумський обласний лабораторний центр МОЗ України». – Суми, – 2020.

ЕКОЛОГІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ РІВНЯ ЗАБРУДНЕНOSTІ ДОННИХ ВІДКЛАДІВ Р. ПРУТ В ОКОЛИЦЯХ М. ЯРЕМЧЕ

Бойчук Б.Я., Суса Л.В.

Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, teacher_leon@ukr.net

Значна частина токсикантів, що потрапляють у водойми, адсорбується завислими речовинами і під впливом гравітаційних сил осідає на дно, де накопичується в донних відкладах (ДВ). Донні відклади акумулюють забруднювальні речовини до рівнів, що значно перевищують їх вміст у водній товщі. Накопичуючись в силу уповільнення течії на деякій відстані від джерела первинного забруднення, токсичні речовини можуть бути причиною погіршення стану водойм на значній відстані від нього [1].

При зміні гідродинамічних (збільшення швидкості течії, вітрове перемішування водних мас) і фізико-хімічних (рН, окислювально-відновні умови, солоність, температура тощо) умов у придонних шарах води, речовини, що містяться в донних відкладах, здатні переходити у водну фазу, зумовлюючи вторинне забруднення водойм. Саме тому для виявлення складу, інтенсивності і масштабу техногенного забруднення важливим є дослідження саме донних відкладів, а також поверхневого та придонного шару води для виявлення джерел відповідно поверхневого забруднення та вторинного забруднення води з донних відкладів.

У самому місті Яремче (Івано-Франківська обл.) та у його околицях немає великих промислових підприємств, тому значних скидів токсичних речовин у каналізацію, тим більше прямо у річку, не відбувається. Проте, з кожним роком у цьому мальовничому куточку Прикарпаття зростає кількість санаторіїв, баз відпочинку, котеджних містечок та просто житлової забудови. Далеко не всі з цих об'єктів житлово-комунальної сфери мають власні очисні споруди, а також центральну каналізацію. Відповідно, у річку Прут, яка є перлиною цього краю, досить часто потрапляють неочищені стоки, які забруднюють не тільки воду, а й осідають на донних відкладах. Про гідрохімічний стан води в р. Прут в околицях м. Яремче автори вже повідомляли у своїх попередніх публікаціях [2, 3 та ін.].

Тепер метою дослідження була комплексна екологічна оцінка стану забруднення донних відкладів р. Прут вище та нижче за течією від м. Яремче.

Місця відбору проб донних відкладів у даній статті не співпадають з місцями відбору проб води для гідрохімічних досліджень, вказаних у згаданих вище публікаціях авторів. Це пояснюється значною крутизною берегів та швидкою течією річки. У таких місцях відібрати проби води з берега можна за допомогою довгої жердини, а проби донних відкладів ми відбирали на тих ділянках, де була можливість безпечно зайти у воду хоча б на декілька метрів від берега.

Проби ДВ відбирались у теплу пору року (початок вересня 2020 р.) у 6 точках (пунктах спостережень). У кожному із вказаних пунктів спостереження відбирались проби пісково-галькових донних відкладів відповідно до діючих нормативних документів (НД). Основну увагу приділено ділянці річки Прут перед скидом у неї очищених стічних вод з ДП «Яремчеводоканал», у місці скиду та після скиду.

Для визначення повного комплексу фізико-хімічних показників відібрані проби ДВ пакувались відповідно до встановлених НД вимог і доставлялись у науково-дослідну лабораторію екологічної безпеки Львівського державного університету безпеки життєдіяльності (НДЛ ЕБ ЛДУ БЖД). Ця лабораторія атестована на право виконання відповідних вимірювань у системі «Держстандартметрологія» (св. ат. № РЛ 127/17 від 14.11.2017 р.).

Водні витяжки з донних відкладів готували згідно з рекомендаціями відповідних НД у співвідношенні «донні відклади – вода» як 1:5 у перерахунку на суху масу донних відкладів. Лабораторне вивчення гідрохімічних параметрів відібраних проб виконувались згідно загальноприйнятих НД і методик, із використанням повірених засобів вимірювальної техніки (ЗВТ). Частина отриманих результатів (найбільш репрезентативні) представлені у таблиці.

У цій же таблиці, для порівняння, наведені також результати досліджень окремих гідрохімічних параметрів донних відкладів, відібраних з р. Прут як працівниками згаданої організації м. Яремче у 2018-2019 р.р. (усереднено), так і нами (2020 р.).

Таблиця

Гідрохімічні показники та вміст нафтопродуктів у донних відкладах р. Прут
(дані ДП «Яремчеводоканал» та власні результати НДЛ ЛДУ БЖД)

Точка відбору	Вміст компонента, мг/кг					
	pH	Сух. зал.	NH ₄ ⁺	NO ₂ ⁻	NO ₃ ⁻	Нафто-прод.
Перед скидом	8,2	326	28,2	82,1	162	54
В місці скиду	8,1	356	31,2	102,5	236	193
Після скиду	7,3	362	48,6	95,6	325	212
Результати НДЛ ЛДУ БЖД	8,4	296	28,5	69,4	211	98

Враховуючи те, що досліджувана у даній роботі частина р. Прут протікає по мало урбанізованій території, був виявлений лише помітний вплив міста Яремче на забрудненість донних відкладів у пунктах спостереження. Зокрема, вище скиду загальноміських очищених стічних вод стічних вод показник забруднення ДВ зовсім незначний, у місці скиду дещо вищий, і найбільшого значення він набирає нижче скиду.

Окремо слід сказати про щорічне збільшення кількості розораних земель у долинах гірських річок. Раніше ці землі були повністю вкриті лісом або чагарниками. У наш час, у зв'язку з інтенсивною вирубкою лісів, значно зросли обсяги ґрунтів та гірських порід, які змиваються опадами у річки та осідають разом з ДВ. Завдяки використанню сучасних мінеральних добрив, засобів захисту рослин та пестицидів, кожен клаптик раніше непридатної до сільгоспвиробництва землі у долинах, тепер є повноцінним полем.

Динаміка надходження, накопичення та подальшої трансформації пестицидів у донних відкладах річок залежить від сумарної дії таких факторів: гідродинаміка (поверхневі та придонні течії), гранулометричний склад донних відкладів та ін. Негативний вплив пестицидів на екологічний стан річок пов'язаний не тільки з надходженням останніх від сільськогосподарських забруднень агро- та аквашляхами, але і з накопиченням у донних відкладах та повторним багаторазовим надходженням з опадів у придонну воду та біоту.

Однак, як видно з отриманих числових результатів, така ситуація на дослідженій ділянці річки ще не загрожує. У цілому можна стверджувати, що забрудненість донних відкладів р. Прут в околицях м. Яремче є незначною, і якихось додаткових заходів щодо очищення русла річки не потрібно.

1. Коновець І.М., Кіпніс Л.С., Гончарова М.Т., Подругіна А.Б., Ситник Ю.М. Еколого-токсикологічне дослідження рівнів забруднення води та донних відкладів р. Нивка в районі аеропорту «Київ» // Рибогосподарська наука України. – 2013. – №2. – С. 32-44.

2. Бойчук Б.Я., Кузик А.Д., Сиса Л.В., Волощишин А.І. Антропогенний вплив на основні гідрохімічні параметри річки Прут в околицях міста Яремче // Екологічна безпека. – 2019. – № 1(27). – С. 50-57.

3. Бойчук Б. Я., Кузик А. Д., Сиса Л. В. Екологічна оцінка якості води у верхній течії річки Прут // Вісник ЛДУБЖД. – 2019. – №19. – С. 108-114.

СИНТЕЗ ТА СОРБЦІЙНІ ВЛАСТИВОСТІ ЩОДО ЙОНІВ ТОКСИЧНИХ МЕТАЛІВ КОМПОЗИТІВ НА ОСНОВІ ПРИРОДНИХ МІНЕРАЛІВ

Бонюк М.¹, Кичкирук О.Ю.¹, Яновська Е.С.², Савченко Е.С.², Стернік Д.³

¹Житомирський державний університет імені Івана Франка, marinabonyuk349@gmail.com

²Київський національний університет імені Тараса Шевченка

³Університет Марії Кюрі-Склодовської

Метою даної роботи є синтез та вивчення сорбційних властивостей природних мінералів іммобілізованих полі[8-оксихінолінметакрилатом] щодо Cu(II), Cd(II), Pb(II) та Fe(III). Природні мінерали- неорганічні речовини, які закладені глибоко у земній корі, які існують як окремі поклади, або у вигляді сполук, або ж разом з іншими природними мінералами. Пошук природних матеріалів як ефективних сорбентів допоможе в очищенні природних ресурсів від забруднювачів, з дотриманням екологічних норм.

Модифікація поверхні поруватих неорганічних та природних мінералів полімерами з комплексотвірними функціональними групами дозволяє отримати сорбенти для вилучення зі стічних вод йонів токсичних металів за рахунок їх комплексоутворення з функціональними групами іммобілізованих полімерів. Синтез таких сорбентів є досить складним і тривалим. Природні мінерали кліноптилоліт Тушинського родовища, сапоніт Ташківського родовища, вермикуліт виробництва фірми Sigma Aldrich були використані в якості носія в даній роботі. Синтез органо-мінеральних композитів здійснювали шляхом адсорбції полі[8-оксихінолінметакрилату] на поверхні обраних мінеральних носіїв за наступною методикою: певну наважку полімеру вносили у плоскодонну колбу і розчиняли у тетрагідрофурані (ТГФ). Потім до утвореного розчину додавали наважку мінералу, нагрівали при температурі 60°C й інтенсивно перемішували на магнітній мішалці протягом 5-ти годин поступово пропускаючи аргон через суміш. Через добу синтезований композит декантували на фільтр і висувували при кімнатній температурі протягом декількох діб до сталої маси.

Підтвердження присутності даного полімеру у поверхневому шарі природних мінералів одержали порівнюючи ІЧ-спектри синтезованого композиту та вихідних мінералів. Наявність нових смуг у ІЧ-спектрі синтезованих композитів може бути доказом наявності у їх складі полі[8-оксихінолінметакрилату]. Методом термогравіметричного аналізу визначено масові частки полімеру у складі композитів. Для дослідження параметрів поверхні кліноптилоліту, сапоніту та вермикуліту після іммобілізації полі[8-оксихінолінметакрилату] був застосований метод ВЕТ (низькотемпературної адсорбції-десорбції азоту). Морфологію поверхні неорганічних матеріалів до та після модифікації полімером досліджували методом скануючої електронної мікроскопії. Концентрації йонів у розчині визначали атомно-абсорбційним методом після доби контакту розчину з поверхнею адсорбенту.

Вивчення сорбційних властивостей синтезованих композитів щодо йонів Cu(II), Cd(II), Pb(II) та Fe(III) у статичному режимі показали, що йони Купруму(II) найкраще вилучаються усіма мінералами. Найменша сорбційна ємність модифікованих природних мінералів щодо катіонів Феруму(II). Вермикуліт виробництва фірми Sigma Aldrich із адсорбованим полі[8-оксихінолінметакрилатом] володіє найкращими сорбційними властивостями щодо Cu(II), його сорбційна ємність у рази перевищує ємність немодифікованого вермикуліту.

ВИВЧЕННЯ ХІМІЧНОГО СКЛАДУ ЕКСТРАКТУ ЯБЛУК СОРТУ “ГАЛА” МЕТОДОМ ХРОМАТО-МАССПЕКТРОМЕТРІЇ

¹Гулай О.І., ¹Шемет В.Я., ²Климович О.С., ²Жилко В.І.

¹Луцький національний технічний університет, shemet5@i.ua

²Волинський науково-дослідний експертно-криміналістичний центр МВС України

Яблука – традиційний український фрукт – містять до 90% води і близько 20% корисних речовин. М'якуш багатий клітковиною, органічними кислотами (яблучною, лимонною, винною, хлорогеновою), мікроелементами (калій, фосфор, магній, натрій, сірка, алюміній, бор, ванадій, залізо, йод, мідь, молібден, нікель, фтор, хром і цинк) і вітамінами А (на 50% більше, ніж в апельсинах), В1, В3, РР, С. Шкірка яблук містить флавоноїди, а в насінні - до 15% жирної олії.

В ринкових умовах розвиток галузі садівництва вимагає збільшення виробництва високоякісної продукції. Оптимальний хімічний склад, який формується в період росту та залежить від багатьох факторів, зокрема від умов вирощування в певному регіоні та сортових особливостей є важливою властивістю плодів доброї якості. Яблука є цінним харчовим та лікувальним продуктом, в якому виявлено більше 10 вітамінів, необхідних людині. Тому плоди яблуні, використовують при лікуванні гіпертонічної хвороби, застудних (антибіотична дія) та серцево-судинних захворювань (багатий вміст калію), подагри, хронічного ревматизму, склерозу, для профілактики та боротьби з різними шлунково-кишковими інфекціями [1].

Яблуня сорту “Гала” – середньоросла, з широкоовальною негустою кроною. Скелетні гілки середньої міцності відходять від стовбура під кутом 45-75°, кінці їх спрямовані догори. Плодоносить на кільчатках, плодових прутиках, верхівках однорічних приростів. Зимостійкість і стійкість до парші середня, до борошнистої роси висока. Водночас сорт дуже сприйнятливий до європейського раку. Цвіте в середньопізні строки. Сорт “Гала” схильний до перевантаження врожаєм, при цьому плоди формуються дрібні. Плоди середніх розмірів (115-145 г), досить одномірні, округлі або округло-зрізано-конічні зі слабкою ребристістю на верхівці, жовті зі смугасторозмитим оранжево-червоним рум'янком на більшій частині поверхні. Шкірочка тонка, щільна, суха. М'якуш світло-жовтий, щільний, соковитий, ламкий, відмінного кислувато-солодкого смаку. Знімна стиглість настає в другій декаді вересня. У сховищі з природним охолодженням плоди зберігаються 2-2,5, в холодильнику – 5-6 місяців. Використовують у свіжому вигляді та на виробництво соків [2].

Яблука у сушеному вигляді при правильно проведеній процедурі сушки можуть зберігатися роками. Метою роботи було одержання екстракту із сушених яблук сорту “Гала” та вивчення його складу методом газорідної хроматографії з мас-селективним детектуванням.

Приготування екстракту здійснювали наступним чином: 10 г сухих яблук сорту “Гала” заливали 100 мл розчинника (50 % водний розчин етилового спирту), настоювали за температури 18–20 °С протягом 144 год. Екстракт аналізували на газовому хроматографі з мас-селективним детектуванням (хроматомас-спектрометр Shimadzu GCMS-QP2020) за таких умов: капілярна колонка – Rxi®-5ms, довжина – 30 м, діаметр – 0,25 мм, фаза – 0,25 мкм, постійний потік – 1,0 мл/хв., газ-носій – гелій; $T_{\text{поч}} = 80^{\circ}\text{C}$, нагрівання $8^{\circ}\text{C}/\text{хв}$ до $T = 280^{\circ}\text{C}$, нагрівання $20^{\circ}\text{C}/\text{хв}$ до $T_{\text{кінц.}} = 300^{\circ}\text{C}$; автосамплер АОС-20i+s; інжектор – Split 20:1, детектор – мас-селективний. Режим роботи – за повним іонним струмом (SCAN), діапазон сканування 40-1000 а.о.м.

Обробку та ідентифікацію піків проводили на основі порівняння хроматографічних та мас-спектральних даних із бібліотечними даними відкритих джерел (NIST 2017 і Wiley 5th Edition). У складі екстракту виявлено органічні речовини, наведені у табл. 1. Вміст компонентів у зразку екстракту оцінювали методом нормалізації (площу піків представляли у відсотках до суми всіх площ піків на хроматограмі зразка).

В досліджених зразках екстракту яблук сорту “Гала” виявлено 10 характерних складових. Більшість складових екстракту є вуглеводами – моно- та дисахаридами та їх похідними. Наявність 5-гідроксиметилфурфуролу, що утворюється в процесі сушіння, є показником безпечності продукту, кетон 3,5-дигідрокси-6-метил-2,3-дигідро-4Н-піран-4-он має протипухлинну та імуномодулюючу дію [3].

Таблиця

Якісний склад екстракту яблук сорту “Гала”

№	Назва	Час утримання, хв	Площа піку, %	Ймовірність ідентифікації, %
1	1,3,5-триазин-2,4,6-триамін	5,423	7,67	83
2	3,5-дигідрокси-6-метил-2,3-дигідро-4Н-піран-4-он	6,487	8,46	94
3	5-гідроксиметилфурфурол	7,880	28,77	94
4	d-гліцери-d-ідо-гептоза	8,610	7,67	81
5	3,6-ангідро-D-галактоза	9,297	2,06	81
6	2-дезоксид-D-галактоза	9,757	1,33	82
7	Етил ізопентилсукцинат	10,410	2,72	74
8	4-O-β-D-галактопіранозил-D-глюкоза	14,190	18,32	85
9	D-гліцери-D-тало-гептоза	17,937	9,74	87
10	1,3:4,6-диметилен-d-гліцери-d-манногептитол	29,120	13,22	75

Висновки. Методом газорідної хроматографії з мас-селективним детектуванням в досліджених зразках екстракту яблук сорту “Гала” виявлено 10 характерних складових. Більшість складових екстракту є вуглеводами, що підтверджує енергетичну цінність сушених яблук. Вітаміни дослідженим методом встановити не вдалося.

1. Мельничук О. А., Чома Ж. Й. Біохімічний склад плодів яблуні (*Malus domestica* (L.) Borkh.) і груші (*Pirus communis* L.) в умовах Закарпаття // Садівництво. - 2014. - Вип. 68. - С. 304-313.

2. <http://agroua.net/plant/catalog/cg-46/c-53/s-1079/>

3. Панченко С.В., Корнієвська В.Г., Корнієвський Ю.І., Фурса М.С. Хромато-мас-спектрометрична характеристика настоек конюшини лучної та собачої кропиви // Актуальні питання фармацевтичної і медичної науки та практики. – 2020. – Т. 13, №2(33). – с. 230-236.

ЕКСПЕРТНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ 4-ММС (Мефедрон)

Єрко Д.В.

Житомирський науково-дослідний експертно-криміналістичний центр МВС, d_yerko@ukr.net

Мефедрон (жаргонні назви «мяу-мяу», «меф», «магія»), також відомий як 4-метилметкатіон (4-ММС) або 4-метимлефедрон - хімічна сполука класу заміщених амфетамінів і катинону, психостимулятор і емпатоген, який викликає ейфорію. Ця речовина вважається одним із найнебезпечніших сучасних наркотиків, його застосовують як альтернативу екстазі, кокаїну і метамфетаміну. «Меф» україною популярний серед молоді через його доступність, поширюється у вигляді порошку, кристалів або в складі таблеток і капсул. Мефедрон приймають перорально, вживають внутрішньовенно, інтраназально, а іноді й ректально [1]. Вперше мефедрон потрапив в поле зору правоохоронних органів в 2007 році (хоча вперше він був синтезований в 1928 році). Спочатку він надійшов у вільний продаж, як миючий засіб і сіль для ванн. Але з'ясувавши його справжній вплив, в усьому світі почався суворий контроль даних речовин. За такий короткий час, він встиг стати популярним серед любителів отримати задоволення неприродним шляхом. Особливо популярним 4-ММС став в країнах Європи, Ірландії, Великобританії, Австралії. Сьогодні цей наркотик популярний

серед підлітків і молодого покоління. Його найчастіше реалізують в нічних клубах, підпільному казино, на вулиці та навіть через всесвітню мережу [2].

Достатньо всього 1-2 вживань мефедрону, щоб отримати психологічну залежність. При цьому в переважній більшості залежний не може самостійно побороти залежність. Дана речовина викликає одну з найсильніших форм наркотичної залежності. Під впливом мефедрону всі життєво важливі системи організму починають працювати на межі можливостей, в авральному режимі. Організм не встигає відпочити і відновити сили, особливо при систематичному вживанні. Наслідками вживання 4-ММС (мефедрон) є порушення сну, депресія, панічні атаки, м'язові спазми, оніміння кінцівок, в місцях контакту слизових оболонок утворюються язви [3].

З метою виявлення та ідентифікації 4-ММС (мефедрон) було проведено якісне хімічне дослідження, дослідження методами тонкошарової хроматографії та газорідної хроматографії з мас-селективним детектуванням та з полум'яно-іонізаційним детектором. Якісно-хімічне дослідження. При додаванні до досліджуваного зразка реактиву Циммермана (суміш розчинів динітрбензолу в метанолі та водного розчину калій гідроксиду) - утворення темно-лілового забарвлення, свідчить про ймовірну наявність 4-ММС (мефедрон).

Дослідження методом тонкошарової хроматографії проводили на хроматографічних пластинках «Sorbfil ПТСХ-АФ-А-УФ 254». Хроматографування проводили в системі розчинників: етилацетат-метанол-аміак 25 % (85:10:5). Висота просування фронту розчинника (старт – фініш) - 90 мм. Отримані зони виявляли в УФ – світлі (254 нм) та проявляли 2 % розчином нінгідрину, спотерігали зону забарвлену в чорний колір. Розраховане значення величини хроматографічної рухливості (Rf) 4-ММС (мефедрон) у даній системі розчинників становить 0,14 [4].

Дослідження методом газорідної хроматографії з мас-селективним детектуванням проводили за наступних умов: прилад – газовий хроматограф «Shimadzu GC» з мас-спектрометричним детектором - GCMS-QP2020; капілярна колонка (Rxi-5ms), довжина – 30 м, діаметр – 0,25 мм, фаза – 0,25 мкм, постійний потік – 1,2 мл/хв, газ-носії – гелій. Інжектор – автоінжектор АОС-20i+s, Split 20:1, температура випарника T = 300°C. Термостат – T поч = 100°C тримати 5 хв, нагрівання – 5°C/хв до T кінц = 310°C тримати 2 хв. Детектор мас-селективний, температура інтерфейса T = 280°C, іонізація – електронним ударом, температура іонного джерела T = 240°C. Проба – 1 мкл, автоматичний ввід проби. Дослідження проводили за умови реєстрації хроматограм повного іонного струму (m/z = 35–550). Основними іонами, за якими здійснюється ідентифікація 4-ММС (мефедрон) є 58 та 91 іони. Дослідження методом газорідної хроматографії з полум'яно-іонізаційним детектором проводили за наступних умов: прилад – газовий хроматограф «Shimadzu GC-2010 PlusAF»; капілярна колонка – (Rxi-5ms), довжина – 30 м, діаметр – 0,25 мм, фаза - 0,25 мкм; газ-носії – гелій, постійний потік – 30 мл/хв; автоматичний ввід проби, температура випарника T= 300°C; термостат – T поч=100°C, тримати 5 хв, нагрівання – 5°C/хв, T кінц=130°C, тримати 2 хв; детектор ПІД, T= 310,00°C; проба – 1 мкл, автоматичний ввід проби. Для визначення концентрації використовували метод абсолютного калібрування. Час виходу 4-ММС (мефедрон) за даних умов – 6,85 хв.

Запропонована схема дослідження за допомогою якісних реакцій, тонкошарової хроматографії та газорідної хроматографії дає змогу виявити та ідентифікувати 4-ММС (мефедрон) у зразках речовин, які надходять на дослідження.

1. Programme on Substance Abuse. Information Manual on Designer Drugs. World Health Organization. – URL: <https://www.federalregister.gov/>.

2. <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/33313885/>.

3. <https://tibiolog.medium.com/мефедрон-подробный-гид-по-нашумевшему-наркотику-современности-bda15be3ce2e>.

4. Рекомендуютые методы идентификации и анализа синтетических катинонов в изъятых материалах. Руководство для национальных лабораторий экспертизы наркотиков – ООН, Нью-Йорк, – 2016.

ДОСЛІДЖЕННЯ РАДІОАКТИВНОСТІ МІНЕРАЛЬНИХ ДОБРІВ

Ігнатенко М.І.

Харківський національний автомобільно-дорожній університет, m_ignatenko@ukr.net

Мінеральні добрива є одним із найефективніших засобів підвищення родючості ґрунтів, урожайності та поліпшення якості продукції рослинництва. Негативні наслідки безконтрольного використання мінеральних добрив пов'язують з тим, що вони, поряд із основними біогенними елементами часто містять різні домішки у вигляді солей важких металів, органічних сполук, природних радіонуклідів (ПРН). Використання на полях мінеральних добрив, питома активність яких перевищує активність ґрунту, обумовлює підвищення ефективної еквівалентної дози опромінення людей внаслідок попадання ПРН в організм за харчовими ланцюгами [1]. Тому метою роботи було дослідження радіоактивності мінеральних добрив, яке дозволить визначити рівень забруднення ґрунтів ПРН та розрахувати їх залишкову допустиму концентрацію у ґрунті.

Експериментальне визначення питомої активності ПРН ($C_{ПРН}$) у зразках мінеральних добрив та їх сумарної питомої активності ($C_{СУМ.}$) проводилося за допомогою гамма-спектрометричного аналізу, виконаного на сцинтиляційному гамма-спектрометрі СЕГ-001 «АКП-С». Отримані експериментальні дані наведено в табл. 1.

Таблиця 1

Результати гамма-спектрометричного аналізу зразків мінеральних добрив

№ зразка	Добриво (виробник)	$C_{ПРН}$, Бк/кг (внесок, %)			$C_{СУМ.}$, Бк/кг
		^{232}Th	^{226}Ra	^{40}K	
1	Азотно-фосфорне добриво (ПАТ «Суміхімпром»)	29,1 (18,4)	129,0 (81,6)	–	158,1
2	Суперфосфат амонізований (ПАТ «Суміхімпром»)	15,9 (4,8)	314,0 (95,2)	–	329,9
3	Моноамонійфосфат (ПАТ «Суміхімпром»)	30,4 (36,3)	23,9 (28,6)	29,4 (35,1)	83,7
4	Діамонійфосфат (ПАТ «Суміхімпром»)	24,3 (16,5)	30,8 (20,9)	91,9 (62,6)	147,0
5	Азотно-фосфорно-калійне добриво (ПАТ «Суміхімпром»)	14,6 (0,4)	5,02 (0,1)	3820,0 (99,5)	3839,62
6	Нітроаммофоска (ПАТ «Суміхімпром»)	16,0 (0,4)	7,49 (0,2)	3830,0 (99,4)	3853,49
7	Фосфогіпс (ПАТ «Суміхімпром»)	9,07 (2,9)	301,0 (97,1)	–	310,07
8	Фосфорит сирійський (ПАТ «Суміхімпром»)	20,8 (3,1)	647,0 (96,9)	–	667,8
9	Азотно-фосфорно-калійне добриво (ПАТ «Азот», м. Северодонецьк)	26,9 (0,7)	–	3980,0 (99,3)	4006,9
10	Суперфосфат (КДХЗ, м. Костянтинівка)	45,8 (14,5)	270,0 (85,5)	–	315,8
11	Калієва селітра (ПАТ «Азот», м. Северодонецьк)	25,4 (0,2)	–	12200,0 (99,8)	12225,4

Аналіз даних показав, що сумарна питома радіоактивність зразків мінеральних добрив коливається в межах від 83,7 до 12225,4 Бк/кг. Для азотно-фосфорних і фосфорних добрив радіоактивність змінюється в інтервалі 83,7-667,8 Бк/кг. Сумарна активність комплексних НРК-добрив змінюється в вузькому діапазоні від 3839,62 до 4006,9 Бк/кг. Найвища сумарна питома активність 12225,4 Бк/кг встановлена для калієвої селітри.

Для зразків азотно-фосфорних (№ 1, 2) і фосфорних добрив (№ 7, 8, 10) встановлено присутність двох радіонуклідів – ^{232}Th і ^{226}Ra . Для зразків № 3 і 4 азотно-фосфорних добрив встановлено наявність радіонукліду ^{40}K , незважаючи на його відсутність у вихідній сировині

(зразок № 8). Висока активність комплексних НРК-добрив (зразки № 5, 6, 9) і проби калієвої селітри (№ 11) обумовлена присутністю ^{40}K , який надає внесок більше 99% в загальну активність. Для зразків № 9 і 11 встановлено наявність тільки двох ПРН – ^{232}Th і ^{40}K , при цьому внесок ^{232}Th в сумарну активність становить менше 1%.

Згідно нормам радіаційної безпеки [2], питома активність ПРН у мінеральних добривах і меліорантах не повинна перевищувати:

$$A_U + 1,2A_{\text{Th}} \leq 2,8 \text{ кБк/кг}, \quad (1)$$

де A_U і A_{Th} – питомі активності ^{238}U (або ^{226}Ra) і ^{232}Th (або ^{228}Th), які знаходяться в рівновазі з іншими членами уранового і торієвого рядів.

Для всіх досліджених зразків мінеральних добрив виконується умова (1). Однак присутність у зразках добрив ізотопу ^{40}K , який не враховується даною формулою, не дозволяє зробити висновок о відсутності небезпеки при використанні даних добрив. Безконтрольне використання мінеральних добрив може призвести до негативного їх впливу на ґрунти, рослинницьку продукцію та населення в цілому [1]. Тому нами була розроблена методика розрахунку залишкової допустимої концентрації природних радіонуклідів в ґрунті і корекції норм внесення мінеральних добрив [3]. Результати розрахунку залишкової активності ПРН у ґрунті ($C_{\text{ПРН ґрунту}}$) і їх залишкової допустимої концентрації (ЗДК_{ПРН}) в ґрунті наведено в табл.2. Виходячи з результатів розрахунків видно, що залишкова активність радіонуклідів у ґрунті повинна бути нижче їх питомої активності при внесенні від 19,4 до 156,9 рази.

Таблиця 2

Результати розрахунків $C_{\text{ПРН ґрунту}}$ і ЗДК_{ПРН} для досліджених зразків добрив

№ зразка	$C_{\text{ПРН ґрунту}}$, Бк/кг ґрунту			$\sum C_{\text{ПРН ґрунту}}$, Бк/кг	ЗДК _{ПРН} , мг/кг ґрунту		
	^{232}Th	^{226}Ra	^{40}K		^{232}Th	^{226}Ra	^{40}K
1	$3,84 \cdot 10^{-5}$	$1,70 \cdot 10^{-4}$	–	$2,084 \cdot 10^{-4}$	$9,36 \cdot 10^{-6}$	$4,71 \cdot 10^{-12}$	–
2	$2,10 \cdot 10^{-5}$	$4,14 \cdot 10^{-4}$	–	$4,350 \cdot 10^{-4}$	$5,12 \cdot 10^{-6}$	$1,15 \cdot 10^{-11}$	–
3	$4,01 \cdot 10^{-5}$	$3,15 \cdot 10^{-5}$	$3,88 \cdot 10^{-5}$	$1,104 \cdot 10^{-4}$	$9,78 \cdot 10^{-6}$	$8,73 \cdot 10^{-13}$	$1,54 \cdot 10^{-7}$
4	$3,21 \cdot 10^{-5}$	$4,06 \cdot 10^{-5}$	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$1,937 \cdot 10^{-4}$	$7,83 \cdot 10^{-6}$	$1,12 \cdot 10^{-12}$	$4,79 \cdot 10^{-7}$
5	$1,19 \cdot 10^{-5}$	$4,10 \cdot 10^{-6}$	$3,12 \cdot 10^{-3}$	$3,136 \cdot 10^{-3}$	$2,90 \cdot 10^{-6}$	$1,14 \cdot 10^{-13}$	$1,24 \cdot 10^{-5}$
6	$1,31 \cdot 10^{-5}$	$6,11 \cdot 10^{-6}$	$3,12 \cdot 10^{-3}$	$3,139 \cdot 10^{-3}$	$3,19 \cdot 10^{-6}$	$1,69 \cdot 10^{-13}$	$1,24 \cdot 10^{-5}$
7	$1,20 \cdot 10^{-5}$	$3,97 \cdot 10^{-4}$	–	$4,090 \cdot 10^{-4}$	$2,93 \cdot 10^{-6}$	$1,10 \cdot 10^{-11}$	–
8	$2,74 \cdot 10^{-5}$	$8,54 \cdot 10^{-4}$	–	$8,814 \cdot 10^{-4}$	$6,68 \cdot 10^{-6}$	$2,37 \cdot 10^{-11}$	–
9	$2,20 \cdot 10^{-5}$	–	$3,25 \cdot 10^{-3}$	$3,272 \cdot 10^{-3}$	$5,36 \cdot 10^{-6}$	–	$1,29 \cdot 10^{-5}$
10	$6,04 \cdot 10^{-5}$	$3,56 \cdot 10^{-4}$	–	$4,164 \cdot 10^{-4}$	$1,47 \cdot 10^{-5}$	$9,87 \cdot 10^{-12}$	–
11	$2,07 \cdot 10^{-5}$	–	$9,96 \cdot 10^{-3}$	$9,981 \cdot 10^{-3}$	$5,05 \cdot 10^{-6}$	–	$3,95 \cdot 10^{-5}$

Таким чином, досліджені добрива дають досить високий рівень забруднення ґрунту ПРН в порівнянні з можливим залишковим рівнем. Для забезпечення радіаційної безпеки необхідно переглянути норми внесення в ґрунт радіаційно-забруднених мінеральних добрив. З метою збереження родючості ґрунтів рекомендується внесення альтернативних форм добрив.

1. Дорогунцов С.І., Борщевський П.П., Данилишин Б.М. Удосконалення управління природокористуванням в АПК. – К.: Урожай, 1992. – 128 с.
2. Нормы радиационной безопасности Украины (НРБУ-97). – К.: МОЗ, 1998. – 159 с.
3. Калмыкова Ю.С. Методика расчёта остаточной допустимой концентрации естественных радионуклидов в почве и коррекции норм внесения минеральных удобрений / Ю.С. Калмыкова, М.И. Уханёва, Э.Б. Хоботова // Материалы VI междунар. студ. науч. конф. «Прикладные задачи математики в механике, экономике, экологии». – Севастополь: СевНТУ, 2008. – С. 129-131.

ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДУ РЕФРАКТОМЕТРІЇ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ЯКОСТІ ПРОДУКТІВ ХАРЧУВАННЯ НА ПРИКЛАДІ МЕДУ

Камінський О.М., Тітов Ю.О., Хильчук Д.І.

Житомирський державний університет ім. Івана Франка, dianakhylchuk@ukr.net

В умовах світової медичної кризи актуальним залишається питання якості харчових продуктів як одного з факторів безпосереднього впливу на стан здоров'я людини.

Харчовий продукт - це багатокомпонентна система, якість якої залежить від властивостей та змін в складі і структурі харчової сировини, які відбуваються при технологічній обробці та зберіганні. Якість харчового продукту - це ступінь досконалості властивостей та характерних рис харчового продукту, які здатні задовольнити потреби та побажання тих, хто споживає або використовує цей харчовий продукт [1].

Мед відноситься до найбільш цінних продуктів харчування. Отримання його пов'язане із значними матеріальними затратами. Це обумовлює високі ціни на натуральний мед, що в свою чергу робить його досить привабливим об'єктом фальсифікації. Способи фальсифікації меду численні і різноманітні; це і грубі підробки, які легко виявити (механічні домішки борошна, крейда і інші замітники), і витончені підробки, які важко виявити (наприклад, підкормка бджіл цукровим сиропом) [2].

Оскільки мед володіє властивостями, які покращують імунітет, дослідження його якості різними фізико – хімічними методами є також актуальною задачею.

Метою роботи є: визначити вміст води (у %) за показником заломлення у меді різних виробників.

Рефрактометричний метод аналізу ґрунтується на дослідженні явища заломлення променя світла при переході із однієї фази в іншу. Перевагами даного методу є: швидкість вимірювання, мала витрата речовин та висока точність.

В якості об'єктів для дослідження використано мед різних виробників та інвертний цукор (глюкозний сироп).

Методики дослідження використано з ДСТУ 4497:2005 «Мед натуральний. Технічні умови»: наважку меду, масою 5 г вносили в суху пробірку, закривали гумовим корком та нагрівали на водяній бані при температурі 60 °С протягом 5 хвилин (до повного розчинення кристалів меду). Вміст пробірки добре перемішували та охолоджували до кімнатної температури. Далі одну краплю рідкого меду наносили на призму рефрактометра і вимірювали коефіцієнт заломлення. Отриманий коефіцієнт заломлення порівнювали з табличними даними, зазначеними в [3].

Встановлено, що окрім інвертного цукру (глюкозного сиропу) мед різних виробників за показником вологості (вмісту води у %) відповідає ДСТУ 4497:2005.

1. Закон України «Про забезпечення та якість харчових продуктів» із змінами від 20 грудня 2019 року N 421-IX. [Електронний ресурс]. Режим доступу: <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/421-20#n30>

2. Дубініна А. А., Овчиннікова І. Ф., Дубініна С. О. та ін. Методи визначення фальсифікації товарів. Підручник. — К.: «Видавничий дім «Професіонал»», 2010. — 272 с.

3. ДСТУ 4497:2005 «Мед натуральний. Технічні умови». [Електронний ресурс]. Режим доступу: https://lab.biz.ua/apps/dstu_4497-2005.pdf

ВИЗНАЧЕННЯ ДЕКАМЕТОКСИНУ З ФЛЮОРЕСЦЕНТНИМИ РЕАГЕНТАМИ В АНТИСЕПТИЧНИХ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБАХ

Кловак В.О., Лелюшок С.О., Куліченко С.А.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, vikaklovak@ukr.net

Використання організованих систем на основі поверхнево-активних речовин (ПАР) часто призводить до покращення якості аналітичного сигналу у методах молекулярної спектроскопії, таких як флюоресценція, спектрофотометрія та кольориметрія. Доцільність використання розчинів ПАР у флюоресцентному аналізі визначається величинами змін положення максимуму довжин хвиль (λ_{\max}) та інтенсивності флюоресценції розчинів реагенту у присутності ПАР. Напрямок і величину зміни характеру λ_{\max} найчастіше пояснюють зміною полярності мікрооточення частинки реагенту внаслідок сольобілізації. На інтенсивність сигналу флюоресценції також будуть впливати характер асоціації з реагентом, склад утворюваних асоціатів, процеси їх сольобілізації, а також процеси концентраційного гасіння.

Метою роботи було дослідити вплив поверхнево-активних речовин різних типів на їх аналітичний сигнал при взаємодії з флюоресцентними реагентами (таблиця) за умов реалізації та відсутності електростатичного притягання між частинкою реагенту та ПАР.

Таблиця

Досліджені флюоресцентні реагенти.	
Реагент	Заряд*
Морин	4 ⁻
Флуоресцеїн	2 ⁻
Еозин Н	2 ⁻
Люмінол	0
Люцигенін	1 ⁺
Родамін С	1 ⁺
Родамін 6Ж	2 ⁺

*Заряди частинок реагенту визначали з урахуванням наявних у літературі значень рК або оцінок протолітичних констант, розрахованих за програмою ICDLab v.4.0.

Дослідженням спектрів флюоресценції реагентів у розчинах ПАР з'ясовано тенденції впливу заряду та гідрофобності частинок реагенту на спектральні зміни. Встановлено, що при збільшенні заряду частинки реагенту при його взаємодії з протиіоном поверхнево-активної речовини аналітичний сигнал ПАР у системі загалом збільшується. Ця тенденція простежується як для систем катіонної ПАР, так і для аніонної ПАР. Збільшення гідрофобності реагенту також підвищує аналітичний сигнал поверхнево-активних речовин і найбільш гідрофобні еозин Н та родамін 6Ж дають максимальні значення аналітичного сигналу у розчинах катіонного, аніонного та неіонного ПАР. Додатково ці ефекти підсилюються при близькості зарядів протилежно заряджених частинок реагенту та ПАР, за умов зарядової відповідності. Прояв ефекту зарядової відповідності збільшується при підсиленні гідрофобного зв'язування протилежно заряджених частинок реагенту та ПАР. Зазначені тенденції також реєструються при дослідженні зміни положення максимуму довжин хвиль емісії розчинів реагентів у мицелярних розчинах і простежуються навіть у розчинах неіонного Triton X-100. Зазначені ефекти частково нівелюються для реагентів, які проявляють слабкі сольватохромні властивості.

Виявлені ефекти використали при розробці методики флюоресцентного детектування органічної речовини катіонної природи за реакцією з еозином Н. Розроблену методику випробували при оцінці вмісту декаметоксину у таблетках «Септефрил» та розчині «Декасан».

КОНТРОЛЬ ВМІСТУ НІТРАТІВ У ПЛОДООВОЧЕВІЙ ПРОДУКЦІЇ

Коваль А.В., Стаднічук Н.О., Голінько О.М., Кроніковський О.І.

ДП «Науковий центр превентивної токсикології, харчової та хімічної безпеки

імені академіка Л.І.Медведя МОЗ України», stadnna@gmail.com

Національний університет харчових технологій

Згідно з висновком Комітету експертів ВОЗ допустима добова доза нітратів для людини складає 3,7 мг/кг маси тіла. Основними джерелами надходження нітратів в організм людини є овочі (70%) та питна вода (20%) [1]. Нітрати широко використовуються в якості добрива при вирощуванні плодоовочевої продукції. Токсична дія нітратів на організм людини проявляється через продукт їх відновлення – нітрити. Характер токсичної дії нітритів подвійний. По-перше, через утворення метгемоглобіну; по-друге, через блокування на певних етапах окислювально-відновлювальних реакцій у клітинах.

Саме навесні, питання щодо контролю місту нітратів в плодоовочевої продукції стає найбільш актуальним. Причина тому: збільшення в раціоні харчування ранньої овочевої продукції та листової зелені, які є значним джерелом надходження нітратів в організм людини. За результатами багаторічних досліджень, проведених в світі, встановлено, що ризики від споживання плодоовочевої продукції, яка містить нітрати, набагато менші, ніж ризики від обмежень споживання плодоовочевої продукції, оскільки овочі і фрукти, свіжа зелень є джерелом вітамінів, мінеральних речовин, біологічно активних речовин та харчових волокон у раціоні людини. Деякі автори взагалі вважають, що небезпека вживання плодоовочевої продукції, що містить нітрати, значно перебільшена.

В Європі вміст нітратів у харчових продуктах регламентується Правилами Комісії (ЄС) №194/97, Постановою Ради Європи (ЄС) №1881/2006 від 19 грудня 2006 р. та Постановою Ради (ЄС) №1258/2011 від 2 грудня 2011 року тільки для певних видів листових овочів: шпинат, латук, салат айсберг та для дитячого харчування) [1].

В Україні допустимі рівні вмісту нітратів у продукції регламентуються «Державними санітарними правилами і нормами «Максимально допустимі рівні окремих забруднюючих речовин у харчових продуктах», затвердженими Наказом Міністерства охорони здоров'я України 13 травня 2013 року № 368 (у редакції наказу Міністерства охорони здоров'я України від 22 травня 2020 року № 1238), зареєстровані в Міністерстві юстиції України 21 липня 2020 р. за № 684/34967 [2]. Максимально допустимі рівні вмісту нітратів наведені в розділі І. Перелік містить 23 найменування продуктів: рання листова зелень, овочі захищеного та відкритого ґрунту, фрукти.

В Дослідницько-випробувальному токсикологічному центрі проведені дослідження по визначенню нітратів у зразках овочів та фруктів. Визначення вмісту нітратів проводились із використання кадмієвої колонки фотометричним методом згідно з ДСТУ 4948:2008 «Фрукти, овочі та продукти їх перероблення. Методи визначення вмісту нітратів». Стандарт поширюється на фрукти, овочі, продукти перероблення фруктів та овочів і встановлює методи визначання нітратів: фотометричний та іонометричний [3].

Встановлено, що найбільша кількість нітратів міститься у листових зеленних культурах закритого ґрунту (рукола, базилік зелений, базилік фіолетовий, огірки). Вміст нітратів у руколі перевищував допустимий рівень на 34%, у базиліку зеленому – на 41%, у базиліку фіолетовому – на 114%, у огірках - на 110%, тоді як вміст нітратів у інших овочах та фруктах не перевищував максимально допустимих рівнів.

1. Державні санітарні правила і норми «Максимально допустимі рівні окремих забруднюючих речовин у харчових продуктах», зареєстровані в Міністерстві юстиції України 21 липня 2020 р. за № 684/34967.

2. ДСТУ 4948:2008 «Фрукти, овочі та продукти їх перероблення. Методи визначення вмісту нітратів».

3. Голінько О., Коваль А., Мороз Т., Стаднічук Н. та ін. Нітрати у плодоовочевої продукції. Сучасний погляд // III Н.Всеукраїнська науково-практична конференція «Актуальні проблеми хімії та хімічної технології». – Київ. –2018. – С.180-182.

**ДОСЛІДЖЕННЯ КОМПОНЕНТНОГО СКЛАДУ ТА АНТИОКСИДАНТНИХ
ВЛАСТИВОСТЕЙ ЕКСТРАКТІВ ЗІ ЖМИХУ ЧОРНОЇ СМОРОДИНИ (*Ribesnigrum L.*)
ТА АБРИКОСУ (*PrunusarmeniacaL.*)**

Корнякова О. О., Гладун К. В. Воробйова В.І., Васильєв Г.С.

НТУУ «Київський політехнічний інститут» імені Ігоря Сікорського,
oleksiivnaolika99@gmail.com

Фрукти та овочі є найбільш вживаними товарами серед усіх садівничих культур. Значні відходи з їх переробки стають серйозною харчовою, економічною та екологічною проблемою. Наприклад, Організація Об'єднаних Націй з продовольства та сільського господарства (ФАО) підрахувала, що відходи з фруктів та овочів можуть сягати до 60%. В процесі їх переробки утворюються значні відходи побічних продуктів, які складаються в основному з насіння, шкірки та жмиху. Вони в своєму складі можуть містити комплекс біологічно активних речовин (БАР), які володітимуть антиоксидантною активністю [1]. Отже, існує перспектива використання екстрактивної частини відходів фруктів та овочів у різноманітних галузях хімічної технології. Наприклад, дані БАР можуть бути використані для синтезу наночастинок металів [2], як природний консервант та антиоксидант у косметичці та харчових продуктах, а також для гальмування корозії металів у корозійних середовищах [3].

Чорна смородина та абрикос широко культивуються в Україні та інших європейських країнах. Окрім того, що їх споживають у свіжому вигляді, вони вирощуються для переробки на сік, варення, киселі та нутрицевтичні інгредієнти. У даних виробництва жмих припадає приблизно 40% від загальної кількості відходів абрикоса та 22% відходів (шкірка й насіння) у виробництві соків чорної смородини [4]. Метою роботи є дослідження хімічного складу екстрактів жмиху абрикоса та чорної смородини та оцінка їх антиоксидантної здатності. Для проведення екстракції жмих чорної смородини або абрикоса змішували з дистильованою водою у співвідношенні 1:10 (мас. / об.) за температури 25 ° С. Суміш поміщали в ультразвукову ванну. Процес екстракції відбувався протягом 2 годин з частотою 27 кГц та інтенсивністю 6 Вт / см². Хімічний склад жмиху чорної смородини та абрикоса досліджувався методами рідинної хроматографії з мас-спектроскопією (LC-MS) та високоефективної рідинної хроматографії з УФ-детектором (HPLC-DAD). Основними компонентами є фенольні сполуки, гідроксикинатна кислота та флавоноїди. Обидва екстракти оцінювали на антиоксидантну активність за допомогою аналізу на фосфомолібдат. Загальна антиоксидантна активність становить 560,96 ± 1,01 та 370,45 ± 1,01 мг АСЕ / г екстракту абрикосового жмиху та чорної смородини відповідно.

Таким чином, аналіз складу водних екстрактів жмиху чорної смородини та абрикоса показує, що він містить широкий спектр БАР і, отже, є потенційною сировиною для використання в якості джерела антиоксидантів.

1. Sagar N. A., Pareek S., Sharma S., Yahia E. M., Lobo M. G. Fruit and Vegetable Waste: Bioactive Compounds, Their Extraction, and Possible Utilization // *Comp. Reviews in Food Sci. and Food Saf.* — 17(3). — 2018. — P. 512-531.

2. Skiba M., Vorobyova V., Shakun A., Plasma-chemical prepared aqueous grape pomace extract as green reductant for the synthesis of silver nanoparticles: antimicrobial and antioxidant activity// *J. Chem. Technol. Metall.* — 2020. — 55, 1.— P. 55-59.

3. Vorobyova V., Chygyrynets O., Skiba M., Kurmakova I., Bondar O., Self-assembled monoterpene phenol as vapor phase atmospheric corrosion inhibitor of carbon steel// *Int. J. Corros. Scale Inhib.* — 2017— 6 (4) — P. 485-503.

4. FAO (2013). Food wastage footprint: Impacts on natural resources – Summary report Retrieved from <http://www.fao.org/docrep/018/i3347e/i3347e.pdf>

АЗОСПОЛУКА ЦЕФТРИАКСОНУ З 2-МЕТИЛФЕНОЛОМ, ЯК ДЕРИВАТ ДЛЯ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ АНТИБІОТИКА У ЛІКАХ

Костів О.І., Коркуна О.Я., Орнат М.П., Футрик А.Н.

Львівський національний університет імені Івана Франка, oksana.kostiw@lnu.edu.ua

Спектрофотометрія через свою простоту та доступність обладнання знайшла широке застосування в аналізі лікарських засобів, особливо що стосується аналізу субстанцій та однокомпонентних лікарських форм. Для спектрофотометричного визначення цефтріаксону використовують ряд кольорових реакцій, зокрема, комплексоутворення з іонами металів; комплексоутворення з перенесенням заряду; редокс реакції; гідроліз з наступною реакцією з кольоровими реагентами; утворення іонних пар та азосполучення з фенольними сполуками. Однак багато запропонованих методик є суперечливими або пропонують використання малодоступних органічних реагентів і досить часто є довготривалими у виконанні. Тому пошук нових реагентів для спектрофотометричного аналізу ліків на основі цефтріаксону залишається актуальним.

Цефтріаксон – напівсинтетичний антибіотик групи бета-лактамів, цефалоспорин III покоління, гетероциклічна сполука, яка містить різні функціональні групи, зокрема, первинну ароматичну аміногрупу. Тому для отримання нової аналітичної форми для визначення цефтріаксону ми обрали реакцію азосполучення із 2-метилфенолом.

Для діазотування цефтріаксону ми обрали концентровану хлоридну кислоту для подолання утворення продукту азосполучення молекул антибіотика між собою яке відбувається навіть у кислому середовищі. З цією самою метою для азосполучення ми використовували лужний розчин реагенту 2-метилфенолу. Оптимальні умови азосполучення та діазотування наведені в таблиці.

Таблиця

Умови діазотування ЦЕФТР та подальшого азосполучення з 2-метилфенолом.

Діазотування	
Порядок додавання реагентів	[HCl + ЦЕФТР + NaNO ₂]
Концентрація HCl	12,0 моль/л
Концентрація NaNO ₂	> 10-кратний надлишок до концентрації ЦЕФТР
Час утворення діазосоли	5 хв при 20° С
Азосполучення	
Порядок додавання реагентів	[ЦЕФТР _{діаз} + 2-Мет (приготований на 4 М NaOH)]
Концентрація 2-Мет	10-кратний надлишок до концентрації ЦЕФТР
C(NaOH) в кінцевому розчині	0,16 моль/л

При взаємодії діазосоли цефтріаксону з лужним розчином 2-метилфенолу утворюється забарвлена у пурпуровий колір сполука, яка на спектрах світлопоглинання характеризується появою нового максимуму при $\lambda_{\max}=516$ нм. Непрореагований натрій нітрит із реакційного середовища усувати не варто бо це призводить до зменшення аналітичного сигналу.

Величина аналітичного сигналу забарвленого азопродукту у системі ЦЕФТР–2-Мет лінійно залежить від концентрації цефтріаксону в розчині в межах 2,5 концентраційних порядків $((0,37-92,50) \cdot 10^{-6}$ моль/л; 0,21–51,30 мкг/мл). Чутливість реакції взаємодії ЦЕФТР із 2-метилфенолом є високою: $C_{\min} = 4,30 \cdot 10^{-7}$ моль/л, $C_H = 1,29 \cdot 10^{-6}$ моль/л і переважає більшість відомих спектрофотометричних методик визначення цефтріаксону. Розроблену методику перевірено методом “введено – знайдено”.

Препарати цефтріаксону виготовляють у вигляді ін'єкційних лікарських форм, оскільки, антибіотик руйнується під дією шлункового соку. Тому розроблену методику успішно апробовано при аналізі порошків для приготування розчинів для ін'єкцій “Цефтриаксон” (Китай) та “ЕМСЕФ 1000” (Індія), які містять чистий натрій цефтріаксон тригідрат.

ЕКСТРАКЦІЯ КОМПЛЕКСІВ ТРИЗАРЯДНИХ КАТІОНІВ МЕТАЛІВ З КРАУН-ЕТЕРАМИ ТА ТРИХЛОРАЦЕТАТНОЮ КИСЛОТОЮ

Кроніковський О., Мисюк О., Стаднічук Н.

Національний університет харчових технологій,

ДП «Науковий центр превентивної токсикології, харчової та хімічної безпеки імені академіка Л. І. Медведя Міністерства охорони здоров'я України»,

oleg.kronikovsky@gmail.com

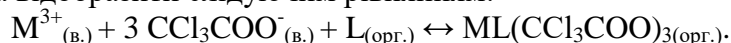
В присутності літій трихлорацетату і краун-етерів в органічну фазу в різній мірі можуть переходити різнолігандні комплекси цілого ряду катіонів металів. Так, із одно- та двозарядних катіонів в присутності 18-краун-6 спостерігається екстракція хлороформом трихлорацетатів Na^+ , K^+ , Rb^+ , Cs^+ , Ag^+ , Tl^+ , Ca^{2+} , Sr^{2+} , Ba^{2+} і Pb^{2+} . При цьому ступінь екстракції лишається практично незмінним від нейтральних розчинів аж до 1 М нітратної кислоти.

Тризарядні катіони Бісмуту, Лантану, Церію, Празеодиму і Неодиму в присутності краун-етерів 18-краун-6, 15-краун-5 і дициклогексил-18-краун-6 та трихлорацетату літію в різній мірі екстрагуються хлороформом із водних розчинів з $\text{pH} = 1 - 6$. В присутності дибензо-18-краун-6 трихлорацетати РЗЕ в помітній мірі хлороформом не вилучаються.

Підвищення кислотності розчину веде до зростання переходу 18С6 в органічну фазу за рахунок утворення асоціату з трихлорацетатною кислотою. Сама CCl_3COOH лише в незначній мірі переходить в хлороформ. При $\text{pH} > 3$ утворенням асоціату можна знехтувати. Тому для отримання констант екстракції комплексів катіонів металів з 18С6 і CCl_3COOH експеримент проводили при $\text{pH} > 3$ з урахуванням зміни константи розподілу краун-етера.

Концентрація трьохзарядних йонів РЗЕ в кінцевому об'ємі не перевищувала $1 \cdot 10^{-4}$ моль/л. Екстракцію вели при рівних об'ємах водної та органічної фаз. Для визначення рівноважної концентрації лантаноїдів в органічній фазі після екстракції проводили двократну реекстракцію їх ацетатним буферним розчином ($\text{pH} = 3$). Вміст РЗЕ в реекстракті знаходили спектрофотометричним методом з арсеназо-III ($\lambda_{\text{max}} = 665$ нм).

Методом зміщення рівноваги було визначено, що за досліджуваних концентраційних умов в органічну фазу лантаноїди переходять в виді комплексів, що містять одну молекулу краун-етеру та три трихлорацетат-йони. Таким чином, процес екстракції тризарядних катіонів металів можна відобразити слідуєчим рівнянням:



Відповідно, вираз для константи екстракції матиме вигляд:

$$K_{\text{ex}} = [\text{ML}(\text{CCl}_3\text{COO})_{3(\text{орг.})}] / [\text{M}^{3+}]_{(\text{в.})} [\text{L}]_{(\text{орг.})} [\text{CCl}_3\text{COO}^{-}]^3_{(\text{в.})}$$

Виходячи із даних методу зміщення рівноваги, нами розраховані концентраційні константи екстракції K_{ex} комплексів РЗЕ з краун-етерами та трихлорацетат-йоніом.

При розрахунку K_{ex} комплексу $\text{Bi} \cdot 18\text{C}6 \cdot (\text{CCl}_3\text{COO})_3$ брали до уваги комплексоутворення Бісмуту з $\text{CCl}_3\text{COO}^{-}$ в водній фазі та асоціацію 18-краун-6 з CCl_3COOH в органічній фазі, оскільки експеримент проводили при pH водної фази рівному 1.

Отримані значення K_{ex} свідчать, що екстракційна здатність в трихлорацетатній системі знижується в ряду 18-краун-6 > дициклогексил-18-краун-6 >> дибензо-18-краун-6 для 18-членних макроциклів. Не зважаючи на те, що за радіусом йони Ln^{3+} , ближчі до 15-краун-5, ніж до 18-краун-6, однак екстракція 15-членними макроциклами значно менш ефективна.

Звертають на себе увагу досить значні розбіжності в значеннях констант екстракції трихлорацетатних комплексів РЗЕ з 18-краун-6. Спостерігається хороша кореляція між $\lg K_{\text{ex}}$ і $1/r$. Слід відмітити, що отримані величини констант екстракції добре корелюють зі значеннями констант стійкості комплексів РЗЕ з 18-краун-6 в метанолі. В випадку РЗЕ вплив розчинника та протийона на екстракцію навіть більший, ніж розмір порожнини краун-етера.

КІЛЬКІСНЕ ВИЗНАЧЕННЯ СУМИ КАТЕХІНІВ З ВАНІЛІНОМ, ІММОБІЛІЗОВАНИМ В ЖЕЛАТИНОВІЙ ПЛІВЦІ

Кушніт Д. К., Коновалова О. Ю., Швець О. Г.

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, dianakushpit2708@gmail.com

Катехіни (флаван-3-оли) є одними з представників флавоноїдних сполук, що проявляють антиоксидантну, гіпотензивну та антиканцерогенну дію. В природі вони широко розповсюджені в об'єктах рослинного походження, зокрема, в чайному кущі *Camellia sinensis*. Окрім катехінів, чайна рослина також багата на *проантоціанідіни* (конденсовані таніни), які відповідно до ступеня полімеризації n поділяють на олігомерні ($n = 2-8$) та полімерні ($n > 8$). Для кількісного визначення наведених речовин прийнято використовувати спектрофотометричну методику на основі реакції конденсації з ваніліном у водному розчині HCl або H₂SO₄ [1]. Спеціально розроблена модифікація класичної методики заснована на утворенні стабільного забарвленого продукту реакції між катехінами та ваніліном в присутності HClO₄ в затверділому желатиновому гелі фотографічних плівок, попередньо очищених від сполук срібла. Використання прозорих індикаторних засобів з фіксованою кількістю іммобілізованого реагенту та можливість їх зберігання впродовж тривалого часу, дозволяє значно спростити та здешевити аналіз.

Метою роботи є перевірка правильності методики кількісного визначення суми мономерних катехінів та олігомерних проантоціанідінів за допомогою індикаторних плівок, що містять ванілін. Також у роботі оцінювали вміст суми катехінів в зразках чаїв.

Методика одержання стандартної речовини препарату комплексу катехінів зеленого чаю ТМ «ХЕЙЛІС» складалася з трьох етапів: вилучення кофеїну та пігментів обробкою вихідної сировини хлороформом, двоступінчаста екстракція цільових компонентів 96 % етиловим спиртом в статистичному режимі при кімнатній температурі та роторне випаровування розчинника у вакуумі. *Препарат комплексу катехінів (вітаміну Р)* являє собою порошок зеленувато-жовтого кольору зі специфічним запахом свіжовисушеного сіна та сухих фруктів.

Реакція з ваніліном є досить специфічною, проте на неї впливає ряд побічних речовин, таких, як: кофеїн, пігменти, зокрема хлорофіл, полімерні проантоціанідіни та антоціани. Враховуючи зазначене, однією із задач роботи був вибір такої пробопідготовки рослинної сировини, яка забезпечувала б повне відокремлення вищеперелічених речовин. Для цього, точну наважку рослинної сировини обробляли хлороформом впродовж 1 год, потім сушили на повітрі та екстрагували суму катехінів 96 % етиловим спиртом протягом 1 год. Індикаторні плівки занурювали на 2 хв у водно-етанольні розчини аналітів, що містили 2 моль/л HClO₄. Світлопоглинання рожевих прозорих плівок, що містили продукт взаємодії катехінів з ваніліном, реєстрували через 1 год при 510 нм.

Правильність методики кількісного визначення суми мономерних катехінів та олігомерних проантоціанідінів перевіряли *методом «введено-знайдено»*. Одержані результати вказували на відсутність систематичної складової похибки аналізу.

Вміст суми катехінів в залежності від сорту чаю та цінової категорії готового продукту оцінювали у чотирьох зразках чаю: зеленого – ТМ «АХМАД ПІ» та ТМ «ПРИНЦЕСА ЯВА», середньої і низької категорії вартості, чорного – ТМ «АКБАР» та ТМ «ПРИНЦЕСА НУРІ», високої і низької категорії відповідно. При аналізі кожного зразка, відносна похибка результатів не перевищувала 7 %. Методика визначення суми катехінів з індикаторними плівками, що містять ванілін, підтвердила той факт, що зі збільшенням ступеня ферментації чаю кількість мономерних та олігомерних молекул, а, відповідно, вільних катехінів та олігомерних проантоціанідінів, суттєво зменшується. Цінова категорія зеленого чаю не впливала на вміст катехінів у ньому, на противагу чорному. Економний варіант продукту містив в 2 рази більше катехінів на відміну від його більш вартісного аналогу. Це може бути пов'язано з неповним процесом ферментації дешевого чаю або зі впливом строку придатності дорогого чаю.

Кількісне визначення суми мономерних катехинів та олігомерних проантоціанідинів проводили *методом стандартних добавок* (рис. 1). Приклад визначення вмісту суми катехинів в зеленому чаї ТМ «АХМАД ТІ» та в чорному чаї ТМ «ПРИНЦЕСА НУРІ» наведено на рисунку. Вміст катехинів у першому випадку склав (34 ± 12) мг/г, а у другому – $(3,3 \pm 1,0)$ мг/г.

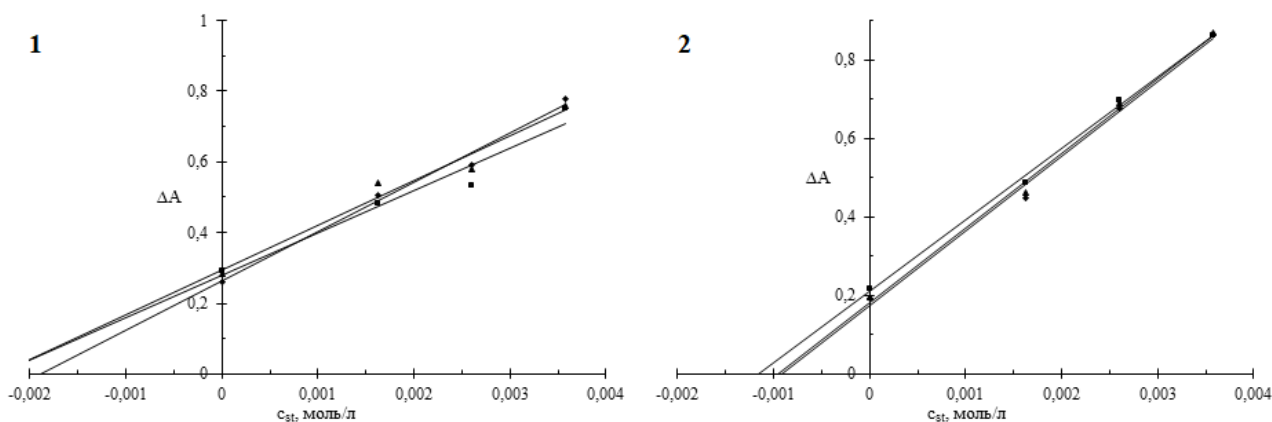


Рис. Графічний варіант методу стандартних добавок при визначенні суми катехинів в зеленому (1) та чорному (2) чаях

Одержані з індикаторними плівками, що містять ванілін, результати щодо вмісту суми катехинів в зразках зеленого та чорного чаю, загалом узгодились з результатами, що були отримані методом твердофазної люмінесцентної спектроскопії [2, 3].

1. Запрометов М. Н. Биохимия катехинов. – М.: Наука, 1964. – 294 с.
2. Бельтюкова С. В., Бычкова А. А. Определение катехинов методом твердофазной люминесцентной спектроскопии // Методы и объекты химического анализа. – 2012. – 7, № 2. – С. 81-86.
3. Бельтюкова С. В., Бычкова А. А. Сорбционно-люминесцентное определение катехинов // Харчова наука і технологія. – 2011. – 16, № 3. – С. 42-46

СПЕКТРАЛЬНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПРИРОДНИХ КОРИЧНИХ КИСЛОТ, СОРБОВАНИХ НА ПОВЕРХНІ ОКСИДУ АЛЮМІНІЮ

Ліпковська Н.О., Барвінченко В.М.

Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, Київ, lipkovska@ukr.net

Природні коричні кислоти (ПКК) – корична і її гідрокси-похідні: кумарова (4-гідроксикорична), ферулова (3-метокси-4-гідроксикорична) і кавова (3,4-дигідроксикорична) кислоти належать до класу поліфенолів рослинного походження і мають широкий спектр фармакологічних властивостей [1]. В теперішній час для їх вилучення та визначення в різних об'єктах, а саме, в нативних лікарських рослинах, медичних препаратах на їх основі, харчових продуктах, застосовують переважно сорбційно-хроматографічні методи високоефективної рідинної хроматографії з використанням хімічно модифікованих силікагелей, сополімерів полістиролу і дивінілбензолу, цеолітів [2]. В той же час, за результатами комплексних адсорбційних і спектральних досліджень взаємодії природних поліфенолів кверцетину та рутину з високодисперсним оксидом алюмінію в водно-етанольному середовищі нами було показано [3], що оксид алюмінію є перспективним твердофазним реагентом для їх вилучення та визначення в препаратах лікарських рослин сорбційно-спектрофотометричним та візуально-тестовим методами. Оскільки відомості про використання оксиду алюмінію для концентрування і визначення ПКК в літературі відсутні,

розробка простих, експресних і недорогих методів аналізу окремих представників цього класу сполук, заснованих на поєднанні їх сорбційного концентрування і подальшого визначення безпосередньо в фазі сорбенту, залишається актуальним завданням.

В роботі використовували високодисперсний пірогенний оксид алюмінію Aeroxide Alu C з розміром частинок 13 нм і питомою поверхнею 100 м²/г (Evonik Degussa AG) у формі 0,2 % водної дисперсії (іонна сила 0,01 н). Сорбцію коричних кислот на поверхні оксиду алюмінію вивчали в статичних умовах, для чого 10 мл розчину ПМК відповідної концентрації змішували з 10 мл 0,2% водної дисперсії сорбенту, встановлювали необхідне значення рН розчину, перемішували до встановлення рівноваги (2 години при 20°C), вимірювали спектри поглинання дисперсії ($A_{\text{дисп.}}$) і відповідного рівноважного розчину, відокремленого центрифугуванням ($A_{[C]}$). Спектр поглинання сорбованих кислот (A^S) визначали як арифметичну різницю: $A^S = A_{\text{дисп.}} - A_{[C]}$.

На підставі експериментальних даних, отриманих при дослідженні спектральних властивостей сорбованих коричних кислот, була досліджена можливість їх використання при розробці методик кількісної оцінки вмісту ПМК як на поверхні Al₂O₃, так і в розчинах. На рис. 1 наведені залежності оптичної густини A^S поверхневих комплексів ПМК від величин їх сорбції a (моль/г), які є лінійними в усьому діапазоні величин сорбції і характеризуються високими значеннями коефіцієнтів кореляції r^2 (0,983 - 0,994).

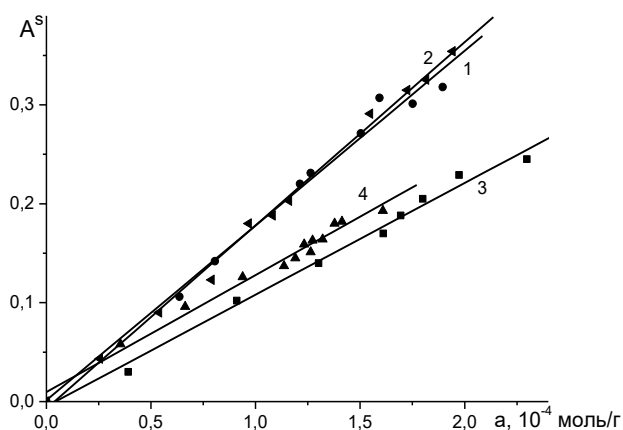


Рис.1 Залежність оптичної густини сорбованих коричної (1), кумарової (2), ферулової (3), кавової (4) кислот від розрахованих величин сорбції

За тангенсом кута нахилу наведених залежностей були визначені умовні молярні коефіцієнти поглинання (г/моль·см) поверхневих комплексів коричної ($\epsilon_{274}^S = 1766$), кумарової ($\epsilon_{286}^S = 2056$), ферулової ($\epsilon_{290}^S = 1139$) та кавової ($\epsilon_{350}^S = 1163$) кислот, що дозволяє оцінювати концентрацію коричних кислот, сорбованих на оксиді алюмінію з препаратів лікарських рослин, за їх оптичною густиною.

Також було розглянуто принципову можливість кількісного визначення коричних кислот у розчинах сорбційно-фотометричним методом з використанням оксиду алюмінію як твердофазного реагенту. Знайдено, що залежності $A_{\text{дисп}}$ від концентрації коричних кислот в початкових розчинах, наведені на рис.2, лінійні в діапазонах концентрацій $2 \cdot 10^{-6}$ - $9 \cdot 10^{-5}$ М і описуються рівняннями градувальних графіків, наведеними в таблиці. Знайдені значення коефіцієнтів кореляції ($R = 0,999$) вказують на високу точність і відтворюваність визначення коричних кислот даним методом.

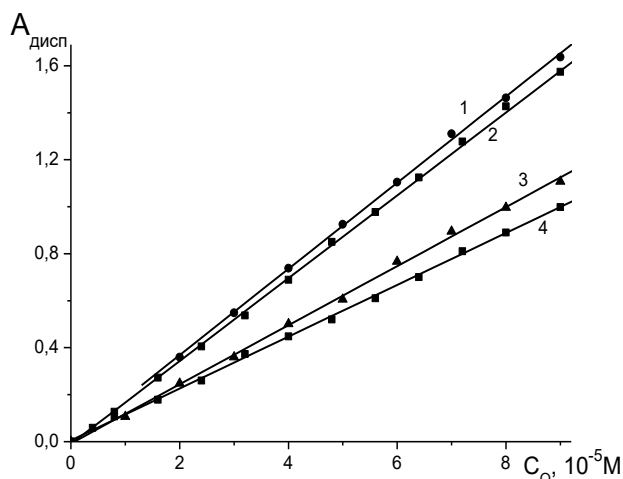


Рис. 2 Оптична густина суспензії оксиду алюмінію залежно від концентрації у розчині коричної (1), кумарової (2), ферулової (3) і кавової (4) кислот. λ , нм: 274 нм (1), 286 нм (2). 290 (3), 350 (4), рН $4,5 \pm 0,2$ (1-3), $6,5 \pm 0,2$ (4), $l=1$ см

Таблиця

Рівняння градувальних графіків у координатах « $A_{\text{дисп}}$ – концентрація кислоти»

Кислота	Рівняння градувальних графіків	R	n
Корична	$A_{\text{дисп}}(274) = (0,001 \pm 0,002) + (18345 \pm 200) C \text{ (M)}$	0,999	8
Кумарова	$A_{\text{дисп}}(286) = (-0,009 \pm 0,008) + (17629 \pm 138) C \text{ (M)}$	0,999	13
Ферулова	$A_{\text{дисп}}(290) = (-0,008 \pm 0,009) + (12578 \pm 166) C \text{ (M)}$	0,999	10
Кавова	$A_{\text{дисп}}(350) = (0,005 \pm 0,005) + (11035 \pm 166) C \text{ (M)}$	0,999	14

Слід зазначити, що відмінність сорбційних і спектральних властивостей кавової кислоти дозволяє селективно визначати її в присутності інших коричних кислот. Оптимальною для селективного визначення кавової кислоти є довжина хвилі 370 нм, при якій поглинання інших кислот дорівнює нулю. Таким чином, завдяки високій чутливості та контрастності (кольоровий перехід від білого до яскраво жовтого), оксид алюмінію може бути рекомендований як готовий твердофазний реагент для аналізу ПКК методом твердофазної спектрофотометрії і для візуального тест-визначення кавової кислоти.

1. Razzaghi-Asl N., Garrido J., Khazraei H., Borges F., Firuzi O. Antioxidant properties of hydroxycinnamic acids: a review of structure- activity relationships // *Curr. Med. Chem.* – 2013. – 20. – P. 4436–4450.

2. Шилько Е.А., Милевская В.В., Темердашев З.А., Киселева Н.В. Твердофазное концентрирование фенольных веществ из водных экстрактов лекарственного растительного сырья на примере звербоя (*Hypericum perforatum L.*) // *Аналитика и контроль.* – 2018. – 22, № 3. – P. 303–314.

3. Липковская Н.А., Барвинченко В.Н. Спектральные характеристики гидроксифлавонов, сорбированных на поверхности оксида алюминия // *Журн. прикл. спектр.* – 2019. – 86, № 4. – С. 614–619.

ЩОДО ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ ХІМІЧНОГО СКЛАДУ ЗАХИСНИХ МАСОК МЕДИЧНОГО ТА НЕМЕДИЧНОГО ПРИЗНАЧЕННЯ НА СТАН ДОВКІЛЛЯ

Лобойченко В.М.¹, Леонова Н.О.²

¹ Національний університет цивільного захисту України, vloboichm@gmail.com

² Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, leonovanatalia86@gmail.com

Пандемія COVID-19 змінила сучасний світ та висунула нові вимоги до заходів безпеки населення, що відвідує торгові мережі, лікарні, ринки, організації та установи різної підпорядкованості тощо. Як один з необхідних елементів забезпечення особистої та суспільної безпеки в Україні та в світі в цілому визначено використання захисних масок. В якості останніх виступають на сьогодні вироби як медичного, так і не медичного призначення. Значний спалах попиту на ці товари спричинив потрапляння в довкілля великої кількості використаних масок. Проблему ускладнює той фактор, що частина масок була вироблена з несертифікованих немедичних матеріалів, які в тому числі потрапили в навколишнє середовище.

Розвинені країни на сьогодні вже відзначають як проблему накопичення масок в довкіллі. В умовах зосередженості на безпосередніх наявних проблемах, пов'язаних з COVID-19, питання організованої утилізації захисних масок здається не таким нагальним. Але такий підхід лише посилює подальші негативні ефекти від неорганізованого складування та захоронення значної кількості захисних масок [1]. За умови масового їх накопичення може відбуватись вимивання як певної кількості хімічних сполук різного складу в водні об'єкти та ґрунти, так і безпосередньо пластику й мікропластику [2].

Хімічні речовини, що містяться в цих сертифікованих та несертифікованих виробках, за умов впливу різних зовнішніх факторів, можуть мігрувати в довкілля. Масовість використання захисних масок та відсутність дієвого контролю щодо їх якості не дозволяють однозначно стверджувати про відсутність подібного впливу на навколишнє середовище. Саме тому актуальним питанням є розуміння хімічних процесів, що відбуваються при потраплянні захисних масок в довкілля з подальшим прийняттям необхідних управлінських рішень як у сфері захисту довкілля, так і в інших напрямках.

Метою роботи є дослідження особливостей впливу хімічного складу захисних масок медичного та немедичного призначення на складові довкілля.

В роботі запропоновано виконати якісну та кількісну оцінку вмісту хімічних сполук, що потрапляють в навколишнє середовище при захороненні захисних масок на полігонах ТПВ, сміттєзвалищах та їх неконтрольованій утилізації. Дослідження вимивання хімічних сполук різного складу за різних умов з захисних масок пропонується здійснювати від одного до декількох місяців з використанням сучасних та класичних методів аналітичної хімії. Застосування низки модельних середовищ на водній та ґрунтовій основі забезпечує варіативність природних умов, та дозволяє оцінити можливі зміни якісного та кількісного складу при знаходженні в цих середовищах захисних масок різного складу.

За результатами експериментального дослідження якісного складу хімічних сполук, що потрапляють в довкілля внаслідок наявності захисних масок, надалі передбачається визначення їх екологічних характеристик з використанням сучасних методів Quantitative Structure Activity Relationships, що застосовують 2D або 3D дескриптори, та визначити найбільш безпечні для довкілля захисні маски.

1. Selvaranjan K., Navaratnam S., Rajeev, Ravintherakumaran N.. Environmental challenges induced by extensive use of face masks P. during COVID-19: A review and potential solutions // Environmental Challenges. – 2021. - Vol. 3. - 100039.

2. De Albuquerque F. P., Dhadwal M., Dastyar W., Azizi S. M. M., Karidio I., Zaman H., B.R.Dhar. Fate of disposable face masks in high-solids anaerobic digestion: Experimental observations and review of potential environmental implications // Case Studies in Chemical and Environmental Engineering. — 2021. —Vol. 3. — 100082.

КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭКСТРАКЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ИОННЫХ АССОЦИАТОВ ГИДРОФОБНЫХ КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ С КАТИОННЫМ КРАСИТЕЛЕМ ПИРОНИНОМ G

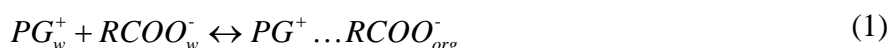
Жилко В.В.^{1,2}, Нехань Н.В.^{1,3}

¹Белорусский государственный университет

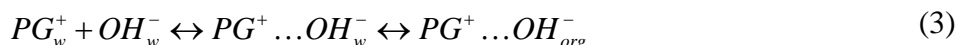
²Международный государственный экологический институт им. А. Д. Сахарова
Белорусского государственного университета

³Белорусский государственный педагогический университет им. М. Танка
n.klimashevich@mail.ru

Процесс экстракции высших карбоновых кислот (RCOOH) возможно описать как обычную, хотя и двухфазную, химическую реакцию. С пиронином G (PG) реакция примет следующий вид:



В рассматриваемой системе протекают также побочные реакции:



где индексы обозначают органическую (org) и водную (w) фазы.

Реакции экстракции практически всегда обратимы, поэтому к данным процессам применим закон действия масс. Появляется возможность говорить о константе равновесия реакции экстракции, которую в данном случае называют константой экстракции. Для описания реакции (1) константа экстракции, может быть рассчитана по формуле:

$$K_{ex} = \frac{[PG^+ \dots RCOO^-]}{[RCOO^-] \cdot [PG^+]} \quad (4)$$

В связи с существующими в системе побочными реакциями (2) прямые расчеты K_{ex} затруднены. Поэтому для описания равновесия использовали условную константу экстракции – K'_{ex} , приняв степень диссоциации карбоновой кислоты равной 100%, т.е. не учитывая ее экстракцию в органическую фазу в молекулярной форме [1-2]:

$$K'_{ex} = \frac{[PG_{org}] - \left(\frac{[PGOH^0] \cdot [PG^+]}{[PG^0] - [PGOH^0]} \right)}{\left([RCOOH^0] - [PG_{org}] + \left(\frac{[PGOH^0] \cdot [PG^+]}{[PG^0] - [PGOH^0]} \right) \right) \cdot [PG^+]} \quad (5)$$

С учетом того, что концентрация пиронина G в водной фазе задается через содержание красителя в органической фазе, для расчета K'_{ex} достаточно определить исходные концентрации всех форм пиронина G в органической фазе и концентрацию пиронина G органической фазе в исследуемой системе. Для этого была получена зависимость значений условных констант экстракции K'_{ex} пиронина G с высшими карбоновыми кислотами для некоторых высших карбоновых кислот (C₁₄ – C₁₈) от значений pH. Полученные по формуле (5) значения условных констант экстракции данных представителей гомологического ряда гидрофобных кислот представлены на рисунке 1 в системе вода – гептан с содержанием 5% об. октанола. Указанная концентрация октанола является оптимальной, так как меньшая не обеспечивает полноту экстракции в органическую фазу, а большая даёт высокие значения холостого опыта.

Как видно из рис. 6, $\lg(K'_{ex})$ для $C_{14} - C_{18}$ кислот условная константа экстракции K'_{ex} не зависит от их природы, а определяется только значениями рН [3]. В исследованном интервале рН можно выделить три четко выраженных участка. Первый участок – рН < 10,4, значения $\lg(K'_{ex})$ прямолинейно растут с ростом рН. Второй – когда линия на графике практически параллельна оси абсцисс и равна для всех кислот, третий – при рН > 12, где идет понижение значений $\lg(K'_{ex})$. Поведение кислот на первом участке объяснено выше (5), на втором и третьем участках оно требует отдельного дополнительного исследования [4].

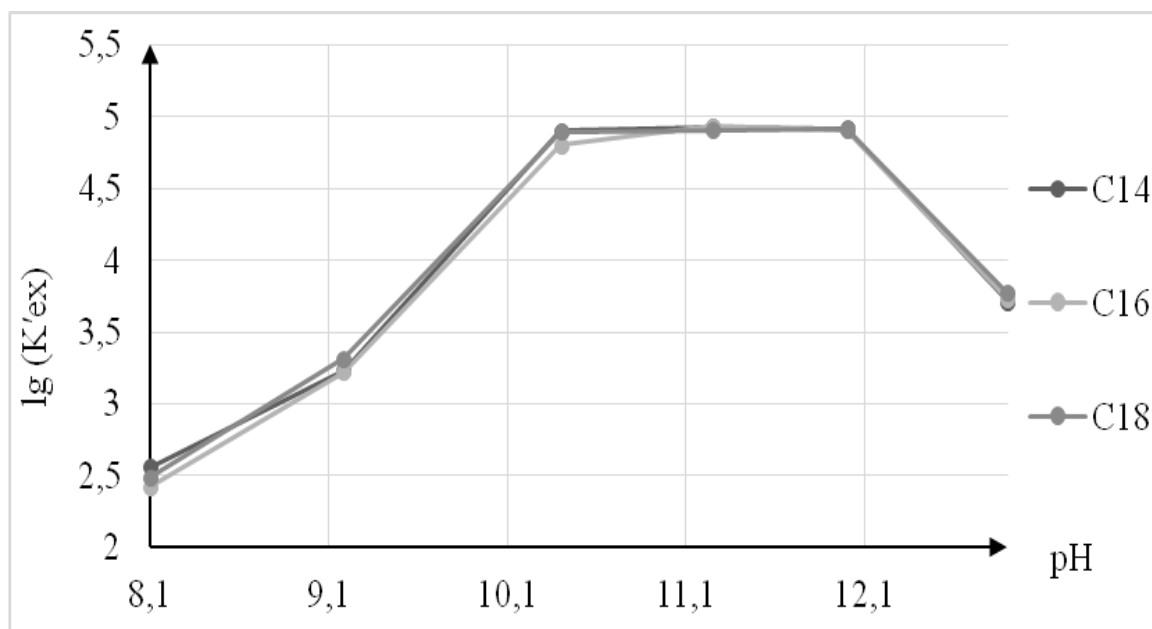


Рис. Зависимость логарифмов условных констант экстракции $\lg(K'_{ex})$ пиронина G с высшими карбоновыми кислотами ($C_{14} - C_{18}$) от значений рН

1. Жилко В. В., Нехань Н. В. Катионные красители и их использование для количественного экстракционно-фотометрического определения высших карбоновых кислот // Известия Национальной академии наук Беларуси. Серия химических наук. – 2021. – Т. 57. – №. 1. – С. 33-40.

2. Жилко В. В., Нехань Н. В. Определение основных спектральных характеристик и условий количественной экстракции катионного красителя пиронина G с высшими карбоновыми кислотами // Бутлеровские сообщения. – 2020. – Т. 64. – №. 12. – С. 83-87.

3. Жилко В.В., Климашевич Н.В. Подбор катионных красителей и условий экстракции для фотометрического определения высших карбоновых кислот / В.В. Жилко, Н.В. Климашевич // Актуальные задачи химии: исследования и перспективы: сборник материалов конференции. – Житомир: Изд-во ЖГУ им. И.Франка, 2018. – С. 23.

4. Жилко В.В., Климашевич Н.В. Экстракция высших карбоновых кислот с катионным красителем Пиронин Ж в сильнощелочной среде / В.В. Жилко, Н.В. Климашевич // Аналитика РБ-2018: сборник статей шестой республиканской конференции по аналитической химии. – Минск: «Колорград», 2018. – С. 70.

СПЕКТРОФОТОМЕТРІЯ 4-[N'-(4-ІМІНО-2-ОКСО-ТІАЗОЛІДИН-5-УЛІДИН)-ГІДРАЗОНО]-БЕНЗЕНСУЛЬФАМІДУ

Олексів Л.В., Тимошук О.С.

Львівський національний університет імені Івана Франка, L_lozynska@ukr.net

Завдяки новим органічним аналітичним реагентам можна значно покращити хіміко-аналітичні характеристики спектрофотометричних методик визначення елементів. В аналітичній хімії широко використовують органічні реагенти, у яких наявні функціональні групи із донорними атомами N, O, S. Серед цих реагентів слід виділити азолідонові та тiazолові похідні, які широко використовують для фотометричного та вольтамперометричного визначення ряду елементів: Pd(II), Pt(IV), Ir(IV), Rh(III), Ru(IV), Co(II), Ni(II), Cu(II), Hg(II), Cd(II) and Zn(II). Цей клас сполук можна використовувати не тільки як реагенти для визначення елементів, але їх також можна розглядати як аналіти, оскільки більшість із них володіє біологічною активністю, тому існує проблема їх визначення в біологічних субстратах.

Метою нашої роботи було дослідити спектральні характеристики нового реагенту – 4-[N'-(4-іміно-2-оксо-тіазолідин-5-улідін)-гідразон]-бензенсульфаміду (ІТУГБ), вперше синтезованого на кафедрі органічної хімії Львівського національного університету імені Івана Франка.

Структуру цього реагенту було підтверджено за допомогою ^1H ЯМР спектроскопії (7,17 с (2H, NH₂); 7,56 д (2H, J 8,5 Гц, C₆H₄); 7,70 д (2H, J 8,5 Гц, C₆H₄); 8,93 с (1H, NH); 9,20 с (1H, NH); 10,55 с (1H, NH)). Для ІТУГБ отримували спектри поглинання в широкому інтервалі рН (рис.). У межах рН 1,0-10,0 цей реагент характеризується максимумом поглинання при $\lambda=382$ нм. В сильнолужному середовищі, а саме при рН 11 та 12 максимум спостерігається при довжині хвилі 464 нм. Для цього реагенту визначено графічно константи дисоціації: $\text{pK}_a^1=2,5$ і $\text{pK}_a^2=10,5$.

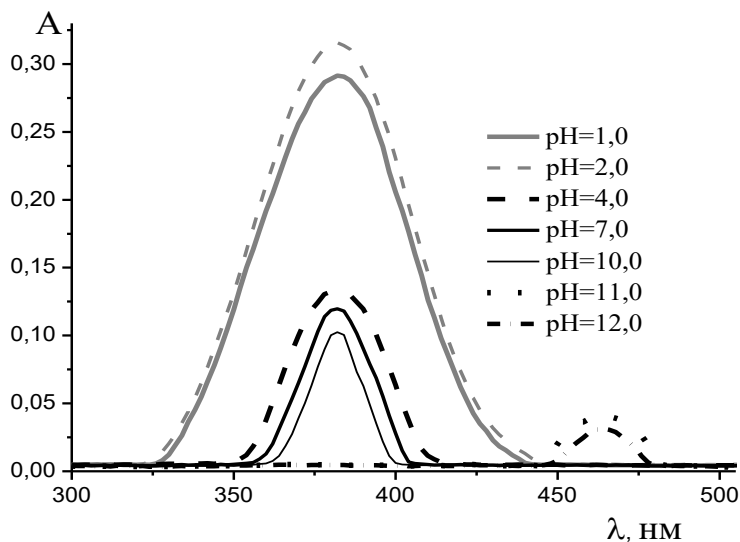


Рис. Спектри поглинання ІТУГБ при різних значеннях рН ($C(\text{ІТУГБ})=1,0 \cdot 10^{-5}$ моль/л; $C(\text{NaCl})=0,10$ моль/л; $C(\text{універс.буф.сум.})=0,02$ моль/л)

При проведенні досліджень щодо можливості використання ІТУГБ в аналітичній хімії для визначення металів було виявлено, що немає помітних змін у спектрах поглинання реагенту при взаємодії із іонами: Co(II), Ni(II), Cd(II), Cu(II), Fe(III), Al(III), Zn(II), Mn(II). У подальшому плануємо дослідити взаємодію ІТУГБ із іонами платинових металів, оскільки раніше нами досліджені реагенти класу азолідонів та тiazолів утворювали комплекси із іонами Pd(II), Pt(IV), Rh(III), Ru(IV) та Ir(IV). На основі цієї взаємодії було розроблено спектрофотометричні та вольтамперометричні методики визначення цих металів.

ІНГРЕДІЄНТИ “ALCARELLE” І “АВІ”

Осініна О.П.

Вінницький національний медичний університет імені М.І. Пирогова, osinina.op@gmail.com

Актуальність: прогнозування і можливий прояв первинних механізмів метаболічної залежності, завдяки підвищенню ефективності природних біохімічних процесів, відновлення активності та субстратного забезпечення ферментів, що регулюють обмін алкоголю в організмі, на нейрорегуляторну активність і фізіологічну стабільність емоційного стану людини.

Мета: узагальнити інформацію про склад, біохімічну дію “Alcarelle” і “АВІ”, а також взаємини між активаторами та інгібіторами ферменту, в детоксикації організму.

Матеріали та методи:

- ретроспективний аналіз сучасної наукової літератури за досліджуваною проблемою;
- обробка статистичних даних по екотоксикологічним і хімічним дослідженням:
 - ✓ екстракція;
 - ✓ мікрокристалоскопічний аналіз;
 - ✓ мікродифузія;
 - ✓ виявлення та кількісне визначення токсичних речовин;

Результати: Етиловий спирт який потрапляє до організму не є ксенобіотиком, адже в нормальних фізіологічних умовах в організмі людини визначається до 0,2% ендogenous етилового спирту. Він є джерелом метаболіту – ацетальдегіду.[1]

Аналіз інформації наукових джерел встановив, що подібні почуття ейфорії, як і при алкогольному сп'янінні, у нас викликає Гамма-аміномасляна кислота (ГАМК). Це речовина, яка діє як нейромедіатор, пригнічуючи певні мозкові сигнали та зменшуючи активність нервової системи. [3]

За результатами проведених досліджень, щодо формування алкогольної залежності, Інституту біохімії НАНУ, Інституту мікробіології і вірусології НАНУ і Українського науково-дослідного інституту соціальної і судової психіатрії Міністерства охорони здоров'я України було встановлено, що вона формується через розрегулювання біохімічної системи ацетальдегід — етанол за участю ферментативного білка алкогольдегідрогенази.

Доведено, що при частому надходженні алкоголю концентрація ферментативного білка системи підвищується, що забезпечує швидке накопичення ацетальдегіду в організмі.[2] В результаті ознайомлення з експериментальними даними, з науковою літературою, були виявленні речовини, які замінюють алкоголь, але не шкодять організму: на прикладі синтетичного інгредієнту “Alcarelle” – штучного замінника спирту і першого ботанічного інгредієнту, відомого як “АВІ”, розробленого у січні 2021 року компанією GABA Labs.[3]

Висновки: Проведений аналіз за ретроспективною літературою встановив, що синтетичний інгредієнт Alcarelle і ботанічний інгредієнт АВІ можуть замінити властивості ендogenous спирту. Крім цього, у складі майбутніх розроблених напоїв може міститися безпечна для організму людини доза амінокислоти триптофану, яка бере участь в хімічній реакції, завдяки якій виробляється серотонін. Він буде забезпечувати гарний психоемоційний стан людини. Виходячи з проаналізованих даних можна сказати, що подальша розробка універсальних засобів для заміни алкоголю, є перспективною.

1. Буров Ю.В., Ведерникова Н.Н. Нейрохимия и фармакология алкоголизма, —М.: Медицина, —1985. —237 с.

2. Нові можливості зменшення алкогольної і наркозалежності населення в Україні.. url: http://medved.kiev.ua/arh_nutr/art_2006/n06_4_8.htm

3. GABA Labs. url: <https://gabalabs.com/news/>

ДИФЕНІЛАМІН ЯК ОРГАНІЧНА РЕЧОВИНА ТА ЙОГО РОЛЬ В КРИМІНАЛЬНОМУ ДОСЛІДЖЕННІ ВИБУХОВИХ РЕЧОВИН ТА ПРОДУКТІВ ПОСТРІЛУ

Панасюк Д.Ю.

Житомирський науково-дослідний експертно-криміналістичний центр МВС України
dima.panasuk261195@gmail.com

Криміналістичне дослідження вибухових речовин та продуктів пострілу пов'язане із визначенням як загальних (морфологічних) ознак наданих на дослідження речовин, так і визначення їх складових компонентів та продуктів їх хімічного перетворення.

У справах, що пов'язані із застосуванням вогнепальної зброї, предметом для судово-хімічної експертизи бувають: порох, відкладення нашарувань кіптяви пострілу навколо вхідного отвору на різних предметах-носіях і нагар із каналу ствола зброї.

Порох являє собою один із видів вибухових речовин, які за своїми властивостями і призначенням поділяються на три основні групи:

1. Метальні вибухові речовини, або пороха.
2. Бризантні вибухові речовини, які мають здатність до руйнування оточуючі предмети;
3. Ініціюючі вибухові речовини, що слугують для запалу заряду пороха [1].

В свою чергу пороха поділяються на дві групи: 1) механічні суміші, до яких відноситься димний порох та 2) нітроцелюлозні (бездимні) пороха.

Димний порох складається із 72-78% калійної селітри, 9-12% сірки та 12-15% вугілля. Роль горючих речовин виконують сірка та вугілля, а селітра – постачальник кисню, який потрібен для горіння.

Нітроцелюлозний (бездимний) порох в якості своєї основи містить нітроцелюлозу (азотокислі ефіри целюлози), стабілізатори та флегматизатори. В криміналістичному дослідженні важливу роль відіграють саме стабілізатори, в якості яких застосовуються централіти та дифеніламін.

Багато літературних джерел дають інформацію про те, що дифеніламін є самим універсальним і ідентифікуючим фактором при дослідженні продуктів пострілу, так як його вміст у різноманітних продовольчих товарах обмежений і його вміст у середовищі мінімальний.

Дифеніламін ((N-феніл)-анілін) — речовина с формулою $(C_6H_5)_2NH$, молекулярна маса якого 169,23. Також його називають N-феніламінобензолом. Стабілізуюча дія дифеніламіну полягає в тому, що він зв'язує утворені при розкладанні пороху оксиди азоту, азотну та азотисту кислоти з утворенням наступних продуктів: нітрозосполуки - $(C_6H_5)_2 N^{\circ} \cdot (NO)$; нітрозонітродифеніламін, мононітродифеніламін, динітродифеніламін і останній продукт – тринітродифеніламін. Стійкість пороху зберігається до тих пір, доки весь дифеніламін не піддається повному хімічному перетворенню.

Найбільшого поширення для ідентифікації дифеніламіну отримали хроматографічні методи дослідження: тонкошарова хроматографія, газова хроматографія і високоефективна рідинна хроматографія. В силу низької вартості, експресності, доступності частіше застосовується тонкошарова хроматографія. На рис. 1 зображено розділення штучної суміші дифеніламіну і його нітрито- та нітропохідних. Розділення виконано на закріпленому шарі силікагелю товщиною 0,25 мм, рухома фаза – бензол; реактив-проявник – розчин фосфорномолібденової кислоти.

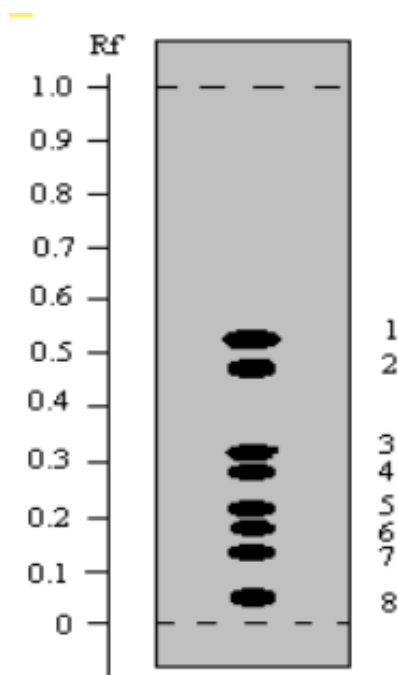


Рис. Хроматограма суміші дифеніламіну та його нітрито- і нітропохідних: 1 – дифеніламін; 2 – 2-нітродифеніламін; 3 – N-нітритозодифеніламін; 4 – 2, 4-дифеніламін, 5 – 2,2',4-тринітродифеніламін; 6 – 4-нітродифеніламін; 7 – 2,4,4'-тринітродифеніламін; 8 – 4,4'-динітродифеніламін

Однак, на сьогоднішній день чільне місце у виявленні дифеніламіну займає газорідна хроматографія з мас-спектроскопічним детектуванням. В порівнянні з іншими детекторами, мас-спектроскопічний більш універсальний, а інформація, яку ми отримуємо – характеризується більшою селективністю. На відміну від інших детекторів, які чутливі лише до окремих класів сполук (так, електронозахоплювальний детектор чутливий лише до галогеновмісних сполук, а полум'яно-іонізаційний – до вуглеводнів), мас-спектрометр дозволяє детектувати будь-які органічні сполуки [2]. Слід зазначити, що окрім якісної інформації (самого факту виявлення дифеніламіну), мас-спектроскопія дає можливість отримати і його кількісний вміст. Це досягається двома шляхами: по-перше – можна визначити суму усіх сигналів іонного струму і отримати залежність іонного струму від часу; а по-друге – можна здійснювати реєстрацію сигналу, який обумовлений лише іонами з заданою масою (тобто детектуванням по заданому іону або SIM-режим).

Отже, для вирішення криміналістичних питань, які пов'язані із дослідженням вибухових речовин та продуктів пострілу, зокрема: а) чи здійснювався постріл із даного виду вогнепальної зброї після останнього чищення?; б) чи містяться сліди продуктів пострілу на змивах з рук? в) чи відноситься надана на дослідження сипуча речовина до вибухових речовин? та ін, то категоричні відповіді на ці та інші запитання можна надати лише в разі виявлення дифеніламіну (стабілізатора нітроцелюлозних порохів), а найкращий спосіб це здійснити полягає у застосуванні хроматографічних методів дослідження, зокрема газорідної хроматографії з мас-спектроскопічним детектуванням.

1. Соколов Н.А. Курс теории взрывчатых веществ. – М.: ОНТИ НКТП, Гос. научно-техн. горное изд-во, – 1933. – 179 с.

2. Казимиров В. И., Зорин А. Д., Занозина В. Ф. Применение хромато-масс-спектрометрии для обнаружения дифениламина в продуктах выстрела. – М.: Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского, –2008. – № 1. – с. 47-52.

СОРБЦІЙНІ ВЛАСТИВОСТІ СИЛІКАГЕЛІВ З АДСОРБОВАНИМИ КОПОЛІМЕРАМИ 4-ВІНІЛПІРИДИНУ ТА СТИРЕНУ ЩОДО ЙОНІВ Fe(III)

Панченко Т.В.¹, Яновська Е.С.², Вретік Л.О.², Стерник Д.³

Кондратенко О.У.¹, Товстенко-Забелін М.²

¹Житомирський державний університет імені Івана Франка, tanja99315@gmail.com

²Київський національний університет імені Тараса Шевченка

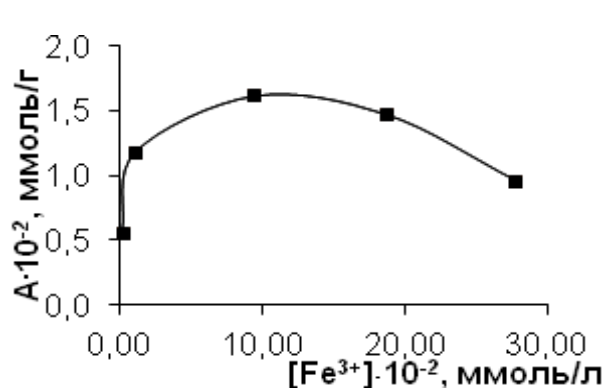
³Університет Марії Кюрі-Склодовської

Наявність у біосфері великих обсягів розсіяних токсичних металів, в результаті корозії та втрат у виробничих процесах, робить актуальним пошук нових технологій їх вилучення із забрудненої води. У якості адсорбентів можна використовувати органо-мінеральні композити, які виявляють достатньо високу ємність при збереженні хороших кінетичних характеристик, властивих неорганічним адсорбентам.

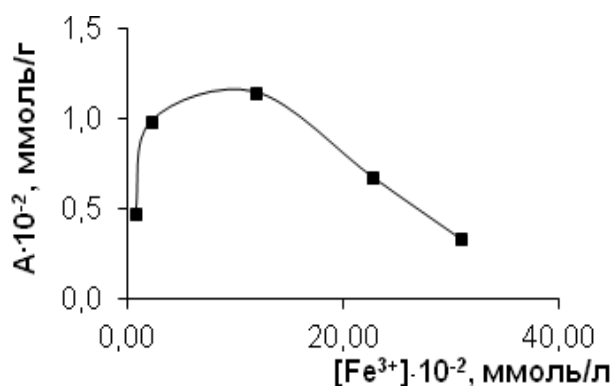
До органо-мінеральних композитів відносять штучно створений неоднорідний суцільний матеріал, що складається з двох або більше компонентів з чіткою межею поділу між ними. Вони існують двох видів - композиційний матеріал, основою якого є органічна частина та нанесений неорганічний носій, та навпаки - неорганічна поверхня та органічний носій, який покриває поверхню.

В роботі атомно-абсорбційним методом аналізу досліджувались сорбційні властивості кополімерів на основі силікагелю, які були синтезовані методом контролюючої радикальної полімеризації (RAFT) стирену (St) з 4-вінілпіридином (4-Vp) на силікагелі (SiO₂) з різними співвідношеннями полімеру до неорганічного носія. (Композит 1 St/4-Vp RAFT 1/4 на 6 г SiO₂ 1 г полімеру, композит 2 St/4-Vp RAFT 1/4 на 6 г SiO₂ 1,5 г полімеру).

Факт іммобілізації кополімеру на поверхні силікагелів підтверджували шляхом порівняння ІЧ-спектру вихідного силікагелю та ІЧ-спектрів синтезованих композитів. Кількість іммобілізованого сополімеру розраховували методом термогравіметрії. В результаті дослідження сорбційних властивостей кополімерів було встановлено, що вищий ступінь сорбції щодо катіонів Fe(III) досягається на поверхні синтезованого композиту 1. Сорбційна рівновага у статичному режимі сорбції настала через добу контакту. Побудовані ізотерми сорбції катіонів Fe(III) для досліджуваних кополімерів.



а) композит 1



б) композит 2

Рис. Ізотерма сорбції йонів Fe(III) на поверхні синтезованого силікагелю модифікованого кополімером стирену та 4-вінілпіридину

Умови досліді: маса сорбенту – 0,1 г, об'єм розчинів – 25 мл, час сорбції – 1 доба.

Безумовно отримані результати можна пояснити проходженням процесів комплексоутворення металойонів з молекулами даних композитів. Оскільки значення сорбційної ємності зростають із збільшенням кількості кополімеру у складі композиту.

ФІЗИЧНІ ТА ФІЗИКО-ХІМІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ У ХІМІЧНОМУ АНАЛІЗІ

Петрова А.О., Кичкирук О.Ю.

Житомирський державний університет імені Івана Франка, mentality9898@gmail.com

Мета даної роботи - показати можливість застосування у хімічному аналізі фізичних та фізико-хімічних методів дослідження. Докладно вивчити кожен метод та з'ясувати актуальність кожного, аби полегшити подальшу роботу у лабораторії.

Дані методи дослідження класифікуються як за окремими властивостями речовин, які визначаються цими методами, так і за результатами взаємодії речовини з різними видами зовнішніх впливів. Цими впливами може бути як нагрівання до високих температур, так і охолодження до наднизьких, бомбардування електронами, взаємодія речовини з магнітним полем чи опромінення електромагнітними хвилями, або ультразвуком, використання високого тиску або вакууму або різні поєднання цих впливів.

Для дослідження речовини та отримання результатів щодо процесів, які відбуваються, підходять усі зовнішні впливи, як хімічні, так і фізичні, головне, щоб речовина на нього реагувала та отримана інформація піддавалася однозначному розумінню.

До важливих фізико-хімічних методів належать спектроскопічні (люмінесцентний аналіз, ІЧ-спектроскопія, нефелометрія і турбодиметрія), електрохімічні методи (діелектрометрія, кулонометрія, потенціометрія), хроматографічні (рідинної, газової, твердофазної, газо-рідинної хроматографії). Досить розповсюдженими є методи, які спираються на дослідження та вимірювання теплових ефектів реакції (калориметрія), швидкості хімічної реакції (кінетичні методи дослідження), метод розділення іонів в магнітному полі (мас-спектрометричний аналіз). Також досить поширені методи, такі як, радіографічний, радіохімічний, рентгенографічний, тощо.

Відомі роботи [1-4], в яких сучасним фізичними та фізико-хімічними методами (ІЧ-спектроскопією, ЕПР-спектроскопією, атомно-абсорбційною спектроскопією) досліджувались адсорбційні властивості сапоніту, *in situ* модифікованого полі[N-(4-карбоксіфеніл)метакриламідом], силікагелю з ковалентно закріпленим 1-(2-піридилазо)-2-нафтолом щодо іонів токсичних металів, (атомно-абсорбційна спектроскопія, спектрофотометричний метод), кремнеземних адсорбентів із прищепленими комплексоутворювачами – 4-(2-піридилазо)резорцином і 1-2-(піридилазо)-2-нафтолом для екстракції йонів Co^{2+} і Cd^{2+} з водних розчинів у статичних умовах, азотовмісних полімерів, *in situ* іммобілізованих на поверхні силікагелю.

1. Яновська, Е. С., Савченко, І. О., Полонська, Я. В., Ольховик, Л. А., Стернік, Д., Кичкирук, О. Ю. Сорбційні властивості щодо іонів токсичних металів сапоніту, *in situ* модифікованого полі[n-(4-карбоксіфеніл)метакриламідом] // Український хімічний журнал – 2018. – 84, № 2 -Р. 67-73.

2. Яновська, Е. С., Кузовенко, В. А., Кичкирук, О. Ю., Тьортих, В. А. Сорбційні властивості силікагелю з ковалентно закріпленим 1-(2-піридилазо)-2-нафтолом щодо йонів токсичних металів // Наукові записки НаУКМА. Хімічні науки і технології. – 2008. - 79. - С. 45-49.

3. Кичкирук, О. Ю., Кусяк, Н. В., Тьортих, В. А. Адсорбційні властивості кремнеземів з іммобілізованими 4-(2-піридилазо)резорцином та 1-(2-піридилазо)-2-нафтолом щодо йонів кобальту і кадмію. // Наукові записки. НаУКМА. Хімічні науки і технології. – 2007, № 66. С. 43-46.

4. Polonska, Y., Yanovska, E. S., Savchenko, I., Ol'khovik, L., Sternik, D., Kychkyruk, O. Azocontaining polymers, *in situ* immobilized of the silica gel surface // Molecular Crystals and Liquid Crystals. – 2018. -673, № 1. - Р. 39-47.

ВИЗНАЧЕННЯ НРК РІЗНИХ ТИПІВ ҐРУНТІВ СВК «СЕЛИЩАНСЬКИЙ»

Проценко О.М.¹, Дорошкевич Н.Ф.², Румянцева Ж.О.¹, Леонова Н.Г.¹

¹Донецький національний університет імені Василя Стуса, protsenko.ol@donnu.edu.ua

²Вінницька філія державної установи «Інститут охорони ґрунтів України»

Вінниччина – аграрний регіон, зона розташування земель області за ґрунтово-кліматичними умовами досить сприятлива для вирощування сільськогосподарських культур, тому земельні ресурси мають ряд особливостей. За географічним розміщенням територія землекористувань області розміщена на Подільській височині Лісостепу правобережного. Більша частина території – 2064,0 тис. га (77,9 % від загальної площі території області) зайнята сільськогосподарськими землями, з яких: сільськогосподарських угідь 2015,2 тис. га (76,0 % від загальної площі), в тому числі ріллі 1725,5 тис. га (65,13 %), перелогів 1,0 тис. га (0,04 %), багаторічних насаджень 51,4 тис. га (1,94 %), сіножатей і пасовищ 263,3 тис. га (8,92 %). Якісний склад сільськогосподарських угідь області неоднорідний, характеризується різними за властивостями і родючістю ґрунтами, їх еродованістю, кислотністю та інші.

Об'єктом дослідження були різні типи ґрунтів Вінницької області сільськогосподарського виробничого кооперативу «Селищанське» с. Селище Тиврівського району, предметом – рівень забезпеченості ґрунтів поживними речовинами рухомих сполук фосфору та калію, лужногідролізованого нітрогену. Розрахунки балансу поживних речовин у ґрунті проводилися з використанням методів Чирікова, Мачигіна, Кірсанова і Корнфілда.

Для порівняння забезпечення ґрунтового покриву елементами живлення було обрано дві ґрунтові відміни у СВК «Селищанський» с. Селище Тиврівського району Вінницької області. Загальна площа обстеження ґрунтів становила 1431,3 га. Переважаючим типом ґрунту в господарстві є сірі лісові ґрунти.

Проаналізовано сірі опідзолені глеюваті ґрунти протягом трьох зимово-весняних періодів (2010–2020 р.). Визначено, що органічна маса для сірих опідзолених ґрунтів за період: 2010 р. становить 1,94 %; 2015 р. – 1,98 %, а 2020 р. – 1,96 % (низька забезпеченість), для темно-сірих опідзолених ґрунтів: 2010 р. – 2,67 %, 2015 р. – 2,71 %, 2020 р. – 2,69 % (середня забезпеченість). За результатами аналітичних досліджень встановлено, що агрохімічні показники за період обстеження значних змін не зазнали.

Встановлено, що вміст фосфору в сіро-лісових ґрунтах, визначений за методом Чирікова, становить 31 мг/кг, що за показниками родючості та ГДК знаходиться в дуже низькій забезпеченості для зернових та зернобобових культур, а вміст калію в ґрунті, визначений за методом Чирікова, становить 88 мг/кг, що за показниками родючості знаходиться в підвищеній забезпеченості. За методом Мачигіна вміст фосфору становить 73 мг/кг, що за показниками забезпеченості знаходиться в дуже низьких для зернових культур і бавовника, але для овочевих культур в дуже високій забезпеченості.

Встановлено, що за методом Кірсанова показник фосфору в лісових ґрунтах, становить 39 мг/кг. Це свідчить, що вміст фосфору знаходиться в дуже низькій забезпеченості для зернових культур і зернобобові. За результатами хімічного аналізу для карбонатних ґрунтів за методом Корнфілда, становить 182 мг/кг знаходиться в середній забезпеченості, тому потреба в нітратних добривах низька.

За вмістом нітрогену, що легко гідролізується, ґрунти обох типів мають дуже низькі показники: від 50 до 78 мг/кг ґрунту. Вміст рухомого фосфору та калію у ґрунтах посередній: P₂O₅ від 45 (забезпеченість низька) до 86 мг/кг ґрунту (забезпеченість середня), K₂O від 66 (забезпеченість середня) до 94 сірі опідзолені глеюваті ґрунти (забезпеченість підвищена).

Таким чином, встановлено, що НРК різних типах ґрунтів, ґрунтовий покрив посередньо забезпечений елементами живлення. За різними методами обстеження є незначне коливання показників родючості, але у загальному це не перевищувало показників за градацією забезпечення.

МЕТОДИ ВИЗНАЧЕННЯ ПЕНТАХЛОРФЕНОЛУ
Савчук Т.І., Кормош Ж.О., Корольчук С.І., Юрченко О.М.
Волинський національний університет імені Лесі Українки,
Savchuk.Tanja.@eenu.edu.ua

Пентахлорфенол (ПХФ) – високотоксичний, відноситься до сильних канцерогенів групи В2, який здатен викликати неадекватні зміни у людському організмі. При отруєнні ним відчуваються сильні головні болі, спрага, втомлюваність, пітливість, підвищується температура тіла. Гранично допустима концентрація (ГДК) ПХФ у воді становить 0,010 мг/дм³, а орієнтовно безпечний рівень у модельних середовищах складає 0,021 мг/дм³. Встановлено, що мінімальна добова доза ПХФ при оральному вживанні складає 0,005 мг/кг/доба, а при хронічному вживанні його становить 0,001 мг/кг/доба [1].

Пентахлорфенол широко використовується в промисловості, сільському господарстві для обробки деревини і захисту її від плісняви, гризунів і комах. Відносно висока летючість і нерозчинність у воді пентахлорфенолу дозволяє йому концентруватися в різних промислових і біологічних об'єктах.

Для його визначення запропоновані різні методи: рідинно-рідинна мікроекстракція з використанням рідинної хроматографії. Для екстракції використовують натрій хлорид та ацетон, як сольвент використовують тетрахлоретилен. Екстракцію проводять при рН = 3, а далі використовують рідинну хроматографію з метою визначення пентахлорфенолу у воді. Такий комбінований метод характеризується хорошою лінійністю 0,1 – 1000 мг/л та межею виявлення, яка становить 0,03 мг/л [2]. Недоліком такого методу є використання дороговартісної апаратури. Описана методика спектрофотометричного визначення при сумісній присутності пентахлорфенолу та 2,4,5-трихлорфенолу в твердій фазі дереватизації. Лінійність градувальних кривих становить $2 \cdot 10^{-7}$ моль/л і $10 \cdot 10^{-7}$ моль/л. Межа визначення для пентахлорфенолу лежить у межах концентрацій $1,3 \cdot 10^{-7}$ моль/л і $4,3 \cdot 10^{-7}$ моль/л, а для 2,4,5-трихлорфенолу – $1,5 \cdot 10^{-8}$ моль/л і $4,9 \cdot 10^{-8}$ моль/л. Стандартне відхилення методу складає 4,4 % [3]. Недоліком запропонованого методу є те, що використовували в матриці тільки чотири аналіти, оскільки 2-хлорфенол та 4-хлорфенол не змінюють аналітичного сигналу, а інші органічні сполуки можуть заважати.

Авторами роботи [4] описано метод газової хроматографії, де пробопідготовку проводили, використовуючи екстракцію вуглекислим газом. Недоліком такого методу є довготривала пробопідготовка (більше двох діб). Пентахлорфенол можна визначати в зразках ґрунту [5], у відходах деревини, використовуючи метод газової хроматографії [6]. Як і у вище наведених методах потрібно проводити екстракцію, реекстракцію з калій карбонатом, лінійність методу коливається в межах концентрацій від 10 нг/л, до 200 нг/л.

Для визначення пентахлорфенолу часто використовують метод екстракції. Автори [7] описують методику визначення ПХФ у водно-етанольному розчині. Розроблена методика визначення пентахлорфенолу у воді методом мікроекстракції, де стандартне відхилення методу коливається в межах 3, 5 – 4,8 % [8]. Часто для визначення ПХФ використовують метод рідинно-рідинної мікроекстракції [10]. Відома методика дисперсійного варіанту мікроекстракції для визначення ароматичних і хлорорганічних сполук у воді. В якості екстрагенту використовували чотирихлористий карбон, а в якості диспергуючого агенту етиловий спирт. Межа виявлення хромато-мас-спектрометрії становить 0,05 – 3 мг/л з використанням мікроекстракційного концентрування. Стандартне відхилення методу становить 0,10 – 0,15 [9]. Відомий експрес метод визначення пентахлорфенолу у воді з використанням екстракції та хромато-масспектроскопії [11].

Авторами [12] розроблена потенціометрична методика визначення ПХФ, де в якості індикаторного електроду використовують мембранний іон-селективний сенсор. Основні електродні характеристики потенціометричного сенсору такі: лінійність становить $6 \cdot 10^{-5}$ – $1 \cdot 10^{-2}$ моль/л, межа виявлення складає $4 \cdot 10^{-5}$ моль/л, крутизна електродної функції становить 55 мВ/рС. Робоча область рН електроду – 5,5 – 10,5.

Вище наведені методи мають безумовні переваги, однак, більшість із них вимагають попередньої дериватизації пентахлорфенолу, довготривалої пробопідготовки, дорогої апаратури. Усе більшого попиту набувають прості та експресні методи визначення ПХФ. Одним із таких є потенціометрія з використанням іонселективних сенсорів, а для визначення пентахлорфенолят- іону вони практично не використовуються.

1. Федоров Л. А. Диоксины как экологическая опасность ретроспектива и перспективы / Федоров Л. А. – М.: Наука, 1993. – 209 с.
2. Dispersive liquid-liquid microextraction and liquid chromatography determination of pentachlorophenol in water / Khali Farhadi, Mir. A. Farajzadeh, Amir A. Matin [et al.] // *Cent. Eur. J. Chem.* – 2009. – Vol. 7, № 3. – P. 369 – 374.
3. Cubillos C. Simultaneous determination of pentachlorophenol and 2,4,5-trichlorophenol on solid phase by derivative spectrophotometry [Електронний ресурс] / C. Cubillos, Y. Pinto, M. I. Toral // *Sciencia Abierta* – 2007. – Vol. 31. – Режим доступа до журн. : http://cabierta.uchile.cl/revista/31/mantenedor/sub/articulos_7.pdf
4. Кожа. Определение содержания пентахлорфенола: федеральный закон от 27 декабря 2002г. № 184-ФЗ: ГОСТ Р 1.0-2004. – 4 с. – (Нормативный документ Федерального агентства по техническому регулированию и метрологии. ГОСТ ИСО. Проект).
5. Polese L. Methods for determination of hexachlorobenzene and pentachlorophenol in soil samples / L. Polese, M. L. Ribeiro // *Talanta*. – 1998. – Vol. 46, № 5. – P. 915 – 920.
6. Becker R. Determination of pentachlorophenol (PCP) in waste wood-method comparison by a collaborative trial / R. Becker, H. G. Buge, T. Win // *Chemosphere*. – 2002. – Vol. 47, № 9. – P. 1001 – 1006.
7. Solvent extraction of pentachlorophenol from contaminated soils using water-ethanol mixtures / A. P. Khodadoust, M. T. Suidan, C. M. Acheson [et al.] // *Chemosphere*. – 1999. – Vol. 38, № 11. – P. 2681 – 2693.
8. Vial position in the of chlorophenols in water by solid phase microextraction / M. Portillo, N. Prohibas, V. Salvad [et al.] // *J. of Chromatography A*. – 2006. – Vol. 1103, № 1. – P. 29 – 34.
9. Определение ароматических и хлорорганических соединений в воде с применением дисперсионного микроэкстракционного концентрирования / В. А. Крылов, А. В. Крылов, Г. М. Сергеев [и др.] // *Науч. вестн. Нижегородского ун-та им. Н. И. Лобачевского. сер. "Химия"*. – 2010. – Т. 3, № 1. – С. 100 – 1006.
10. Determination of organic compounds in water using dispersive liquid- liquid microextraction / M. Rezaee, Y. Assadi, M. –R. Milani Hosseini, E. Aghaee [et al.] // *J. of Chromatography A*. – 2006. – Vol. 1116, № 1-2. – P. 1 – 9.
11. Fernander Muino M. A. Simultaneous determination of pentachlorophenol and carbaryl in water / M. A. Fernander Muino, J. Simal Candara, J. Simal Lozano // *Analytical & Bioanalytical Chemistry* – 1991. – Vol. 32, № 5 – 6. – P. 238 – 240.
12. Abbas M. N. PVC membrane ion selective electrode for the determination of pentachlorophenol in water, wood and soil using tetrazolium pentachlorophenolate / M. N. Abbas, G. A. E. Mostafa, A. M. A. Homoda // *Talanta*. – 2001. – Vol. 55. – P. 647 – 656.

ЛЮМІНЕСЦЕНТНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ФАВІПІРАВІРУ З ВИКОРИСТАННЯМ КОМПЛЕКСНОЇ СПОЛУКИ ЄВРОПІУ (III)

Скрипинець Ю.В.¹, Леоненко І.І.¹, Войтюк О.Д.², Єгорова А.В.¹

¹ Фізико-хімічний інститут ім. О. В. Богатського НАН України, yegorova@interchem.com.ua

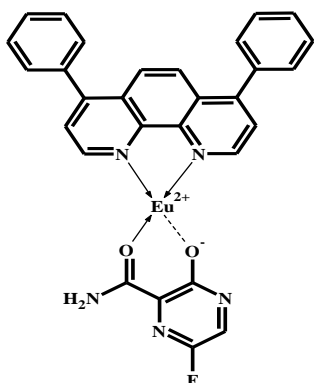
² Товариство з додатковою відповідальністю ТДВ «ІНТЕРХІМ»

Особливий інтерес в останні роки викликає можливість аналітичного застосування не тільки ефектів сенсibilізації люмінесценції іонів лантанідів, а й її гасіння або збільшення для непрямого визначення ряду лікарських препаратів, що не сенсibilізують люмінесценцію лантанідів. Фавіпіравір (ФАВ) – 6-фторо-3-гідроксипіразин-2-карбоксамід – пероральний противірусний засіб, схвалений для лікування грипу в Японії. Цей препарат є аналогом пуринових нуклеозидів, який діє як конкурентний інгібітор РНК-полімерази, необхідної для реплікації вірусу. Він має активність проти грипу А та В, вірусу Ебола та SARS-CoV-2 *in vitro*.

В якості сенсibilізатора 4f-люмінесценції європію обраний батофенантролін, комплекс Eu(III)–БФ використаний в подальшій роботі в якості люмінесцентного зонду для визначення фавіпіравіру. Можливість внутрішньомолекулярної передачі поглиненої батофенантроліном енергії на рівень іонів європію, що призводить до сенсibilізації люмінесценції, обумовлено поглинанням в УФ-області спектра та величиною триплетного рівня 18100 см⁻¹.

Взаємодія фавіпіравіру з люмінесцентним зондом Eu(III)–БФ спостерігається в широкому інтервалі кислотності (рН 4,0-9,5), максимальне збільшення інтенсивності люмінесценції спостерігається при рН 7,5, яке досягається додаванням 1,0 мл 40 % розчину уротропіну.

Встановлено, що оптимальними є концентрації компонентів: C_{Eu} = 1·10⁻⁴ моль/л, C_{БФ} = 2·10⁻⁴ моль/л. Методом обмеженого логарифмування встановлено, що утворюється змішаний комплекс Eu(III)–БФ–ФАВ (1 : 1 : 1):



Відомо, що до збільшення інтенсивності люмінесценції може наводити безліч процесів, в тому числі реакції в збудженому стані, перенесення енергії, утворення комплексів. Встановлено синергетичний ефект, який проявляється в комбінованій дії двох комплексів (Eu(III)–БФ і Eu(III)–ФАВ) і перевищує суму інтенсивності люмінесценції (I_{люм}) кожного з них окремо. Виявлений синергізм обумовлений утворенням різнолігандного комплексу.

З метою оптимізації умов комплексоутворення та виявлення придатності комплексу Eu(III)–БФ–ФАВ для визначення фавіпіравіру було вивчено його люмінесцентні властивості.

Спектр збудження комплексу Eu(III)–БФ–ФАВ, представлений на рис. 1, має два максимуми за довжинами хвиль 263 нм та 315 нм. Для аналітичних цілей було вибрано смугу збудження 315 нм.

Час життя (τ) збудженого стану комплексів Eu(III)–ФАВ (τ = 146 мкс), Eu(III)–БФ (τ = 356 мкс) та Eu(III)–БФ–ФАВ (τ = 635 мкс) розраховано з кривих затухання сенсibilізованої люмінесценції.

При додаванні фавіпіравіру до зонду Eu(III)–БФ час життя його збудженого стану змінюється у 2 рази. Виявлено, що введення різних кількостей фавіпіравіру в водні розчини комплексу Eu(III)–БФ викликає збільшення 4f-люмінесценції європію (III) ($\square_{\text{макс}}$ = 615 нм; перехід ⁵D₀ → ⁷F₂) (рис. 1).

В оптимальних умовах I_{люм} іонів Eu(III) в комплексах досягає максимуму через 5 хвилин після змішування розчинів і залишається постійною протягом години.

Люмінесцентні властивості комплексу Eu(III)–БФ з фавіпіравіром були використані для кількісного визначення ФАВ в таблетованій формі (200 мг) препарату "Favmas" (MACLEODS PHARMACEUTICALS LTD, Індія).

Побудова градувального графіку

У мірні колби місткістю 10,0 мл вносили 0,05; 0,1; 0,4; 0,5; 0,7; 0,9; 1,0 мл робочого розчину ФАВ (100 мкг/мл). У кожену пробірку додавали по 1,0 мл $1 \cdot 10^{-3}$ моль/л стандартного розчину хлориду Eu(III); 0,2 мл $1 \cdot 10^{-3}$ розчину БФ, 1,0 мл 40% уротропінового буферного розчину. Об'єм розчину в кожній колбі доводили дистильованою водою до позначки, перемішували і вимірювали $I_{\text{люм}}$ за довжини хвилі $\lambda_{\text{еміс}} = 615$ нм.

За отриманими результатами будували градувальний графік залежності $I_{\text{люм}}$ від концентрації фавіпіравіру: $I_{\text{люм}} = 89,45 + 61,89 \times C_{\text{ФАВ}}$ (коефіцієнт кореляції $R = 0,99765$), де $C_{\text{ФАВ}}$ – концентрація фавіпіравіру (мкг/мл) (рис. 2). Лінійність спостерігається в інтервалі концентрацій фавіпіравіру 0,5 – 10,0 мкг/мл з межею кількісного визначення 0,35 мкг/мл (3 σ -критерій).

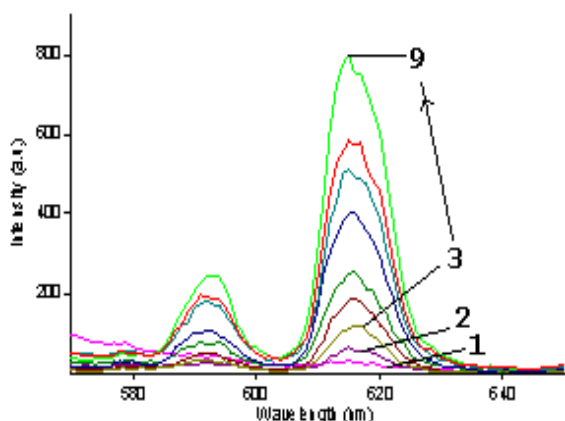


Рис. 1 Спектри люмінесценції комплексів Eu(III)–ФАВ (1), Eu(III)–БФ (2), Eu(III)–БФ–ФАВ (3-9), концентрації ФАВ 0,5–10,0 мкг/мл ($C_{\text{Eu}} = 1 \cdot 10^{-4}$ моль/л, $C_{\text{БФ}} = 2 \cdot 10^{-4}$ моль/л, $\lambda_{\text{збуд}} = 315$ нм, $\lambda_{\text{еміс}} = 615$ нм)

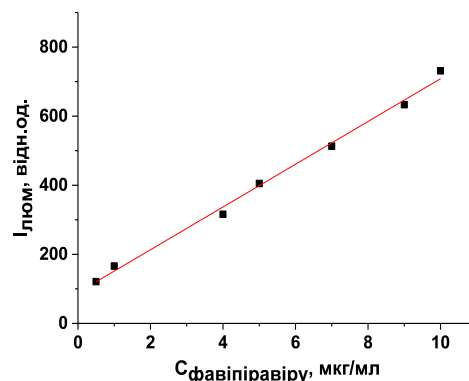


Рис. 2 Градувальний графік для визначення фавіпіравіру ($C_{\text{Eu}} = 1 \cdot 10^{-4}$ моль/л, $C_{\text{БФ}} = 2 \cdot 10^{-4}$ моль/л, $\lambda_{\text{еміс}} = 615$ нм, $\lambda_{\text{збуд}} = 315$ нм)

Вміст фавіпіравіру (X) в одній таблетці, у міліграмах, обчислюють за формулою:

$$X = \frac{I_1 \cdot m_0 \cdot b \cdot 200 \cdot 5 \cdot 0,5 \cdot 50 \cdot 10}{I_0 \cdot m_1 \cdot 5 \cdot 0,5 \cdot 200 \cdot 50 \cdot 10} = \frac{I_1 \cdot m_0 \cdot b}{I_0 \cdot m_1}$$

де: I_1 – інтенсивність люмінесценції випробовуваного розчину, відн.од.; I_0 – інтенсивність люмінесценції розчину РСЗ фавіпіравіру, відн.од.; m_0 – маса наважки РСЗ фавіпіравіру, мг; m_1 – наважка порошку розтертих таблеток, мг; b – середня маса таблетки, мг.

Результати кількісного визначення вмісту фавіпіравіру в таблетках наведені в таблиці.

Таблиця
Результати визначення вмісту фавіпіравіру в таблетках ($n = 5$; $P = 0,95$)

Знайдено, мг	Метрологічні параметри
197,56	$X_{\text{ср}} = 199,98$
201,47	$S = 2,38$
203,23	$\Delta X = 2,95$
198,03	$s_r = 1,19 \%$
199,61	

Показана можливість використання комплексної сполуки європію (III) з батофенантроліном в якості нового люмінесцентного зонду для визначення фавіпіравіру. Запропонована методика характеризується задовільними метрологічними характеристиками та простотою виконання.

Встановлено оптимальні умови взаємодії люмінесцентного зонду Eu(III)-БФ з фавіпіравіром (ФАВ), досліджено спектрально-люмінесцентні властивості різнолігандного комплексу Eu(III)–БФ–ФАВ. Розроблена аналітична форма запропонована для люмінесцентного визначення фавіпіравіру в таблетках. Розроблена методика валідована за наступними показниками: специфічність, лінійність, точність, межа кількісного визначення.

АДСОРБЦІЯ ФЕНОЛУ НАНОПОРИСТИМ ВУГЛЕЦЕМ З БУРОГО ВУГІЛЛЯ

Тамаркіна Ю.В., Фролова І.Б., Величко О.О., Кучеренко В.О.

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

Tamarkina@nas.gov.ua

Термоліз бурого вугілля (БВ) з гідроксидом калію утворює нанопористий вуглець (НВ) з величиною питомої поверхні $S=1000-1200 \text{ м}^2/\text{г}$ і досить високою адсорбційною ємністю за йодом (963 мг/г) і барвником метиленовим блакитним (197 мг/г) [1].

Мета роботи – оцінка адсорбційної здатності нанопористого вуглецю стосовно фенолу в водних розчинах та впливу на неї температури (t) утворення НВ.

Серію НВ отримано нагріванням БВ з КОН (1 г/г) до заданої температури, яка варіювалася в інтервалі $t=400-850^\circ\text{C}$. НВ умовно позначено як НВ(t), наприклад, НВ(650) – зразок, отриманий при 650°C . Характеристики вугілля, умови лужного імпрегнування та синтезу НВ наведено в роботі [2]. За ізотермами низькотемпературної (77 К) адсорбції – десорбції азоту (Micromeritics ASAP 2020, метод розрахунку 2D NLDFT) визначено характеристики пористості НВ: сумарний об'єм пор V_t ($\text{см}^3/\text{г}$), питому поверхню пор S ($\text{м}^2/\text{г}$), об'єм (V_{mi}) і поверхню (S_{mi}) мікропор, об'єм (V_{1nm}) і поверхню (S_{1nm}) субнанопор – пор з шириною ≤ 1 нм. Адсорбційну ємність за фенолом (A_{Φ} , мг/г) та її максимальні значення $A_{\Phi(m)}$ оцінено при 25°C (Perkin-Elmer Lambda 20, 270 нм) за методикою [3]. Питому адсорбційну ємність $A_{\Phi(S)}$ ($\text{мг}/\text{м}^2$) визначено як $A_{\Phi(S)}=A_{\Phi}/S$. Розрахунки ступеня покриття (СП) поверхні НВ фенолом виконували прийнявши розміри молекули $0,57 \text{ нм} \times 0,43 \text{ нм}$ [3].

З ростом температури до 850°C вихід НВ знижується, а об'єм пор та питома поверхня зростають (таблиця). Збільшення S відбувається за рахунок поверхні мікропор, частка якої у зразків НВ(650)–НВ(850) становить $(S_{mi}/S)=93-98\%$ (частка поверхні субнанопор $(S_{1nm}/S)=92-93\%$). Частка поверхні мезо- і макропор знижується з 84% до 2%, тобто з підвищенням температури структура НВ прагне до виключно мікропористої.

Кінетика адсорбції описується моделлю другого порядку (суцільні лінії на рис. 1А) з константами $k_2=0,0023 \text{ г}/\text{мг} \cdot \text{хв}$ для НВ(650) та $k_2=0,0022 \text{ г}/\text{мг} \cdot \text{хв}$ для НВ(800). Ізотерма адсорбції (рис. 1В) є накладенням двох ізотерм (зі зломом при рівноважній концентрації $C_e=0,5-0,6 \text{ мг}/\text{см}^3$), яку відносять до типу L4 і пояснюють посиленням поглинання за рахунок багаточислової адсорбції та просторовою переорієнтацією молекул. Для таких випадків використовують модель Фрейндліха: $\log A_{\Phi}=\log K_F+(1/n_F) \cdot \log C_e$, де K_F – константа, n_F – фактор неоднорідності. Ця модель задовільно ($R^2=0,988$) описує ізотерму в інтервалі $C_e=0,001-2,5 \text{ мг}/\text{см}^3$ (рис. 1В) з $n_F=3,23$ (фізична адсорбція), а при $C_e \leq 0,001 \text{ мг}/\text{см}^3$ – з $n_F=0,52$ ($R^2=0,951$), що вказує на хемосорбцію. Параметр $A_{\Phi(m)}$ експоненціально збільшується з температурою: $A_{\Phi(m)}=6,038 \exp(0,0045t)$ ($R^2=0,952$) (рис. 2А). При 850°C утворюється менш активний матеріал з $A_{\Phi(m)}=228 \text{ мг}/\text{г}$, що є наслідком вигорання карбону стінок мікропор. Залежність « $A_{\Phi(m)}-S$ » лінійна (рис. 2В): $A_{\Phi(m)}=0,184S+18,616$ ($R^2=0,986$). Залежності $A_{\Phi(m)}$ від S_{mi} і S_{1nm} також лінійні: $A_{\Phi(m)}=0,186S_{mi}+22,957$ ($R^2=0,991$) та $A_{\Phi(m)}=0,190S_{1nm}+27,374$ ($R^2=0,975$). Близькість коефіцієнтів всіх трьох рівнянь свідчить, що адсорбційна активність 1 м^2 поверхні не залежить від того, до яких пор вона належить. Питома адсорбційна ємність $A_{\Phi(S)}$ різко зменшується з $2,11 \text{ мг}/\text{м}^2$ до $0,21 \text{ мг}/\text{м}^2$ при $400-550^\circ\text{C}$ та не залежить від S при $550-850^\circ\text{C}$ (табл. 1). Ступінь покриття поверхні становить $\text{СП}=3,29$ для НВ(400), тобто формально формується більше трьох адсорбційних шарів. Для НВ(450) цей показник істотно нижчий ($\text{СП}=0,94$), для інших НВ він практично однаковий ($\text{СП}=0,31-0,33$).

Таблиця

Вихід і питома поверхня нанопористого вуглецю з бурого вугілля

Параметр	Температура синтезу НВ, °C									
	400	450	500	550	600	650	700	750	800	850
Вихід, %	71	57	54	52	50	47	41	35	29	24
$S, \text{ м}^2/\text{г}$	12,8	73,3	273	370	450	555	695	773	1128	1115
$V_t, \text{ см}^3/\text{г}$	0,095	0,109	0,281	0,262	0,384	0,392	0,496	0,476	0,487	0,578

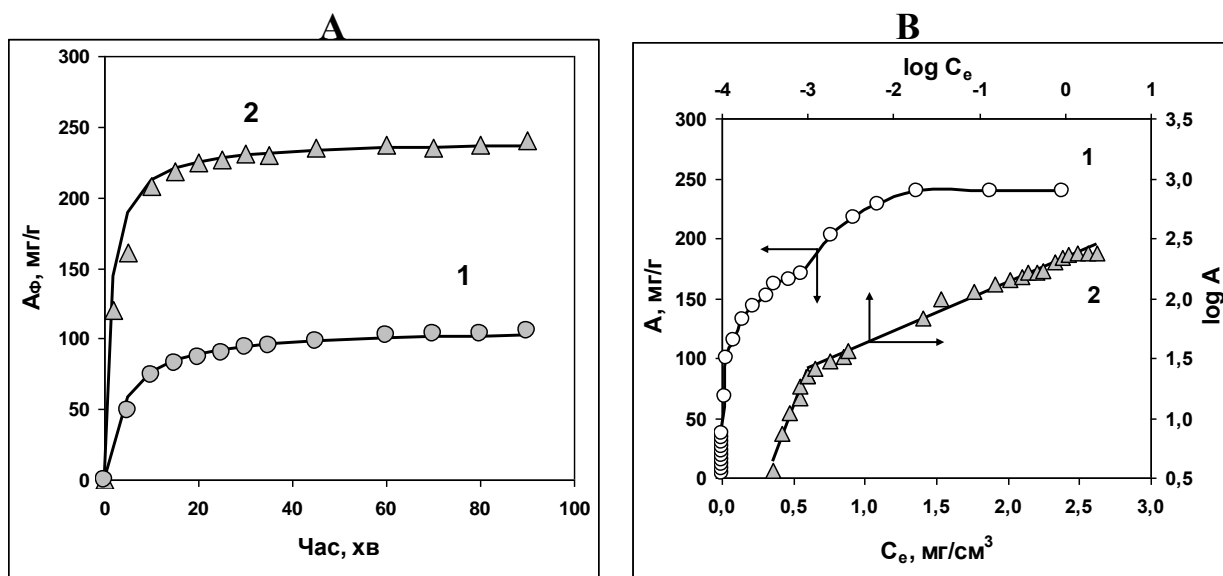


Рис. 1 Кінетика (А) та ізотерма адсорбції (В) фенолу; А: 1 – НВ(650), 2 – НВ(800); В: 1 – ізотерма для зразка НВ(800), 2 – її лінеаризація згідно з моделлю Фрейдліха

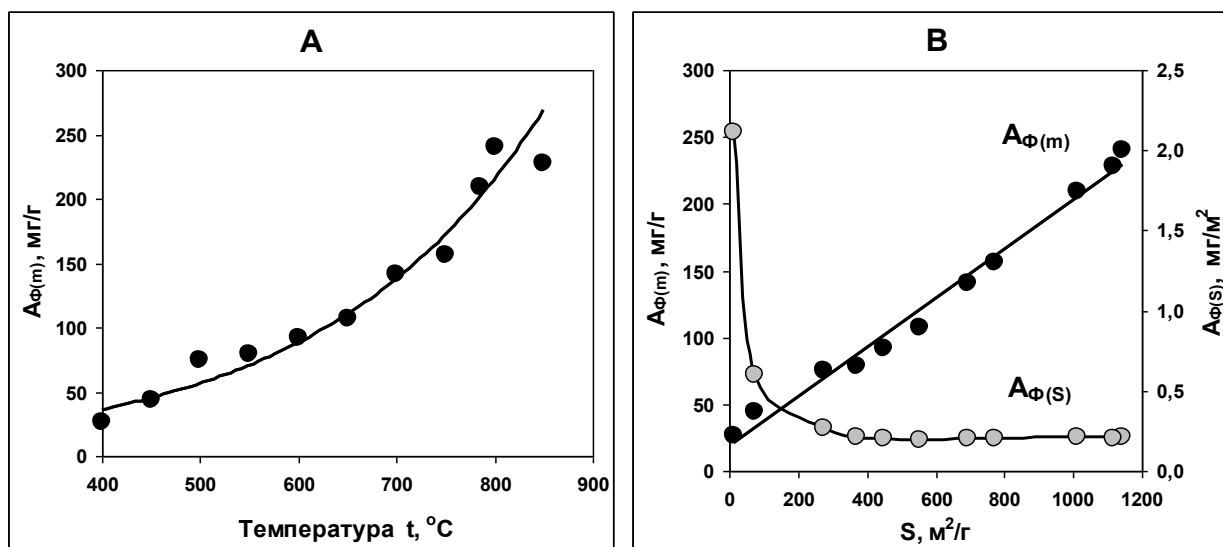


Рис. 2 Залежність $A_{\phi(m)}$ від температури (А) та $A_{\phi(m)}$ і $A_{\phi(s)}$ від питомої поверхні (В)

Зразок НВ(400) містить велику кількість реакційних центрів і внесок хімічного реагування в поглинання фенолу є домінуючим, що зовні виглядає як багатшарова адсорбція (СП = 3,29). З ростом t внесок хімічного реагування знижується і це проявляється в різкому зниженні $A_{\phi(s)}$ і СП. Хемосорбція переважає на початковій стадії процесу, коли активні центри ще не зайняті фенолом, а після їх дезактивації внаслідок захоплення молекули фенолу процес перебігає як фізична адсорбція.

1. Тамаркіна Ю.В., Аніщенко В.М., Редько А.М., Кучеренко В.О. Адсорбційні властивості викопного вугілля, активованого гідроксидом калію. Вплив ступеня метаморфізму // Хімія, фізика і технологія поверхні. – 2020. –11, № 2. – С. 175-189.

2. Тамаркіна Ю.В., Сабєрова В.А., Мысык Р.Д., Кучеренко В.А. Влияние степени метаморфизма на пористую структуру углей, активированных гидроксидом калия // Углекимический журнал. – 2020. – № 2 – С. 4-11.

3. Lorenc-Grabowska E., Rutkowski P. High basicity adsorbents from solid residue of cellulose and synthetic polymer co-pyrolysis for phenol removal: kinetics and mechanism // Appl. Surf. Sci. – 2014. – Vol.316.– P. 435-442.

АНАЛІЗ ІСНУЮЧИХ ВИДІВ СОРБЕНТІВ ДЛЯ ПРОЦЕСІВ СОРБЦІЇ НАФТОПРОДУКТІВ З ПОВЕРХНІ ВОДИ

Тарасенко Н.В.

Національний технічний університет КПІ ім. І. Сікорського, tarasenko.nv@ukr.net

Постійне використання нафтопродуктів призводить до погіршення якості навколишнього середовища. За даними міжнародних екологічних організацій, загальна кількість нафти та нафтопродуктів, які щорічно потрапляють у води Світового океану, вже зараз досягає 10 млн. т. [1]. Для збереження екологічної рівноваги об'єктів гідро- та біосфери використовують різні технології ліквідації нафтових забруднень, серед яких сорбційні методи займають важливе місце.

Мета даної роботи – провести аналіз існуючих видів сорбентів для процесів сорбції в умовах змінних фізико-хімічних властивостей нафтовмісних вод.

Методологія дослідження. Теоретичною та методологічною основою дослідження є використання загальнонаукових і спеціальних методів. У процесі дослідження використовувалися порівняльний аналіз видів сорбентів – для оцінювання їх ефективності щодо ліквідації нафти та техногенного навантаження навколишнього середовища.

Результати та обговорення. На сьогоднішній день посилюються вимоги до прийому стічних вод промислових підприємств, в складі яких виявляють значну кількість екологічно небезпечних речовин. Для очищення і збору розливів в процесі роботи обладнання нафтопереробних підприємств масла та інших нафтопродуктів використовують різноманітні сорбенти природного і синтетичного походження. У кожного з них є свої переваги і недоліки. Деякі з них мають великий коефіцієнт сорбції, але не дозволяють використовувати їх повторно, деякі відрізняються дешевизною, але мають низьку ефективність застосування.

Представлений нижче аналіз відомих сорбентів для ліквідації нафтопродуктів з поверхні води дозволить поставити завдання розробки і дослідження нових сорбційних матеріалів поліпшеної якості за основними критеріями їх застосування.

Основні типи нафтових сорбентів умовно можна розділити на чотири великі групи з застосуванням різноманітної сировини та деякими властивостями матеріалів, які використовуються для усунення нафтопродуктів з поверхні води.

До першої групи відносяться сорбенти, для виробництва яких в якості вихідних матеріалів може використовуватися рослинна і природна сировина: торф, тирса, кора дерев, кокосове волокно, солома, пір'я, шерсть [2]. А також природні неорганічні матеріали: глинисті породи, цеоліти, туфи, вугілля, пемза [3,4]. Дана група сорбентів характеризується надзвичайно низькою ємністю, низькою щільністю.

До другої групи сорбентів відносяться біосорбенти, в якості сорбентів можуть застосовуватися як природні речовини так і створені штучно [5]. Головним недоліком другої групи сорбентів є жорсткий температурний режим, в якому вони можуть бути використані, а також для кожного випадку потрібен особливий штамп бактерій. Тому ефективне застосування біосорбентів можливе виключно в умовах дотримання потрібного температурного режиму і попереднього аналізу, що в більшості випадків неможливо здійснити. Крім цього, підготовчі заходи перед застосуванням бактерій трудомісткі та при цьому немає гарантії можливості їх застосування, так як за результатами аналізу може виявитися, що використання біосорбенту не тільки не ефективно, але і небезпечно з екологічної точки зору.

До третьої групи відносяться наносорбенти, вироблені на основі графіту. Створення універсальних сорбентів з наноструктурою досить складний і трудомісткий процес, який не передбачає створення унікальної структури з широким спектром нанопор, набір і розмір яких повинен відповідати кількості відомих хімічних елементів і сполук. Недоліками даної групи сорбентів є висока ціна і наявність в структурі матеріалу залишків кислот, які використовуються при виробництві сорбенту, що веде до недоцільності його застосування в

якості засобу для екологічної безпеки, також неможливість проведення регенеративних робіт з метою повторного застосування [6].

До четвертої групи відносяться синтетичні сорбенти, що представляють собою техногенну органіку (поліетилен, поліпропілен, поліуретан в губчастому або гранульованому вигляді, полістирольні волокна і т.д.). Дана група сорбентів вважається найбільш ефективною, використання синтетичних волокнистих матеріалів дозволить ефективно вбирати нафтопродукти, утримуючи їх в своєму обсязі з наступною регенерацією і можливістю повторного використання [7].

Визначено, що ефективними і екологічно доцільними є синтетичні волокнисті матеріали з різним типом наповнювача. Волокнистий сорбент це є відходи текстильної промисловості, які являють собою плутанку високооб'ємних комбінованих петельних ниток, що склалися з двох компонентів у співвідношенні ПУ/ПА 70/30 %. матеріал, який володіє високою сорбційною ємністю (до 40 г/г сорбенту), плавучістю, низьким водопоглиненням і високо пористою поверхнею.

Волокнисті сорбційно-активні матеріали можуть використовуватися як в місцях аварійних розливів нафтопродуктів, так і місцях поступового накопичення рідин протягом тривалого проміжку часу (автозаправні станції, залізничні станції, видалення нафти з цистерн і т.д.). Матеріал має високий опір до дії навколишнього середовища, зберігає властивості в великому температурному діапазоні. Механічні властивості матеріалу забезпечують простоту маніпулювання ними а також легкість його видалення після проведення заходів ліквідації нафтопродуктів. характеризуються можливістю багаторазового використання.

Висновки

Таким чином, в результаті аналізу відомих типів сорбентів, використовуваних для збору нафти і нафтопродуктів з поверхні води, встановлено наступне:

- волокнисті сорбційні матеріали мають високу сорбційну ємність по нафті (до 40 г / г) і здатність витримувати велику кількість циклів регенерації, що дає можливість їх багаторазового використання;
- можливість їх виробництва з вторинної сировини дозволяє вирішити проблему утилізації полімерних відходів;
- можна регулювати міцність, щільність, волокнистих матеріалів та інші характеристики за допомогою різних видів наповнювачів;
- всі волокнисті сорбенти характеризуються високим ступенем віджимання поглиненої нафти;
- характеризуються екологічною чистотою та безпечністю їх застосування.

1. Міністерство екології та природних ресурсів України [Електронний ресурс]: веб-сайт. – Режим доступу: <http://www.menr.gov.ua/content/-/category/192>.

2. Paulauskiene, T., Jucik I., Jušcenko N., Baziuk D. The use of natural sorbents for spilled crude oil and diesel cleanup from the water surface // *Water Air Soil Pollut.* – 2014, – 225, – 1959–1971.

3. Хлесткин Р.Н. Самойлов Н.А. Шеметов А.В. Ликвидация разливов нефти при помощи растительных отходов // *Нефтяное хозяйство.* – 2000. - №7. – С. 84-85.

4. Kutchin A., Demin V., Shubnitsina E., Sazonov M. Protection of ground and water areas with use natural adsorbents. London:Thomas Telford, – 2000. – V.2. – 1486 p.

5. Breck D.W. Zeolites molecular sieves, Structure, Chemistry and Use// New York, Wiley. – 1974/ - 771p.

6. Zhao, M.Q.; Huang, J.Q.; Zhang, Q.; Luo, W.L.; Wei, F. Improvement of oil adsorption performance by a sponge-like natural vermiculite-carbon nanotube hybrid // *Appl. Clay Sci.* – 2011. – 53. – 1–7.

7. Sayeda S.A., Zayedb A.M.. Investigation of the Effectiveness of Some Adsorbent Materials in Oil Spill Clean-Ups // *Desalination.* – 2006. – 194. –1-3, – P. 90-100.

**ТЕОРЕТИЧНИЙ ОПИС ВИЗНАЧЕННЯ БРОМАНТАНУ НА АНОДІ,
МОДИФІКОВАНОМУ НАНОЧАСТИНКАМИ КУПРУМ (II) СУЛЬФІДУ У
ПОТЕНЦІОСТАТИЧНОМУ РЕЖИМІ**

*Ткач В.В.^{1,2}, Кушнір М.В.¹, де Олівейра С.С.², душ Рейш Л.В.³, Іванушко Я.Г.⁴, да Сілва А.О.⁵,
Ягодинець П.І.¹, Кормош Ж.О.⁶, Луганська О.В.⁷*

¹Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, Україна

²Федеральний університет штату Мату-Гроссу-ду-Сул, Бразилія

³Університет Траз-уж-Монтіш і Алту-Доуру, Португалія

⁴Буковинський державний медичний університет, Україна

⁵Федеральний університет Заходу штату Пара, Бразилія

⁶Волинський національний університет ім. Лесі Українки, Україна

⁷Запорізький національний університет, Україна

29 жовтня 1997 року після першого матчу відбору на Чемпіонат Світу з Футболу 1998 року у Франції між збірними України та Хорватії допінг-проба форварда збірної України Сергія Нагірняка дала позитивний результат. У крові футболіста було виявлено заборонений стимулюючий препарат бромантан (Рис. 1).

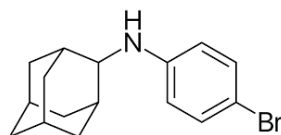
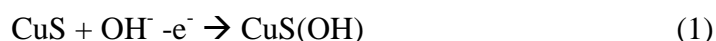


Рис. 1 Бромантан

Бромантан використовується як стимулятор м'язової активності, антидепресант і обмежено як протизапальний засіб. Активність препарату сильно залежить від дози. Через надзвичайно високу стимулюючу активність, його вживання заборонене спортсменам. Відтак, розробка ефективного методу його визначення – дійсно актуальне завдання, і електрохімічні методи можуть бути ефективними для його виконання.

В даній роботі розглядається можливість електрохімічного визначення бромантану на електроді, модифікованому наночастинками Купрум (II) сульфід. В даному випадку, Купрум (II) сульфід діє як відновник і окиснюється на електрохімічній стадії за рівнянням:



Утворюючи високоенергетичне похідне Купруму (III). Будучи надзвичайно сильним окисником, Купрум (III) окиснює бромантан за адамантановим кільцем та за механізмом електрохімічної гетероциклізації. Окрім цього, як сам бромантан, так і продукт його окиснення, стають здатними до електрополімеризації.

Таким чином, поведінка системи буде описана системою рівнянь (2):

$$\begin{cases} \frac{db}{dt} = \frac{2}{\delta} \left(\frac{B}{\delta} (b_0 - b) - r_{11} - r_{12} - r_p \right) \\ \frac{db}{dt} = \frac{2}{\delta} (r_{11} - r_{21} - r_{22}) \\ \frac{dc}{dt} = \frac{1}{C} (r_{11} + r_{12} + r_{21} + r_{22} - r_p) \end{cases} \quad (2)$$

Аналіз моделі показує, що наночастинки Купрум (II) сульфід є ефективним модифікатором електроду для визначення бромантану і синтезу його полімеру. Лінійна залежність між концентрацією препарату та електричним струмом, що йде через систему, спостерігається у широкій області параметрів, що сприяє легкості в інтерпретуванні аналітичного сигналу.

ТЕОРЕТИЧНИЙ ОПИС ВИЗНАЧЕННЯ ГІДРОКСИХІНОЛУ НА АНОДІ, МОДИФІКОВАНОМУ КОБАЛЬТ (III) ОКСИГІДРОКСИДОМ У ПОТЕНЦІОСТАТИЧНОМУ РЕЖИМІ

*Ткач В.В.^{1,2}, Кушнір М.В.¹, де Олівейра С.С.², душ Рейш Л.В.³, Іванушко Я.Г.⁴, да Сілва А.О.⁵,
Ягодинець П.І.¹, Кормош Ж.О.⁶, Луганська О.В.⁷, Листван В.В.⁸, Дитинченко І.М.⁸*

¹Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, Україна

²Федеральний університет штату Мату-Гроссу-ду-Сул, Бразилія

³Університет Траз-уж-Монтіш і Алту-Доуру, Португалія

⁴Буковинський державний медичний університет, Україна

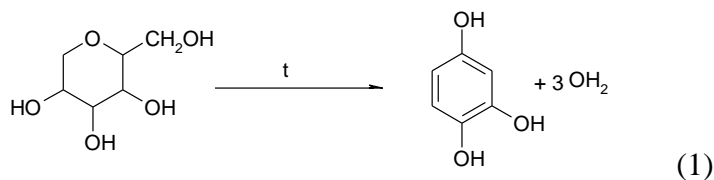
⁵Федеральний університет Заходу штату Пара, Бразилія

⁶Волинський національний університет ім. Лесі Українки, Україна

⁷Запорізький національний університет, Україна

⁸Житомирський державний університет ім. І. Франка, Україна

Гідроксихінол – природна та промислова речовина, часто використовується в органічному синтезі різних лікарських засобів, а також в нанотехнології як екологічно безпечний мономер для провідних полімерів. Також її застосовують у біохімії як маркер активності певних ензимів. Основний метод його синтезу – дегідратація фруктози (1):



З іншого боку, гідроксихінол, як і інші незаміщені поліфеноли, в великих кількостях вважаються забрудниками промислових вод, з огляду на токсичність для водних організмів. Таким чином, розробка методу визначення концентрації даної сполуки – дійсно актуальне питання.

Будучи триатомним фенолом, що поєднує в собі властивості α і γ -гідрохінонів, гідроксихінол є електрохімічно активним. При цьому основних напрямків окиснення є два – до 1,2 і 1,4-хінонного похідного. Полімеризація з утворенням провідного полімеру також можлива у специфічних умовах.

Дана робота описує можливість використання електроду, модифікованого Кобальт (III) оксигідроксидом та його композитом із провідним полімером для електрохімічного визначення гідроксихінолу. При цьому Кобальт (III) оксигідроксид можна використовувати в якості як окисника, так і відновника.

В першому випадку, схема електроаналітичного процесу буде описана на рисунку:

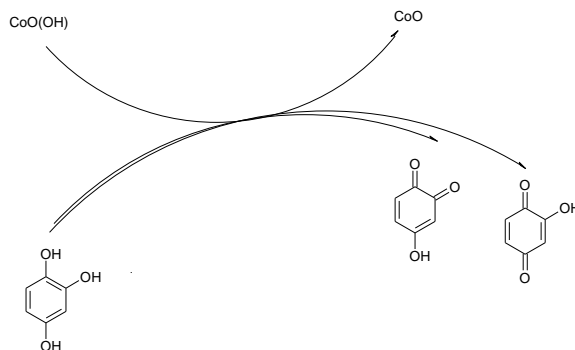


Рис. Схема електроаналітичного процесу

У найпростішому випадку (потенціостатичне електроокиснення без електрополімеризації), поведінка системи описується біваріантною системою (2):

$$\begin{cases} \frac{dh}{dt} = \frac{2}{\delta} \left(\frac{H}{\delta} (h_0 - h) - r_{11} - r_{12} \right) \\ \frac{dc}{dt} = \frac{1}{C} (r_2 - r_{11} - r_{12}) \end{cases} \quad (2)$$

Аналіз поведінки даної системи підтверджує, що Кобальт (III) оксигідроксид є ефективним модифікатором електроду для електрохімічного визначення гідроксигінолу. Стійкість стаціонарного стану встановлюється легко, а лінійна залежність між концентрацією гідроксигінолу і електрохімічним параметром (у даному випадку, струмом) справджується в широкій області параметрів. Що ж до електроаналітичного процесу, то він контролюється дифузією аналіту.

ТЕОРЕТИЧНИЙ ОПИС ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ПРЕПАРАТУ АЦЕТАЗОЛАМІД НА ЕЛЕКТРОДІ, МОДИФІКОВАНОМУ КОМПОЗИТОМ ПОЛІ(5-АМІНО-1,4-НАФТОХІНОНУ) ІЗ КОБАЛЬТ(III)ОКСИГІДРОКСИДОМ

Ткач В.В.^{1,2}, Кушнір М.В.¹, де Олівейра С.С.², душ Рейш Л.В.³, Іванушко Я.Г.⁴, да Сілва А.О.⁵, Ягодинець П.І.¹, Кормош Ж.О.⁶, Луганська О.В.⁷

¹Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, Україна

²Федеральний університет штату Мату-Гроссу-ду-Сул, Бразилія

³Університет Траз-уж-Монтіш і Алту-Доуру, Португалія

⁴Буковинський державний медичний університет, Україна

⁵Федеральний університет Заходу штату Пара, Бразилія

⁶Волинський національний університет ім. Лесі Українки, Україна

⁷Запорізький національний університет, Україна

Ацетазоламід (рис. 1) – один із препаратів, що використовуються для лікування та профілактики «гірської хвороби». Він прискорює кровообіг, що є надзвичайно важливим при знаходженні на висоті понад 1000 м.

Ацетазоламід є діуретиком, а також прискорювачем току крові, що дуже важливо в умовах нестачі кисню. Однак його вживання є забороненим перед змаганнями, оскільки прискорюючи сечовиділення він маскує вживання інших стимулюючих препаратів. Відтак, розробка методів його визначення є дійсно актуальним завданням

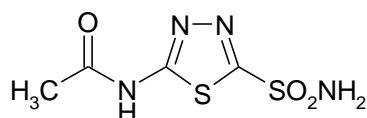


Рис. 1 Ацетазоламід

Оскільки ацетазоламід містить електроактивні групи, електрохімічні методи аналізу можливі для нього. Оскільки сама молекула препарату містить електроноакцепторні фрагменти (сульфамідна, амідна групи, два піридинові атоми Нітрогену), катодні методи визначення підходять для нього.

Що ж до анодного окиснення, воно реалізується по атомах Нітрогену та Сульфуру з використанням специфічних окисно-відновних пар, однією із яких є $\text{CoO(OH)} - \text{CoO}_2$. В даній роботі теоретично розглядається можливість електрохімічного визначення ацетазоламідну на електроді, модифікованому даною окисно-відновною парою.

Окиснення ацетазоламідну може реалізуватися як за атомами Нітрогену, так і за атомом Сульфуру в тіадіазольному циклі (рис. 2):

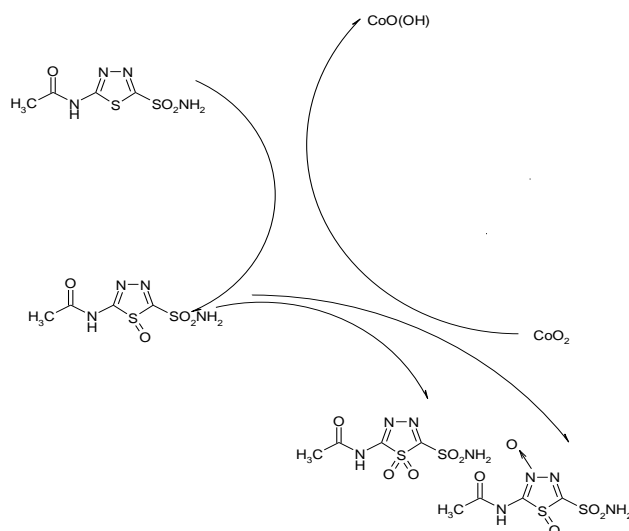


Рис. 2 Схема електроокиснення ацетазоламідру

Аналіз системи показує, що електрохімічне визначення ацетазоламідру реалізується ефективно. Лінійна залежність струму від концентрації реалізується в широкій області параметрів. Що ж до осциляторної нестійкості, у кислому середовищі вона реалізується більш імовірно, ніж у нейтральному та лужному.

ТЕОРЕТИЧНИЙ ОПИС ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ПРЕПАРАТУ ЕФЕДРИН НА ЕЛЕКТРОДІ, МОДИФІКОВАНОМУ КОБАЛЬТ(III)ОКСИГІДРОКСИДОМ

*Ткач В.В.^{1,2}, Кушнір М.В.¹, де Олівейра С.С.², душ Рейш Л.В.³, Іванушко Я.Г.⁴, да Сілва А.О.⁵,
Ягодинець П.І.¹, Кормош Ж.О.⁶, Луганська О.В.⁷, Копійка В.В.⁷*

¹Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, Україна

²Федеральний університет штату Мату-Гроссу-ду-Сул, Бразилія

³Університет Траз-уж-Монтіш і Алту-Доуру, Португалія

⁴Буковинський державний медичний університет, Україна

⁵Федеральний університет Заходу штату Пара, Бразилія

⁶Волинський національний університет ім. Лесі Українки, Україна

⁷Запорізький національний університет, Україна

В 1994 році в США пройшов 15-й Чемпіонат Світу з Футболу. Це був останній чемпіонат світу, у якому брали участь 24 команди – надалі став використовуватися формат із 32 командами, в якому світова першість розігрується і досі. Переможцем стала збірна Бразилії, очолювана Маріо Загалло. Для неї це був четвертий титул.

Що ж до збірної Аргентини, яка у 1986 році перемогла на Світовій Першості, а у 1990 му поступилася у фіналі збірній Німеччини за сумнівного суддівства, то ЧС-1994 року вона розпочала більш ніж вдало і з Дієго Армандо Марадонією (1960 – 2020) у складі легко декласувала збірні Греції та Нігерії. Напередодні третього матчу групового етапу зі збірною Болгарії допінг-проба Марадони виявилася позитивною. У крові Марадони було виявлено ефедрин (рис. 1) стимулятор, використовуваний як добавка для схуднення. Ефедрин є природною речовиною – алкалоїдом ефедрини.

Наразі концентровані розчини ефедрину заборонені у багатьох країнах світу, однак у східній традиції (наприклад, у Китаї, де екстракт ефедрини продають легально) він застосовується як харчова добавка і основа для напоїв. Відтак, розробка ефективного методу визначення концентрації ефедрину – дійсно актуальне завдання.

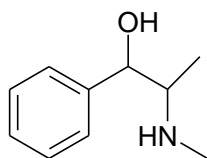


Рис. 1 Ефедрин

У даній роботі розглядається можливість електрохімічного визначення ефедрину на полімерному електроді, модифікованому Кобальт(III) оксигідроксидом. В такому разі окиснення може відбутися як по гідроксильній групі, так і по бічному ланцюгу із гетероциклізацією. Її продуктом є похідне індолу, здатне до електрополімеризації, в якій можуть взяти участь і неокиснені молекули ефедрину. Подібне явище вже спостерігалось при електрополімеризації допаміну. Схематично електроаналітичний процес показано на рис. 2:

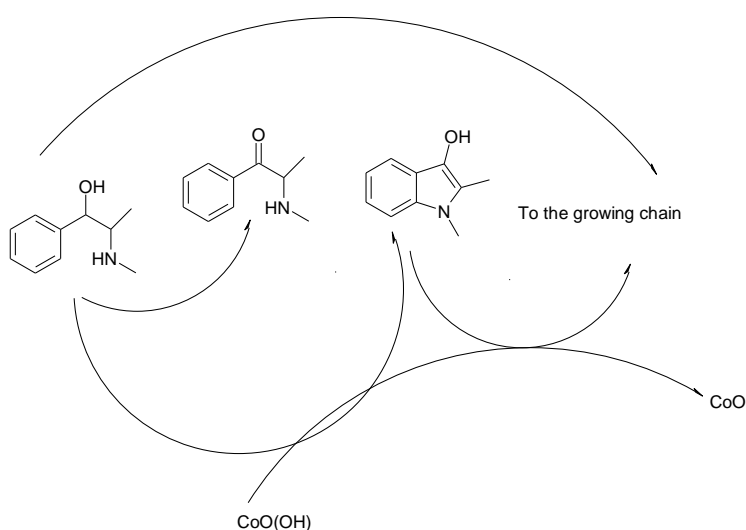


Рис. 2 Схема електроаналітичного та електросинтетичного процесу

Відтак, електроаналітичний процес може бути описаний системою балансових диференціальних рівнянь (1):

$$\begin{cases} \frac{ds}{dt} = \frac{2}{\delta} \left(\frac{\Delta}{\delta} (s_0 - s) - r_{O1} - r_{O2} - r_p \right) \\ \frac{ds^*}{dt} = \frac{2}{\delta} (r_{O2} - r_p) \\ \frac{dc}{dt} = \frac{1}{C} (r_{O1} + r_{O2} + r_p - r_O) \end{cases} \quad (1)$$

Аналіз поведінки даної системи показує, що стійкість стаціонарного стану в ній легко встановлюється. З іншого боку, осциляторна поведінка у даній системі більш імовірна, ніж у подібних, з огляду на утворення більш йонних амінних форм в процесі відновлення, що впливає на йонну силу ПЕШ. Також, з огляду на відсутність побічних реакцій, здатних скомпрометувати стійкість аналіту і (або) модифікатора електроду, стійкість стаціонарного стану відповідає лінійній залежності між концентрацією ефедрину та електрохімічним параметром. Таким чином, Кобальт(III) оксигідроксид – ефективний модифікатор електроду як для визначення концентрації ефедрину, так і для отримання його полімеру внаслідок непрямої електрополімеризації.

ТЕОРЕТИЧНИЙ ОПИС ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ПРЕПАРАТУ ДИМЕТИЛАМІЛАМІН НА ЕЛЕКТРОДІ, МОДИФІКОВАНОМУ КОМПЗИТОМ ПОЛІПІРОЛ-КОБАЛЬТ(III) ОКСИГІДРОКСИД

Ткач В.В.^{1,2}, Кушнір М.В.¹, де Олівейра С.С.², душ Рейш Л.В.³, Іванушко Я.Г.⁴, да Сілва А.О.⁵, Ягодинець П.І.¹, Кормош Ж.О.⁶, Луганська О.В.⁷, Копійка В.В.⁷

¹Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, Україна

²Федеральний університет штату Мату-Гроссу-ду-Сул, Бразилія

³Університет Траз-уж-Монтіш і Алту-Доуру, Португалія

⁴Буковинський державний медичний університет, Україна

⁵Федеральний університет Заходу штату Пара, Бразилія

⁶Волинський національний університет ім. Лесі Українки, Україна

⁷Запорізький національний університет, Україна

Наприкінці 2020 року капітан збірної Казахстану з футболу Бауиржан Ісламхан втрапив у скандал – допінг-проба показала присутність забороненого препарату диметиламіламіну (рис. 1). В результаті, УЄФА відсторонила його від футболу на два роки. В результаті цього, він не зіграє у відборі до ЧС-2022 у Катарі.

Диметиламіламін (ДММА) – природна речовина з екстракту герані. Вона використовується в якості ліків від закладеності носа та як харчова добавка у США. Незважаючи на це, через стимулюючу дію, вона внесена у список ВАДА та ФІФА, через що її заборонено вживати футболістам. Відтак, розробка ефективного методу його визначення – дійсно актуальне завдання.

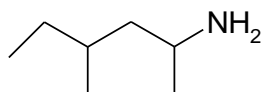


Рис. 1 Диметиламіламін

У даній роботі розглядається визначення концентрації диметиламіламіну на електроді, модифікованому композитом Кобальт(III) оксигідроксиду із поліпіролом. В такому разі, схема електрохімічного аналізу буде зображена на Рис. 2:

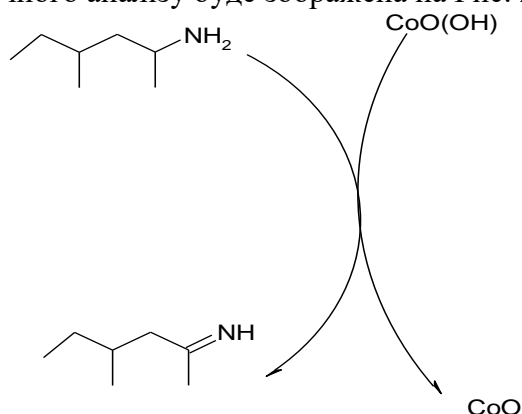


Рис. 2 Схема електроаналітичного визначення диметиламіну на кобальт(III) оксигідроксиді

В режимі сталої різниці потенціалів, поведінка в електроаналітичному процесі опишеться системою трьох балансових диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{dm}{dt} = \frac{2}{\delta} \left(\frac{M}{\delta} (m_0 - m) - r_1 \right) \\ \frac{dc}{dt} = \frac{1}{C} (\sigma_2 - r_1) \\ \frac{dq}{dt} = -\frac{U}{AR} - i_F \end{cases}$$

Аналіз даної системи показує, що в режимі сталої різниці потенціалів система поводить себе більш динамічно, ніж у гальвано- та потенціостатичному режимі. Так, осциляторна поведінка в цій системі більш імовірна. Незважаючи на це, Кобальт (III) оксидгидроксид у поєднанні з поліпіролом – ефективний модифікатор електроду для визначення диметиламіламіну.

ТЕОРЕТИЧНИЙ ОПИС ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ПРЕПАРАТІВ ОРНІДАЗОЛ ТА РОНІДАЗОЛ НА ЕЛЕКТРОДІ, МОДИФІКОВАНОМУ КОПОЛІМЕРОМ АКРИДИНОВОГО ПОМАРАНЧЕВОГО ІЗ 5-АМІНО-1,4-НАФТОХІНОНОМ

Ткач В.В.^{1,2}, Кушнір М.В.¹, де Олівейра С.С.², душ Рейш Л.В.³, Іванушко Я.Г.⁴, да Сілва А.О.⁵, Ягодинець П.І.¹, Кормош Ж.О.⁶, Луганська О.В.⁷

¹Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, Україна

²Федеральний університет штату Мату-Гроссу-ду-Сул, Бразилія

³Університет Траз-уж-Монтіш і Алту-Доуру, Португалія

⁴Буковинський державний медичний університет, Україна

⁵Федеральний університет Заходу штату Пара, Бразилія

⁶Волинський національний університет ім. Лесі Українки, Україна

⁷Запорізький національний університет, Україна

Орнідазол та ронідазол (рис. 1) – антипротозойні агенти, використовувани в ветеринарній медицині для лікування гістомоніазу та свинської дизентерії. Також вони використовуються для лікування різноманітних інфекцій у котів.

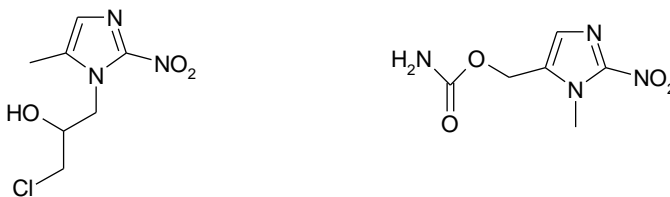


Рис. 1 Орнідазол та ронідазол

Обидва препарати мають подібну будову та дію. Однак, якщо орнідазол може застосовуватися і до тварин, і до людей, то ронідазол є виключно ветеринарним препаратом, надзвичайно токсичним для людей. Саме тому розробка методу спільного визначення обох препаратів є дійсно актуальним завданням.

В даній роботі здійснюється теоретична оцінка можливості електрохімічного визначення обох препаратів на електроді, модифікованому кополімером акридинового помаранчевого із 5-аміно-1,4-нафтохіноном у кислому середовищі. В такому разі схематично електроаналітичний процес буде відображено на Рис. 2:

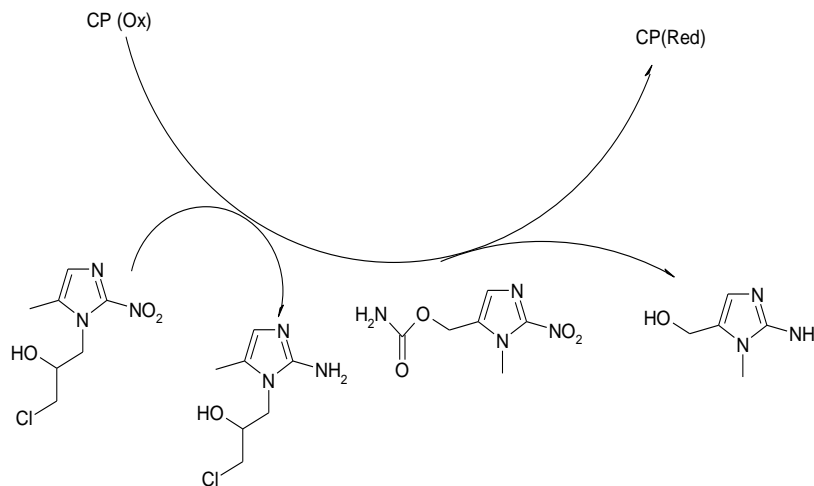


Рис. 2 Схема електроаналітичного процесу

При цьому, з огляду на те, що ронідазол є по суті естером нестійкої за нормальних умов амінометанової кислоти, виділяються газоподібні амоніак та Карбон діоксид в якості побічних продуктів. Тому електрохімічна комірка має бути пов'язаною із газовивідною трубкою для нормування внутрішньогор тиску на посудину. Відтак, поведінка електроаналітичного процесу опишеться системою трьох диференціальних балансових рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{do}{dt} = \frac{2}{\delta} \left(\frac{O}{\delta} (o_0 - o) - v_o \right) \\ \frac{dr}{dt} = \frac{2}{\delta} \left(\frac{R}{\delta} (r_0 - r) - v_{r1} - v_{r2} \right) \\ \frac{dp}{dt} = \frac{1}{P} (v_o + v_{r1} + v_{r2} - v_R) \end{cases} \quad (1)$$

Аналіз поведінки даної системи показує, що стійкість стаціонарного стану в ній легко встановлюється. З іншого боку, осциляторна поведінка у даній системі більш імовірна, ніж у подібних, з огляду на утворення більш йонних амінних форм в процесі відновлення, що впливає на йонну силу ПЕШ. Також, з огляду на відсутність побічних реакцій, здатних скомпрометувати стійкість аналіту і (або) модифікатора електроду, стійкість стаціонарного стану відповідає лінійній залежності між концентрацією обох препаратів та електрохімічним параметром. Таким чином, кополімер акридинового помаранчевого та 5-аміно-1,4-нафтохінону є ефективним модифікатором електроду для визначення орнідазолу та ронідазолу.

ЕКСТРАКЦІЯ ЙОДИДНИХ КОМПЛЕКСІВ Bi(III) З ВИКОРИСТАННЯМ ІЗОПРОПІЛОВОГО СПИРТУ

Циба І.О., Леонова Н.Г.

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

Сполуки вісмут(III) широко використовуються в медицині як знезаражувальний і підсушувачий засіб при лікуванні неспецифічних запальних процесів. Бісмут відноситься до малорухливих водних мігрантів і його концентрація в підземних водах складає близько 20 мкг/дм^3 , морських – $0,02 \text{ мкг/дм}^3$. У таких концентраціях бісмут не чинить негативний вплив на якість води. Можливість потрапляння Bi(III) в організм з водою або їжею незначна, більш вірогідною є надходження його в організм з лікарськими препаратами при прийомі їх всередину або через шкіру. Залежно від концентрації, бісмут володіє біогенними або токсичними властивостями. Саме тому важливим завданням аналітичної хімії є пошук нових чутливих, селективних методів визначення бісмуту(III).

Високою чутливістю визначення характеризуються екстракційно-спектрофотометричні методи визначення Bi(III) . Однак як екстрагенти комплексів бісмуту застосовують дорогі високотоксичні реагенти – кисневмісні органічні основи, ефіри, спирти, кетони, бензен, толуен тощо. Цих недоліків позбавлені двофазні водні системи, які є пріоритетними для розділення і визначення актиноїдів, рідкісних, кольорових, дорогоцінних металів і задовольняють вимогам «зеленої екстракції».

Метою роботи було дослідження можливості екстракційного вилучення йодидних комплексів бісмуту(III) в двофазних водних системах.

Для вибору умов екстракції в ділительну воронку поміщали розчин бісмуту(III) з концентрацією 100 мкг/см^3 , різні об'єми розчину йодиду калію з концентрацією $0,01 \text{ моль/дм}^3$ та $0,1 \text{ моль/дм}^3$, 5 М розчину сульфатної кислоти для створення потрібного значення рН, насичений розчин амоній сульфату і розбавляли водою, додавали екстрагент (ізопропіловий спирт).

Верхня концентраційна межа зумовлює розчинність солі у воді, нижня – відсутністю поділу фаз. Об'єми водної та органічної фаз варіювали у таких співвідношеннях: 1:1, 2:1 та 3:1. Найкраще розділення фаз спостерігається при співвідношенні водної та органічної фаз 3:1 у присутності висолювача сульфату амонію. Під час екстракції розчин в ділительній воронці забарвлювався в жовтий колір.

Під час проведення експерименту досліджено вплив концентрації йодид-іонів на розподіл бісмуту(III). Визначено, що найбільш повне вилучення бісмуту(III) спостерігається в інтервалі концентрацій йодид-іона $0,05\text{-}0,1 \text{ моль/дм}^3$.

Вміст бісмуту(III) у водній і органічній фазах визначали спектрофотометричним методом. Після розділення фаз екстракт відділяли і вимірювали його оптичну густину в діапазоні $200\text{-}600 \text{ нм}$ і товщині поглинаючого шару $l = 1 \text{ см}$. У спектрі поглинання екстракту спостерігаються максимуми при 350 і 460 нм , що за літературними даними відповідає складу BiI_4^- .

Таким чином, досліджено екстракцію йодидних комплексів Bi(III) у двофазних водних системах з використанням ізопропілового спирту і висолювача сульфату амонію в кислому середовищі. Встановлено, що для стабілізації комплексної сполуки і повного вилучення бісмуту(III) необхідний надлишок йодид-іонів, а час досягнення екстракційної рівноваги – 2 хв .

ОПТИМІЗАЦІЯ ХРОМАТО-МАС-СПЕКТРОМЕТРИЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ПОЛІЦИКЛІЧНИХ АРОМАТИЧНИХ ВУГЛЕВОДНІВ У ОБ'ЄКТАХ НАВКОЛИШНЬОГО СЕРЕДОВИЩА

Цимбалюк К.К.¹, Снурнікова О.В.¹, Мельник К.В.¹, Фадеєв Є.М.¹, Антонович В.П.²

¹Випробувальний центр ТОВ Одеса, Україна, kiorgg@yahoo.com

Поліциклічні ароматичні вуглеводні (ПАВ) відносяться до стійких органічних забрудників («*Persistent organic pollutants, POPs*»), які мають канцерогенну, мутагенну, тератогенну, гепатотоксичну дію на живі організми. Завдяки високій стабільності та розчинності у ліпідах вони здатні накопичуватися у навколишньому середовищі та включатися до харчових ланцюжків. Вміст ПАВ у об'єктах навколишнього середовища є індикатором антропогенного впливу на біосферу. Допустимий вміст найбільш токсичних ПАВ (бензо(а)пірену, хризену, бензо(б)флуорантену, бензо(а)антрацену) нормується як у самих агрокультурах, так і продуктах їх переробки (олії, жмихи, шроти). Отже, розробка чутливих та експресних методів визначення ПАВ у об'єктах навколишнього, є актуальним фундаментальним дослідженням та прикладним завданням.

В даному дослідженні були розроблені методи визначення ПАВ у донних відкладеннях, біоті та агропродукції. Оптимізовані умови екстракції (склад екстрагентів та час екстракції) в апараті Сокслета, очистки екстрактів проб ПАВ з різних об'єктів навколишнього середовища та параметри хромато-мас-спектрометричного визначення (ГХ-МС).

Встановлено, що склад проби суттєво впливає на оптимальні умови екстракції. Наприклад, найбільші коефіцієнти вилучення 72-92% 16 поліаренів з атестованого зразку мідій ІАЕА-142 отримані для проб, що були екстраговані сумішшю гексан:ацетон (3:1). Тоді як для проб водоростей ІАЕА-140, найбільші ступені вилучення 93-101% спостерігалися для суміші циклогексан:дихлорметан (1:1). Що стосується агропродукції, то показано перевагу використання для екстракції ПАВ бінарних сумішей розчинників «гексан-дихлорметан».

За літературними даними Сокслет-екстракцію ПАВ з біоти проводять протягом 18-24 годин [1], а агропродукції - 16-20 годин [2]. Отримані результати дозволяють зробити висновок про можливість скорочення часу екстракції до 6-8 годин за рахунок використання оптимальних сумішей розчинників.

Очистку екстрактів проводили методом колонкової рідинної хроматографії з використанням сорбенту – оксиду алюмінію, який містить 5 мас.% води. Даний сорбент є ефективним для очищення проб від коекстрактивних сполук матриці, переважну частину яких складають аліфатичні вуглеводні, ліпіди, фосфоліпіди, жирні кислоти, фітостерини, пігменти та інші ліпофільні сполуки. Об'єм аліквоти екстракту, що відбирається для очищення визначений експериментально для досліджуваних проб, виходячи з ємності хроматографічної колонки.

Інжекція в PTV-режимі є ефективною при визначенні ПАВ, оскільки температурна програма інжектора зменшує втрати від випаровування більш низькокиплячих сполук та розклад висококиплячих аналітів, а також поліпшує фокусування на вході аналітичної колонки. Встановлено, що початкова температура інжектору є суттєвою для аналітичної чутливості при визначенні «легких» ПАВ з двома та трьома кільцями.

Градувальні залежності є лінійними в діапазоні концентрацій 0.5-100 нг/мл. При цьому, результати хромато-мас-спектрометричних вимірювань вказують на відсутність суттєвих «матричних ефектів» при аналізі зразків з застосуванням запропонованої комбінації підготовки зразків та аналізу методом PTV-GC-MS.

Для контролю правильності результатів, які були одержані за розробленою методикою визначення поліаренів у біоті, аналізували сертифіковані референтні матеріали морських водоростей SRM ІАЕА-140 та мідій SRM ІАЕА-142 з атестованим вмістом ПАВ. Відповідні дані наведені в таблиці.

Таблиця

Результати визначення ПАВ у SRM ІАЕА-140 (мкг/кг)

Сполука	Атестоване значення	Довірчий інтервал	Отримане значення
Нафталін	17.0	9-43	22.3
Аценафтен	3.4	3.3-7	4.1
Флуорен	6.5	4.6-16	14.9
Фенантрен	76.0	40-113	65.7
Антрацен	14.0	4-93	22.9
Флуорантен	88.0	57-110	103.5
Пирен	67.0	46-79	54.6
Бенз(а)антрацен	25.0	14-32	19.5
Хризен	40.0	25-49	44.7
Бенз(б)флуорантен	36.5	33-37	36.6
Бенз(к)флуорантен	19.0	15-27	22.4
Бенз(а)пірен	20.0	16-22	17.4
Індено(1,2,3-сd)пірен	33.0	20-53	29.1
Дибенз(а,h)антрацен	4.5	2.6-16	6.4
Бензо(g,h,i) перилен	20.0	17.35	23.3

Отримані результати знаходяться в межах відповідних довірчих інтервалів. Це вказує на придатність запропонованої методики для визначення пріоритетних поліциклічних ароматичних вуглеводнів у зразках біоти. Дана методика визначення поліаренів була застосована для моніторингу концентрації 16 пріоритетних ПАВ у зразках біоти, відібраних на станціях моніторингу "УкрНЦЕМ" і "Аркадія".

Результати, отримані запропонованим методом визначення ПАВ у агропродукції, порівнювали з результатами визначення вмісту бенз(а)антрацену, хризену, бенз(б)флуорантену та бенз(а)пірену (показник «4ПАВ») методом високоефективної рідинної хроматографії з флуоресцентним детектуванням для зразків різних культур, які надійшли на випробування. Різниця між середніми значеннями двох методів є статистично незначущою, тобто їх результати є співставними.

1. Цымбалюк К.К., Деньга Ю.М., Антонович В.П. Определение полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) в объектах окружающей среды// Методы и объекты химического анализа. –2013. – 8(2). – С. 50-62.

2. Wojanowska M., Czerwiński J. Polycyclic aromatic hydrocarbons in rape seeds with relation to their growing site and thermal treatment // J Toxicol Environ Heal – Part A Curr Issues. – 2010. – 73(17-18). – P. 1250-1259.

МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО ТА НАНОТЕХНОЛОГІЇ

MICROEMULSIONS STABILIZED BY OLEOCHEMICAL SURFACTANS

Bodachivska L. Yu.

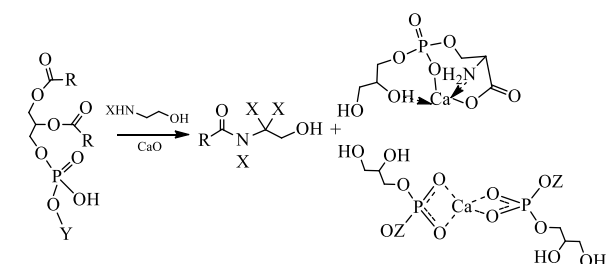
V.P. Kukhar Institute of Bioorganic Chemistry and Petrochemistry of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine, bodach@ukr.net

Among the most promising are microemulsions stabilized by oleochemical surfactants and their use in technological systems for gas and crude oil production. Microemulsions are superdispersed systems, which contain nanoscale droplets in a bulk phase and, in contrast to macroemulsions, have both thermodynamic and kinetic stability, thus, they are steady in time. This stabilization effect is a consequence of extra-low interfacial tension between water and oil phases that usually is provided by the mixture of surfactants. Selection of surfactants, as well as microemulsion composition, is a difficult target and, for the most times, depends from the terms of use and operation type.

Transamidation was carried out by interaction of sunflower oil of phosphatide concentrate (PC) with *N,N'*-bis(2-hydroxyethyl)ethylenediamine and reagent-catalyst CaO in nitrogen medium at the ratio of 1:3:0,4. The PC was loaded into the reactor and heated up to 100 °C. Calcium oxide and then *N,N'*-bis(2-hydroxyethyl)ethylenediamine were added to liquid PC at constant stirring, the temperature was increased up to 100-125 °C and it was kept at constant for 1,5-2,5 hours with subsequent use for preparation of microemulsions.

The course of the reaction was monitored by changing the concentration of amines by potentiometric titration. It was found that the decrease in the amine number indicated the course of the main reaction with the formation of surfactant alkanolamides.

This reaction can be represented in Fig.



Z – H, CH₂CH₂N(OH)(CH₃)₃,
CH₂CH₂NH₂, CH₂CH(NH₂)COOH at all.

The product produced comprises mixed composition of alkanolamides, fatty acid mono- and diacylglycerols, along with glycerolphosphatides. Herein alkanolamides possess the improved surface activity and are capable of producing dispersions, while acylglycerides and glycerolphosphatides provide the structural stability of colloidal systems.

Fig. Scheme of the reaction of PC amidation

Amidated PC are lubricant-like substances of dark brown color with a melting point of 50–68 °C and density of 1000–1021 кг/м³, which are well soluble in aliphatic and aromatic hydrocarbons. Microemulsions test results for the crude oil-well reconstruction and their optimal compositions are summarized in the table.

No	Composition microemulsions, wt. %					Properties microemulsions			
	Surfactants based on lipid biomass, wt. %	Water of phase, wt. %		Hydrocarbon of phase, wt. %	Solvent, wt. %	Viscosity, Pa·s	Delamination resistance, day	Biodegradation, %	Increase in oil mining factor, %
		H ₂ O	CaCl ₂						
1	5,0	24,5	15,0	50,5	5,0	1,01	>90	85	0,37
2	4,5	25,5	8,5	57,6	3,9	0,95	>90	87	0,32
3	3,2	25,0	8,3	59,0	4,5	1,2	>90	83	0,25
4	1,5	29,1	15,7	49,7	4,0	1,02	>2	82	0,21

The produced oleochemical surfactants are stable with controlled colloid-chemical properties. These surfactants based on lipid biomass the high solubilization capacity and can be used as nanoreactors for the synthesis of invert microemulsions. Laboratory tests of microemulsions were carried out on cores of oil fields. The technical result are an increase in oil mining factor is 0,11-0,57 %.

PHOTOLUMINESCENCE PROPERTIES O-DOPED CARBON NITRIDE WITH VARIOUS OXYGEN CONTENT

Bondarenko M.E.¹, Silenko P.M.¹, Shvalagin V.V.², Solonin Yu.M.¹, Ragulya A.V.¹, Zahorny M.M.¹, Gubareni N.I.¹, Khyzhun O.Y.¹, Yarova N.Yu.¹

¹Frantsevich Institute for Problems of Materials Science of NASU, mebondarenko@ukr.net

²Institute of Physical Chemistry of the NAS of Ukraine

It is found that oxygen doped carbon nitride O-g-C₃N₄ as well as undoped g-C₃N₄ luminesced at room temperature, which is promising for light-emitting structures [1, 2]. A comparison of the luminescence bands of the obtained O-doped carbon nitride (O-g-C₃N₄) samples when excited by light with the same wavelength (380 nm) is shown in Fig. 1. As can be seen, the shape of the luminescence bands and the positions of their maxima are close. However, as can be seen from the figure, the intensity of the luminescence bands of the obtained samples differs significantly. As the oxygen content in the material is elevated, the PL intensity decreases. With an increase of the amount of oxygen in the sample in addition to the main luminescence band at 450 nm, there is an additional band with a maximum at about 550 nm, that indicating the appearance of an additional route of radiative recombination of photogenerated charges and may be due to the appearance of additional defects in the band gap of the semiconductor.

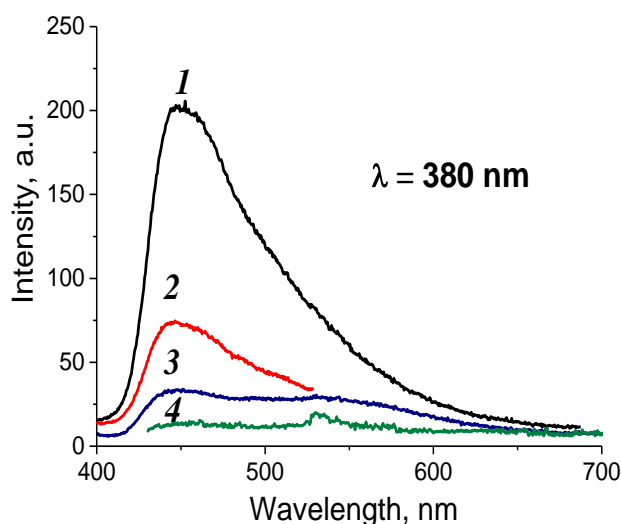


Fig. 1 PL spectra of samples with oxygen content: 1– 3%, 2 – 5%, 3 – 7%; 4 – 15% when samples excited by light with the same wavelength (380 nm)

As can be seen from Figure 2, in the excitation spectra of the obtained O-g-C₃N₄ samples with a porous lamellar structure (Fig. 3), during registration at the maximum luminescence (450 nm) there are two main peaks at about 275 and 370 nm, as well as a clear peak at about 315 nm.

Morphology and microstructure of the pure O-doped carbon nitride were studied by SEM technique. The results are shown in Fig. 3. As seen from Fig. 3, pure O-C₃N₄ reveals the lamellar stacking structure typical for undoped g-C₃N₄ consisting of thin, continuous, and wrinkle-enriched nanosheets. In general, the O-doped carbon nitride material consists of multiple layers of plane sheets covered with small flat flakes and particles of different sizes being in the range from several micrometers to 20 nm.

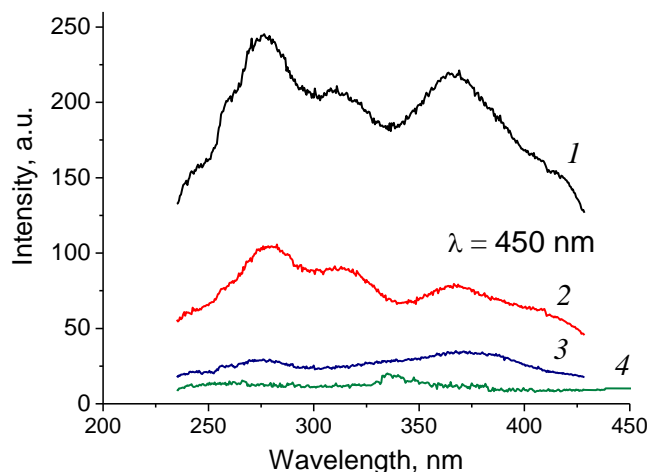


Fig. 2 PL spectra during registration at the maximum luminescence (450 nm) of samples with oxygen content: 1– 3%, 2 – 5%, 3 – 7%; 4 – 15%.

Thus, depending on the oxygen content in the sample, the intensity of its maxima and the ratio of intensities in the excitation spectra differ significantly, which indicates the possibility of regulating the energy structure of the samples by changing the amount of oxygen in the sample.

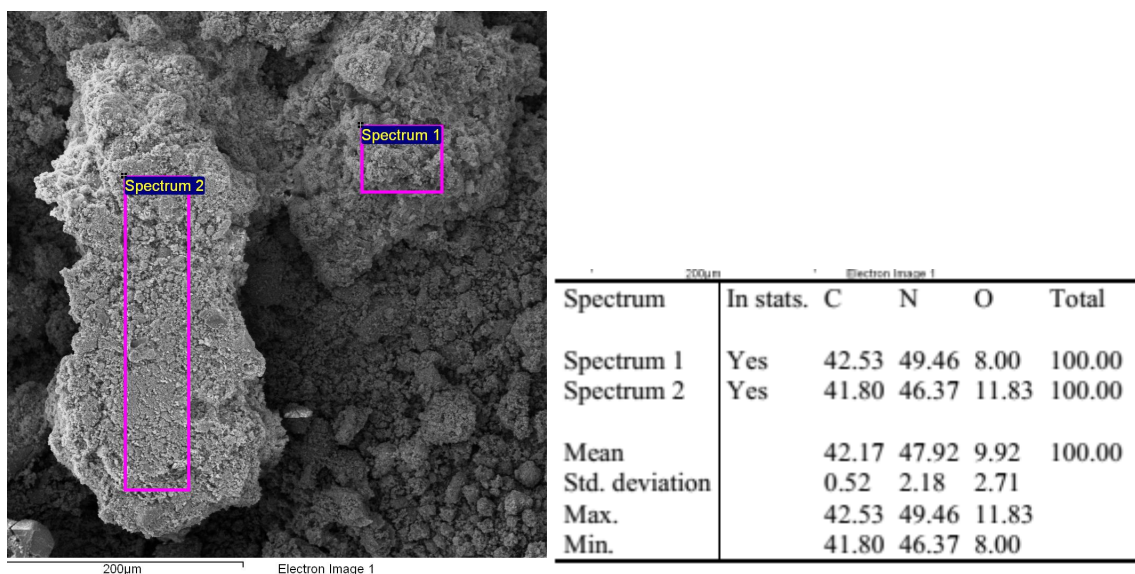


Fig. 3 SEM image of O-g-C₃N₄ sample

Acknowledgements. This work was partially supported by research project of NAS of Ukraine “Development of innovative photocatalytic nanostructured materials based on ZnO and TiO₂” (528/IPM-11/20).

1. Baglov A.V., Chubenko E.B., Hnitsko A.A., Borisenko V.E., Malasheich A. A., Uglov V. V. Structural and photoluminescence properties of graphite-like carbon nitride // *Semiconductors*. – 2020. – 54. – P. 228.
2. Putri L.K., Ng B.J., Er C.C., Ong W.J., Chang W.S., Mohamed A.R., Chaia S.P. Insights on the impact of doping levels in oxygen-doped gC₃N₄ and its effects on photocatalytic activity // *Appl. Surf. Sci.* – 2020. – 504. – P. 144427.

INFLUENCE OF THE PHASE COMPOSITION OF THE TiO₂ MATRIX ON THE PHOTOLUMINESCENCE PROPERTIES OF THE O-g-C₃N₄/TiO₂ COMPOSITE

Bondarenko M.E.¹, Silenko P.M.¹, Shvalagin V.V.², Solonin Yu.M.¹, Ragulya A.V.¹, Zahornyi M.M.¹, Gubareni N.I.¹, Khyzhun O.Y.¹, Yarova N.Yu.¹

¹Frantsevich Institute for Problems of Materials Science of NASU, mebondarenko@ukr.net

²Institute of Physical Chemistry of the NAS of Ukraine,

Previously it was shown that g-C₃N₄/TiO₂ composite attracts attention due to its well pronounced photocatalytic and photoluminescence properties of which offer promise for practical applications [1]. In this study were investigated the luminescence properties O-g-C₃N₄/TiO₂ composites (Figs. 2, 3) when O-g-C₃N₄ was deposited on anatase and rutile matrix (named as O-g-C₃N₄/TiO₂-A and O-g-C₃N₄/TiO₂-R respectively) at thermal treatment 0.5 and 1.5 hours (named as O-g-C₃N₄/TiO₂-A-0.5h and O-g-C₃N₄/TiO₂-R-1.5h respectively). At the using the TiO₂ matrix in the form of anatase or rutile, SEM images (Fig. 1) of nanoparticles of both composites demonstrate the arrangement of TiO₂ as separate globular nanoparticles and clusters between the plates of the porous scaly plates O-g-C₃N₄.

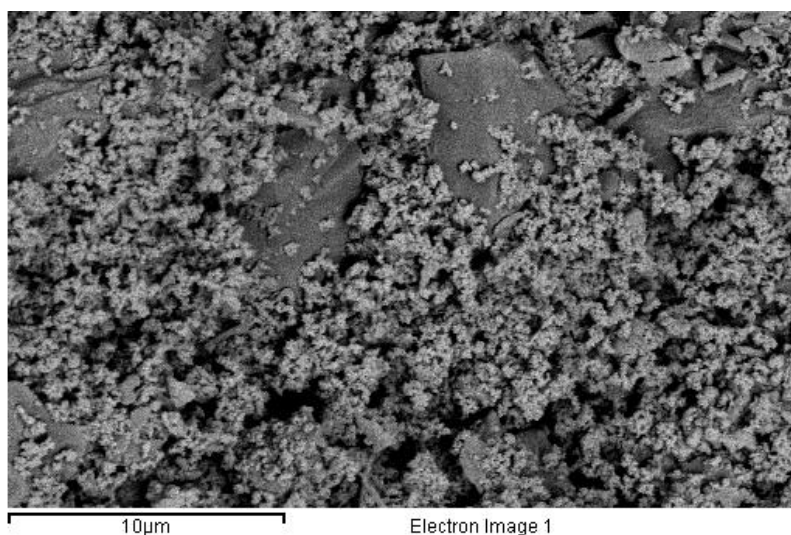


Fig. 1 SEM image of O-g C₃N₄/TiO₂-A-1.5h sample

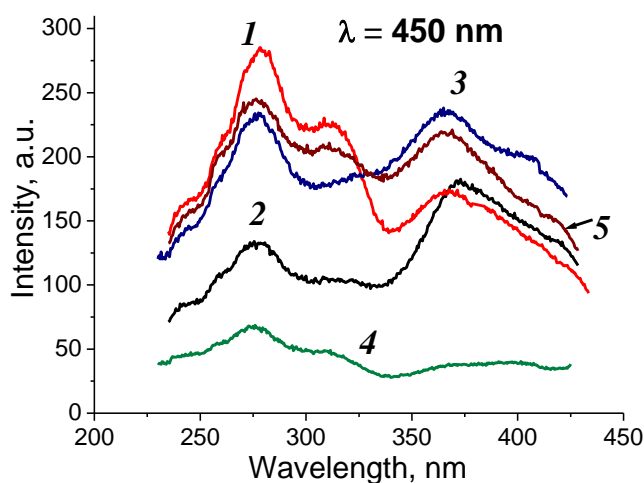


Fig. 2 PL spectra during registration at the maximum luminescence (450 nm) of samples: 1– O-g C₃N₄/TiO₂-A-0.5h, 2– O-g C₃N₄/TiO₂-A-1.5h, 3 – O-g C₃N₄/TiO₂-R-0.5h, 4 – O-g C₃N₄/TiO₂-R-0.5h, 5 – O-g C₃N₄

In the luminescence excitation spectra during registration at the maximum luminescence (450 nm) of the samples of pure O-g-C₃N₄ and the O-g-C₃N₄/TiO₂ composite there are two main peaks and a third less clear peak, which indicates the presence of three centers of luminescence excitation in the obtained samples (Fig. 2).

A comparison of the luminescence bands of the obtained samples of pure O-g-C₃N₄ and the O-g-C₃N₄/TiO₂ composite when excited by light with a wavelength (= 380 nm) is shown in Fig. 3. As can be seen, the shape of the luminescence bands and the position of their maxima are close, however, the intensity of the luminescence bands of the obtained samples differs significantly. The intensity of the photoluminescence bands of the composite samples (especially deposited on the rutile matrix) for 1.5 hours of thermal treatment is significantly lower than the composite samples obtained at short heat treatment time (0.5 h) and pure O-g-C₃N₄.

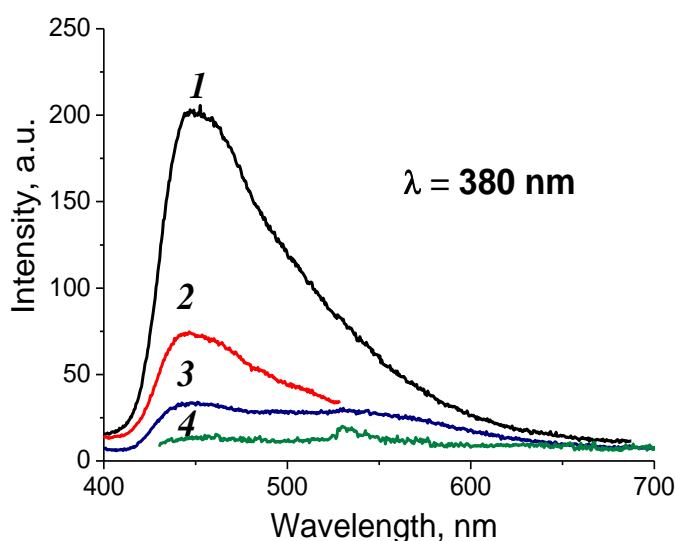


Fig. 3 PL spectra of samples: 1– O-g C₃N₄/TiO₂-A-0.5h, O-g C₃N₄/TiO₂-A-1.5h, 3 – O-g C₃N₄/TiO₂-R-0.5h, 4 – O-g C₃N₄/TiO₂-R-0.5h, 5 – O-g C₃N₄ when samples excited by light with the same wavelength (380 nm)

Since luminescence is a process that competes with photochemical transformations, a decrease in the luminescence intensity may indicate the possibility of increased photocatalytic activity of such samples in redox processes. According to the PL results, it can be demonstrated that the gap between TiO₂ and g-C₃N₄ obtained inhibits the photo-generated electrons from transferring between conduction bands of coupled semiconductors. Samples with more intense photoluminescence can be used in fluorescent lighting (fluorescent lamps), in the manufacture of luminous scales.

Acknowledgements. This work was partially supported by research project of NAS of Ukraine “Development of innovative photocatalytic nanostructured materials based on ZnO and TiO₂” (528/IPM-11/20).

1. You R., Jinyang Chen J., Hong M., Li J., Hong X., Facile synthesis of g-C₃N₄/TiO₂/hectorite Z-scheme composite and its visible photocatalytic degradation of Rhodamine B // *Materials*. – 2020. – 13. – P. 5304.

2. Zhong R., Zhang Z., Luo S., Zhang Z.C., Huang L., Gu M. Comparison of TiO₂ and g-C₃N₄ 2D/2D nanocomposites from three synthesis protocols for visible-light induced hydrogen evolution // *Catal. Sci. Technol.* – 2019. – 9. – P 75–85.

POLYMER STRUCTURE STABILIZATION FEATURES IN NANOCOMPOSITES

Gorelov B.M., Sigareva N.V.

Chuiko Institute of Surface Chemistry, NAS of Ukraine, bgorel@ukr.net

The effect of morphology, surface reactivity and concentration of oxide nanoparticles on the stabilization of the polymer structure of urea-formaldehyde, epoxy and polyester resins have been investigated. The used resins were distinguished by different degrees of the polymer structure disorder. As fillers the highly dispersed silicon oxides (A-300), titanium silica ($\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$) and dioxide titanium (TiO_2 , rutile) particles with specific surfaces of 280, 40, and $10 \text{ m}^2/\text{g}$, respectively, and average sizes of ~ 10 , 25, and 30 – 40 nm were applied. In polymer composites the particle content did not exceed 10 wt %. The studies were carried out by method of temperature-programmed desorption with mass-spectrometric recording of volatile fragments of destruction. Mass spectrometric analysis of atomic products is performed in the range 10 – 200 m/z (m is the mass, z is charge of the fragment), at a temperature range of 25 – 800 °C.

The behavior of thermal destruction of unbound and bound fragments of polymer chains and cross-links was studied at different contents of oxide nanoparticles in composites. A typical form of thermodesorption curves characterizing the thermal destruction of composites with oxide nanoparticles is shown in Fig. 1 and 2.

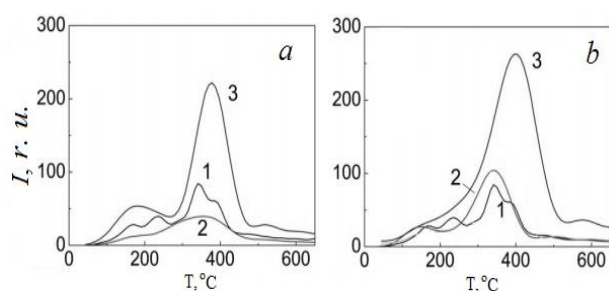


Fig. 1 Thermograms of thermolysis of polyester resin of volatile products cross-links C_6H_5 (1) and nanocomposites filled with TiO_2 (a) and titanium-silica (b) with C 0.5 wt% (2) and 3.0 (3) wt%

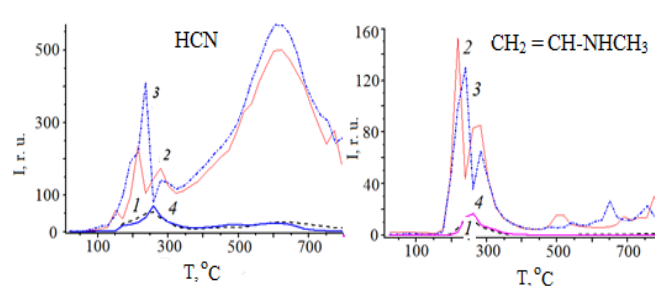


Fig. 2 Thermograms of urea-formaldehyde resin (1) and resin with 1.5% silicon dioxide (2), titanium dioxide (3) and titanium silica (4) of fragments of polymer chains with m/z 27 (HCN) and 57 ($\text{CH}_2=\text{CH-NHCH}_3$)

It was found that in all composites the growth in the thermal resistance occurs due to the destruction suppression of unbound atomic structure fragments at temperatures $T \leq 250$ °C and partially due to the weakening of thermal destruction of the bulk polymer in the interval $250 \leq T < 500$ °C. In this case, the appearance of new desorption bands is observed. The stabilization effect of the polymer structure is realized with low filler content, when $C \leq 3$ wt%, it has a non-monotonic character with a maximum in the filling range 0.5 – 1 wt%. The desorption activation energy of polymer structure depends on the disorder in the polymer matrix. With increasing filler content, the thermal destruction of the matrix enhances and the desorption of unbound chain fragments and cross-links is revealed.

Thus, in nanocomposites with oxide particles the stabilization effect of the polymer structure is realized at low filler concentrations. The effect is related to the fastening of unbound fragments of polymer structure to active surface centers of filler particles and the chemical interaction of atoms making up polymer chains with surface centers. At low filling due to the random character of bonding with arbitrarily localized surface sites is possible the formation less disordered interfacial structure and more durable than the initial polymer structure. The latter is the reason of exhibition of the stabilization effect in the limited content range.

SYNTHESIS OF NANODISPERSE LUMINOPHORES FOR PHOTODYNAMIC AND OPTOPHARMACOLOGICAL THERAPY

Kusyak A.P.^{1,2}, Avramenko Y.Y.¹, Gorbyk P.P.², Kusyak N.V.¹

¹ Ivan Franko Zhytomyr State University, a_kusyak@ukr.net

² Chuiko Institute of Surface Chemistry, NAS of Ukraine

Developing of multifunctional drugs enabling targeted delivery and metered local release of bioactive components is outstanding problem of modern pharmacology and medicine. For oncology, the concept of chemical design of magnetosensitive core-shell-type nanocomposites with a multilayered hierarchical shell nanostructure capable of performing the functions of medical-biological nanorobots has become a priority.

In addition to targeted drug delivery and storage in target cells, these functions may also include local chemo-, immuno-, neutron-capture, hyperthermic, and photodynamic therapy, and real-time magnetic resonance imaging.

Among new approaches that may be useful for treatment of minimally invasive, malignant tumors may be photodynamic therapy and optopharmacology in combination with X-ray irradiation. The present work discusses peculiarities of synthesis of nanodisperse phosphors based on lanthanum fluoride, their properties and prospects of application in photodynamic and optopharmacological therapy under conditions of irradiation by "soft" X-ray [1].

Fe₃O₄ nanoparticles were synthesized by co-precipitation by the Elmore reaction. Nanoparticle surface modification and synthesis of Fe₃O₄/LaF₃:Tb were synthesized by coprecipitation from aqueous solution. As precursors used: La(NO₃)₃·6H₂O, TbCl₃, NH₄F. All reagents qualify chemically pure. Distilled water was used as a solvent.

Lanthanum fluoride doped with Tb³⁺ luminescent particles was precipitated on magnetite nanoparticles as follows: a portion of freshly synthesized Fe₃O₄ nanoparticles was added to a minimum amount of water and dispersed. Salts of La³⁺ and Tb³⁺ in molar ratios of 4:1 are successively dissolved in a minimum volume of distilled water, added to the dispersion of magnetite and left until the sorption saturation of the surface. With constant stirring at 75 °C for 2 h, a solution of F⁻ in the ratio La:F 1:3 was added dropwise. The resulting solution containing nanoparticles was transferred to an autoclave with programmable heating / cooling 1°C /min and kept at 150° C for 24 hours. The obtained products were separated and after washing dried at 60°C [2, 3].

1. Liu, Y., Chen, W., Wang, S., Joly, A. G., Westcott, S., & Woo, B. K. X-ray luminescence of LaF₃:Tb³⁺ and LaF₃:Ce³⁺, Tb³⁺ water-soluble nanoparticles//Journal of Applied Physics. – 2008. – 103 (6).

2. Mangaiyarkarasi, R., Chinnathambi, S., Karthikeyan, S., Aruna, P., Ganesan, S. Paclitaxel conjugated Fe₃O₄@LaF₃:Ce³⁺, Tb³⁺ nanoparticles as bifunctional targeting carriers for Cancer theranostics application//Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2016. – 399. – P. 207–215.

3. Zhang, F., Braun, G. B., Pallaoro, A., Zhang, Y., Shi, Y., Cui, D., Stucky, G. D. Mesoporous Multifunctional Upconversion Luminescent and Magnetic “Nanorattle” Materials for //Targeted Chemotherapy. Nano Letters – 2011. – 12(1). – P. 61–67.

PROSPECTIVE ELECTRODE MATERIALS AND COMPONENTS FOR HIGH-RATE LITHIUM ION BATTERIES

Potapenko A.V.^{1,2}, Zhou M.², Potapenko O.V.¹, Kirillov S.A.¹

¹Joint Department of Electrochemical Energy Systems, Kyiv, Ukraine,

²Faculty of Materials Metallurgy and Chemistry, Jiangxi University of Science and Technology, Ganzhou, Jiangxi, P.R. China

Electrode materials are an integral part of lithium-ion batteries which attract much attention for application in electric vehicles, portable electronics devices and in military sector. For these purposes, the high rate ability must be realized by applying nanosized electrode materials as the cathodes due to an easier lithium ion diffusion through electrode upon intercalation/deintercalation processes in lithium-ion batteries. Due to this fact, great efforts are concentrated on the development of strategies of the synthesis of electrode materials consisting of small particles and having less tendency of aggregation.

Layered oxides of $x\text{Li}_2\text{MnO}_3 \cdot (1-x)\text{LiNi}_y\text{Mn}_z\text{Co}_{1-y-z}\text{O}_2$ (LMR-NMC) structures are beneficial over existing cathode materials for lithium-ion batteries not only due to the lowered amount of toxic cobalt, but, first of all, due to high specific capacity Q_{sp} equal to $250 \text{ mAh} \cdot \text{g}^{-1}$, which is higher than for any lithiated oxide material applied in commercial batteries. However, a serious problem limits the application of this electrode material in the word market of lithium batteries. It arises from the irreversibility of the capacity in the 1-st charge process coupled with oxygen evolution and low rate capability on the first discharge cycles, and much efforts are being undertaken to understand these phenomena. Various methods of obtaining LMR-NMC are effectively used and described in Ref [1, 2]. Considering the number of published papers on $x\text{Li}_2\text{MnO}_3 \cdot (1-x)\text{LiNi}_y\text{Mn}_z\text{Co}_{1-y-z}\text{O}_2$ compounds, those of $x = 0.5$ and $y = z \approx 1/3$ attract most attention of experimentalists demonstrating high specific capacities and good high-rate properties. More prospective are LMR-NMC compositions with lower amount of toxic, expensive cobalt, and greater content of cheap manganese, like $0.5\text{Li}_2\text{MnO}_3 \cdot 0.5\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{0.3}\text{Co}_{0.2}\text{O}_2$. For example, the best of existing substances of this composition can be discharged with currents up to $1400 \text{ mAh} \cdot \text{g}^{-1}$ (5 C), while attaining superior high-rate properties requires complicated, time-consuming chemical delithiation and subsequent relithiation of $0.5\text{Li}_2\text{MnO}_3 \cdot 0.5\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{0.3}\text{Co}_{0.2}\text{O}_2$.

Here, we report on characterization and electrochemical testing of $0.5\text{Li}_2\text{MnO}_3 \cdot 0.5\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{0.3}\text{Co}_{0.2}\text{O}_2$ ($\text{Li}_{1.2}\text{Ni}_{0.2}\text{Mn}_{0.52}\text{Co}_{0.08}\text{O}_2$) obtained by means of a simple citric acid aided route. The main innovation of this experiment lies in the fact that the LMR-NMC material obtained by such route demonstrates excellent electrochemical performance and overwhelms existing high-rate materials of the same composition. The specific capacity equals to the theoretical value ($280 \text{ mAh} \cdot \text{g}^{-1}$), the coulombic efficiency of this material remains high ($\sim 99\%$) even after high-rate tests, when discharge currents of $2240 \text{ mAh} \cdot \text{g}^{-1}$ (8 C) are applied, and low capacity fade is showing up after high current loads and upon further cycling by 0.1 C currents ($0.144 \text{ mAh} \cdot \text{g}^{-1}$ per cycle).

A new strategy of improving electrochemical properties of electrode materials is their surface modification. The atomic deposition layer (ADL) technique has been applied to avoid the electrode degradation upon cycling due to the instability of high oxidation states of transition metals forming the structure of LMR-NMC compositions. Especially, the initial charge-discharge profiles of NCM and Al_2O_3 -NCM materials in the range of 2.0 – 4.8 V at 0.2C demonstrate the presence of the first plateau (< 4.5 V) which corresponds to the $\text{Ni}^{2+} \rightarrow \text{Ni}^{4+}$ and $\text{Co}^{3+} \rightarrow \text{Co}^{4+}$ oxidation processes, respectively, and the 2-nd plateau is due to the further extraction of lithium and oxygen from the irreversible activation of Li_2MnO_3 at ~ 4.5 V. The 1-st full cycle shows no significant structural change of the materials and is in agreement with XRD results. Thus, for unmodified NCM material, the first charge and discharge capacities are 354 and $225 \text{ mAh} \cdot \text{g}^{-1}$, the irreversible capacity loss is $129 \text{ mAh} \cdot \text{g}^{-1}$. The coulombic efficiency for NCM material upon first cycling is 64 %. For modified Al_2O_3 -NCM sample, the first charge and discharge capacities are 330 and $230 \text{ mAh} \cdot \text{g}^{-1}$, the irreversible capacity loss is $100 \text{ mAh} \cdot \text{g}^{-1}$ and the coulombic efficiency is 70 %. The current load of

1C during long cycling affects the coulombic efficiency of the materials in different ways. Specifically, the Al_2O_3 -NCM sample demonstrates the highest coulombic efficiency of 93.6% at 0.2C, and 71.8% at 1C. These improvements are attributed to Al_2O_3 grown by ALD that protects the material surface and provides better cycling ability over time.

Another strategy of amending electrode materials touches upon isomorphous substitution of manganese with other ions. As an example, $\text{Li}_{1.2}\text{Ni}_{0.16}\text{Co}_{0.08}\text{Mn}_{0.54-x}\text{V}_x\text{O}_2$ samples ($x = 0, 0.002, 0.005, 0.01, 0.02$) have been synthesized by sol-gel method, and the effect of different amounts of V^{5+} ions on the structure, valence state and electrochemical properties of electrode materials has been studied. It appears that an appropriate amount of vanadium can suppress voltage attenuation. At 0.05 C current load, the first discharge capacity is $281 \text{ mAh}\cdot\text{g}^{-1}$, the coulombic efficiency of this material is 77.67% on the first cycles, accordingly. The specific charge capacity region between 2.0 – 4.5 V for the sample with $x = 0.01$ is higher than for other electrodes and equals to $134 \text{ mAh}\cdot\text{g}^{-1}$. In addition, capacity retention at 0.1C for $\text{Li}_{1.2}\text{Ni}_{0.16}\text{Co}_{0.08}\text{Mn}_{0.54-x}\text{V}_x\text{O}_2$ electrode upon 100 cycles is 92.3%, and the average voltage retention is 95.6%.

A polymer binder is an integral part of a cathode in lithium-ion battery due to the mechanical effect of holding particles of the active material and the conductive additives together. Furthermore, during interactions with the electrolyte, the polymer binder covering particles of the electrode material facilitates ionic conductivity in the electrode. Therefore, the creation of new-cheap and environmentally friendly polymer materials, as well as modification of existing ones is an urgent task. Recently, the following types of polymeric materials, such as carboxymethylcellulose (CMC) and polyacrylic acid (PAA) and its lithium and sodium salts are finding application in the manufacturing of lithium-ion batteries. The advantages of PAA include cheapness, ability to use water as a solvent, environmental safety and lower resistance of the electrode mass in comparison with PVDF. However, the more rigid structure of the PAA provoke the cracking effect during cycling (with a change in the volume of the unit cell) of the electrode materials, leading to a loss of electrical contact between the particles, as well as the peeling of an electrode mass from a conductive substrate. To increase the flexibility (reduce stiffness) and adhesive ability of this material, some researchers suggest a mixture of this binder with flexible polymers, such as styrenbutadiene rubber (SBR), CMC and other polymers.

Here, comparative characteristics of electrodes consisting of a lithium iron phosphate as a cathode material with two types of polymeric binders are presented. The polyvinylidene fluoride and the lithium salt of polyacrylic acid NV-1A modified by cyano/amide monomers are used for the electrode manufacturing process. In accordance with the results of galvanostatic cycling, and impedance spectroscopy studies, an explanation of the structural changes of the electrode material, which demonstrates excellent characteristics, is proposed. Electrochemical tests for full LFP/Graphite batteries with the NV-1A binder after cycling over 900 cycles show almost complete absence of resistance growth, which makes it possible to realize higher current loads in batteries.

1. Thackeray M.M, Croy J.R, Lee E, Gutierrez A, He M, Park J.S, Yonemoto B.T, Long B.R, Blauwkamp J.D, Johnson C.S, Shin Y, David W.I.F. The quest for manganese-rich electrodes for lithium batteries: strategic design and electrochemical behavior // *Sustain Energy Fuels*. – 2018. - 2, № 1. – P. 1375–1397.

2. Hu S, Pillai A.S, Liang G, Pang W.K, Wang H, Li Q, Guo Z. Li-rich layered oxides and their practical challenges: recent progress and perspectives // *Electrochem Energy Rev*. – 2019. - 2, № 1. – P. 277–311.

FORMING TWO-LAYER OXIDE FILMS ON THE Ti₆Al₄V ALLOY USING THE ELECTROCHEMICAL OXIDATION IN ORGANIC–WATER SOLUTION

Pylypenko O.

National Technical University «Kharkiv Polytechnic Institute», opilipenko1984@gmail.com

A high corrosion resistance of titanium alloys exposed to the action of oxidizing environment is conditioned by the availability of the dense oxide film on its surface that is formed on the metal surface under natural conditions. The reason for the film formation on the surface is a high sensitivity (affinity) of titanium to oxygen that results in the formation of a thin barrier layer of titanium dioxide when titanium contacts the air or other oxidizing oxygen-containing environments. In spite of its low thickness of 5 to 10nm, this layer is characterized by the dense structure and good adhesion to the metal surface that conditions a fast transition of titanium to the stable passive state alongside with a low conductivity of titanium dioxide. The methods were developed that allow us to form artificial oxide films on titanium using the processes of the diffusive oxygen embedment, the plasma oxidation, thermal, chemical and electrochemical oxidation. The obtained research data prove that titanium dioxide films possess not only protective properties; these simultaneously manifest the properties of bioinertness and biocompatibility and it means that TiO₂ is benign for the human body and results in no inflammatory processes in the case of the internal implantation. From this standpoint, the investigation of the processes of electrochemical oxidation as a method that enables the formation of the uniform films of a specified thickness on the articles of any configuration is of great interest. The film structure can be changed through the selection of an appropriate composition for the electrolyte by injecting activating ions into its composition [1, 2].

The investigations that were carried out allowed us to establish that the electrochemical oxidation of the titanium alloy of a Ti6Al4V grade in ethylene glycol - water solutions with the addition of ammonium fluoride enables the formation of the two-layer oxide films that are characterized by the availability of the thin dense barrier component and the thickened porous component. The kinetic dependences that were obtained during the formation of oxide films in the galvanostatic mode allowed us to establish the effect of the anodic current density, the electrolyte concentration and the ethylene glycol-to-water ratio on the dynamics of the alloy oxidation. The shape of obtained dependences is indicative of that the alloy oxidation results at the first stage in the formation of a continuous oxide layer of a barrier type [3, 4]. A further increase in the electrolysis duration that corresponds to the thickened oxide results in the film breakdown and in the formation of the pores in the film. The subsequent oxidation results in the thickened porous portion of oxide. Hence, the electrochemical oxidation results in the formation of the two-layer oxide film with barrier and porous components. In this case, the role of ethylene glycol consists in the affordance of the uniform formation of the oxide layer due to the surface active properties of alcohol and the elimination of the local etching of oxide through a decrease in the solution corrosiveness.

1. Pilipenko A., Pancheva H., Deineka V., Vorozhbiyan R., Chyrkina M. Formation of oxide films on VT6 alloy in the conditions of anodic polarization in solutions H₂SO₄ // EEJET. – 2018. – Vol. 3, No. 6. – P. 33–38.

2. Ivashchenko M., Smirnova O., Kyselova S., Avina S., Sincheskul A., Pilipenko A. Establishing the patterns in the formation of films on the alloy Ti6Al4V in carbonic acid solutions // EEJET. – 2018. – Vol. 5, No. 6. – P. 21–26.

3. Pilipenko A., Maizelis A., Pancheva H., Zhelavska Y. Electrochemical oxidation of VT6 titanium alloy in oxalic acid solutions // Chem. Chem. Tech. – 2020. – Vol. 14, No. 2. – P. 221–226.

4. Pilipenko A., Smirnova O., Gura S., Skorynina-Pohrebna O., Khoroshev O., Shkolnikova T. Studying the insulating properties of oxide films obtained on the Ti6Al4V alloy in tartaric acid solutions using the method of electrochemical decoration by copper // ARPN J. Eng. Appl. Sci. – 2020. – Vol. 15, No. 15. – P. 1657–1666.

PORE FORMATION OF ANODIC ALUMINA OXIDE WITH ELECTROLYTE CONTAINING GRAPHENE OXIDE

Rozhdestvenka L. M.¹, Kudelko K.O.¹, Ogenko V.M.¹

¹Vernadsky Institute of general and inorganic chemistry of National Academy of Sciences of Ukraine, kathykudelko@gmail.com

Nanoporous films of anodized aluminum (AOA) are inorganic structured porous templates, which are obtained by electrochemical oxidation on the surface of aluminum in sulfuric, oxalic, phosphoric acids. Nanoporous AOA materials have shown their structural advantages for usage in microelectronics, for highly sensitive optical devices, as sensors for solving analytical problems, as perspective membranes for hemodialysis [1-4]. This work presents studying of addition effect of graphene oxide particles in oxalic acid on morphology and pore formation of nanoporous anodic oxide films.

AOA materials are characterized by unique surface properties, that are characterized by: homogeneity, ordering of pores and diameter, hexagonal honeycomb structure. The advantage of the electrochemical synthesis of AOA is possibility to manipulate experimental conditions: voltage, current density, concentration, electrolyte, temperature. There is a possibility to control the dimension and thickness of the porous films. The disadvantage of anodic oxidation is in general necessity to carry out the process at a low temperature 0-5 °C. Carbon two-dimensional materials such as graphene and its derivatives oxidized graphene (GO), reduced graphene (rGO) show a significant potential for synthesis of composite materials due to their properties, namely mechanical strength, high specific surface area, resistance to acids/alkalies, resistance in organic solvents, relatively easy availability. It is known that the measured values of thermal conductivity of the suspension of single-layer graphene varied from 1500 to 5800 W/m*K [5].

In this work, suspended graphene was obtained electrochemically, similarly to [6]. Then definite mass of GO suspension as modifier was added to 0,3M C₂H₂O₄ electrolyte in range of: 0.001% (specified by AOA/GO₀₀₀₁) to 0.25% (AOA/GO₀₂₅). As a starting material for anodizing aluminum foil with impurities was used: Fe ≥ 0.01%, Si ≤ 0.01%, Mg ≤ 0.01%, Cu – traces, with a thickness of 0,3 mm, size of 45 mm × 45 mm. The aluminum foil was pretreated: annealed at 500 °C for 60 minutes, sonicated in ethanol 96 %, and then one side of the aluminum foil was covered with mask of photoresist RISTON. Aluminum plate was installed as an anode in an electrochemical lab module (Fig. 1). The temperature in the electrochemical compartment was about 10 °C, the anodizing time changed as a function of the thickness of the AOA film. Chemical polishing was performed in 2.5 M NaOH for 4 minutes and then the foil was neutralized, washed with distilled water. After anodization stage back side windows of aluminum foil were treated by chemical dissolution in a 0.1 M solution of CuCl₂ in 10 % HCl. Finally, to remove the barrier layer, a 5% H₃PO₄ was used.

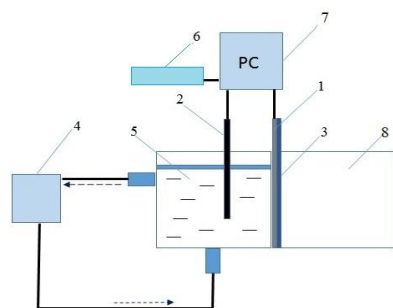


Fig. 1 Electrochemical lab module for oxidation: 1-aluminum foil, 2-platinum cathode, 3-photoresist mask, 4-cooling circuit, 5-electrolyte, 6-ammeter, 7-DC power supply, 8-second dissolution compartment

Scanning electron spectroscopy (Fig 2.) of AOA/GO₀₂₅ showed that the sample has a characteristic honeycomb structure, in particular combs with a smaller size comparing with AOA samples obtained without GO suspension. The inner pore diameter is in the range of 17-36 nm. The width of the inner wall is 22 nm. The thickness of AOA layer was measured and correlated with theoretical - 51 μm.

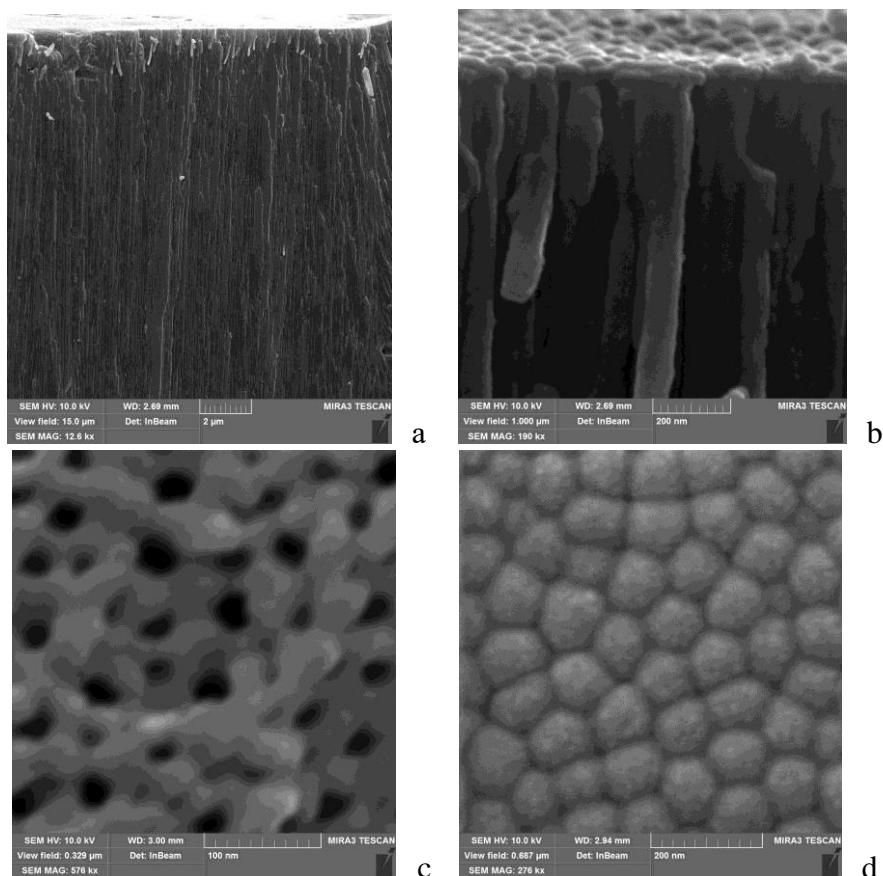


Fig. 2 SEM images AOA/GO 0025 0.3M C₂H₂O₄ (U = 40 V): a, b - cross section, c - pore structure (upper side), d - honeycomb structure (bottom side). One-stage anodizing

The obtained morphological data demonstrates the possibility to control the pore diameter, interpore distance during anodizing process with addition mass.% GO in electrolyte. Varying GO amount allows preparing AOA films with smaller pores without changing the voltage. The possibility to obtain flexible ceramic membrane using low cost aluminum foil could be resumed. Nanoporous AOA membrane in perspective could be used for separation of biological solutions.

1. Sulka G.D. Highly ordered anodic porous alumina formation by self-organized anodizing in Nanostructured materials in electrochemistry. – WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim 2008. – 116 p.

2. Lee, K.P. and Mattia, D. Monolithic nanoporous alumina membranes for ultrafiltration applications: characterization, selectivity-permeability analysis and fouling studies // J. Membr. Sci. 2013. – 435, – P. 52–61.

3. Kasi A.K., Kasi, J.K., Hasan M., Afzulpurkar N., Pratontep S., Porntheeraphat S., Pankiew A. Fabrication of low cost anodic aluminum oxide (AAO) tubular membrane and their application for hemodialysis // Adv. Mat. Res. – 2012. – P. 550–553.

4. Rozhdestvenska, L., Kudelko, K., Ogenko, V., & Chang, M. (2021). Membrane materials based on porous anodic aluminium oxide //Ukr. Chem. Journal, – 2020.– 86, №12. – C. 67-102.

5. Mu, X., Wu, X., Zhang, T. et al. Thermal Transport in Graphene Oxide – From Ballistic Extreme to Amorphous Limit. // Sci Rep. 2014 – P. 3909.

6. Пат. Україна u201902132, МПК5: C02F 1/28, B01D 15/04, B01D 15/00, B82B 3/00 «Спосіб отримання багатофункціонального композитного сорбенту гідратований діоксид цирконію-оксид графену» // Дзязько Ю.С., Огенко В.М, Куделко К.О., Яценко Т.В., Л.М. Рождественська; заявник та власник патенту Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського НАН України. № 139051, заявл. 04.03.2019, опубл. 26.12.2019, Бюл. № 24, 2019.

НІЗДРЮВАТИЙ БЕТОН З ФЕРОСИЛІЦІЄМ В ЯКОСТІ ГАЗОУТВОРЮВАЧА – ЕКОЛОГІЧНО БЕЗПЕЧНИЙ БУДІВЕЛЬНИЙ МАТЕРІАЛ

Ахтирко М.І., Фролова А.О., Сігунов О.О., Мусіна А.О.

Державний вищий навчальний заклад «Український державний хіміко-технологічний університет», marinka.ostapenko.1998@gmail.com

Ніздрюватий бетон – це штучний пористий будівельний матеріал, отриманий в результаті затвердіння раціонально підбраної і поризованої бетонної суміші на основі мінерального в'язучого, кремнеземистого компонента і добавок, з отриманням рівномірно розподілених і переважаючих в обсязі матеріалу ніздрюватих пор [1-2].

Газобетон добре підлягає обробці найпростішими інструментами: пиляється, свердлиться, строгається. У нього легко забиваються цвяхи, скоби; з часом газобетон стає все твердіше. Він не горить, бо складається тільки з мінеральних компонентів, екологічно безпечний. У складі газобетону немає синтетичних полімерів, хімічних добавок, токсичних і канцерогенних домішок. Тому у нього нульова емісія продуктів розпаду цих речовин в навколишнє середовище як при нагріванні, так і при охолодженні. При пожежі він не виділяє небезпечних для здоров'я людини речовин. Основними компонентами цього матеріалу є цемент, кварцовий пісок і спеціалізовані газоутворювачі. Також можливе додавання гіпсу і вапна. Сюди можуть входити і промислові відходи, такі, як, наприклад, зола і шлаки.

Метою науково-дослідницької роботи є встановлення впливу речовинного складу газобетонів та газоутворювача FeSi на показники морозостійкості коміркового бетону, а також встановлення впливу ряду хімічних добавок на підвищення його експлуатаційних характеристик. При виконанні науково-дослідницької роботи для виготовлення ніздрюватих бетонів використовувались такі сировинні матеріали: портландцементний клінкер заводу ВАТ «Івано-Франківськ Цемент», гіпсовий камінь Артемівського родовища, вапно Дніпровського будівельного заводу стінових матеріалів, річковий пісок, феросиліцій. Визначення межі міцності зразків передбачало встановлення руйнуючого навантаження на зразок на гідравлічному пресі ПСУ-10. Морозостійкість визначали заморожуванням зразків у морозильній камері при температурі мінус 18 °С з наступним відтаванням у камері над водою при температурі в приміщенні.

Аналіз результатів досліджень показав, що всі склади газобетонів, які містять 3 мас.% FeSi в якості газоутворювача відносяться до ніздрюватого бетону конструкційного призначення, оскільки значення щільності для них знаходяться в межах 0,9-1,01 г/см³ незалежно від умов твердіння. В той же час, як всі склади композицій, які містять 4 і 5 мас.% газоутворювача відносяться до конструкційно-теплоізоляційного газобетону, оскільки значення щільності для них лежать в межах 0,68-0,9 г/см³.

Аналіз міцностних характеристик композицій повітряно-вологого та автоклавного твердіння показав, що найбільші показники межі міцності на стиск (1,7-2 та 3-3,5 МПа, відповідно) незалежно від вмісту газоутворювача відносяться до складу №2, в якому кількість цементу на 5 мас.% більша за інші.

Аналіз впливу хімічних добавок, в якості яких виступили суперпластифікатор Поліпласт СП-1 та лінгосульфат натрію на фізико-механічні властивості бетонних композицій показав збільшення в переважній більшості міцностних характеристик. Так в 7 та 28 добовому віці зразки, які містили 0,1-0,4 мас.% суперпластифікатору Поліпласт СП-1 та лінгосульфат натрію показали зростання межі міцності на стиск на 15-20%.

1. Musina, A.O. Thermodynamic analysis of chemical reactions in the systems FeSi–Ca(OH)₂–H₂O і FeSi₂–Ca(OH)₂–H₂O / A.O. Musina, O.O. Sihunov, T.V. Kravchenko, A.O. Hura // *Voprosy khimii i khimicheskoi tekhnologii.* –2019. – №6, P. –136-143.

2. Сігунов О.О. Дослідження впливу дисперсності компонентів газобетону на його основні будівельні властивості / А.А. Салей, А.А. Сігунов, Т.В. Кравченко, Л.О. Хмарська // *Вопросы химии и химической технологии.* – 2015. – №5. – С. 75-78.

ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ОСОБЛИВОСТІ ПРОЦЕСУ РОЗЧИНЕННЯ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ $Cd_{1-x}Mn_xTe$ У ТРАВІЛЬНИХ КОМПОЗИЦІЯХ HNO_3 - KI

Білова Ю.С.¹, Денисюк Р.О.¹, Ткачук В.В.²

¹Житомирський державний університет імені Івана Франка, j.bilovka@gmail.com

²Житомирська ЗОШ імені гетьмана Івана Виговського №28

Напівпровідникова техніка безпосередньо пов'язана з попередньою обробкою напівпровідникових матеріалів. Саме отримання досконалих за заданою шорсткістю атомною структурою, та геометричною точністю напівпровідникових пластинок дає можливість виробляти надійні деталі для приладів із заданими властивостями, створювати високої якості поверхні напівпровідникових підкладок. Для отримання такої поверхні дуже часто використовують методи хіміко-механічного та хіміко-динамічного полірування, котрі вимагають пошуку та розробки технологічних прийомів, що дозволять контролювати процеси обробки напівпровідникових матеріалів [1]. Напівпровідники типу $A^{II}B^{VI}$, зокрема $CdTe$ та тверді розчини на його основі, перспективні для виготовлення детекторів x - та γ -випромінювання, найбільш широко використовуються для робочих елементів приладів, що працюють у ІЧ-області спектрі. Також ведуться роботи з вивчення властивостей кристалів твердих розчинів $Cd_{1-x}Mn_xTe$ ($x = 0,3; 0,47; 0,5$) як розбавлених магнітних напівпровідників і можливостей їх широкого використання в техніці. В літературі практично відсутні комплексні роботи, які пов'язані хімічною обробкою монокристалів та плівок $Cd_{1-x}Mn_xTe$ ($x = 0,3; 0,47; 0,5$), а зустрічаються лише фрагментарні дані

Метою дослідження є встановлення впливу гідродинамічних та температурних чинників на кінетику процесу полірування монокристалів $Cd_{1-x}Mn_xTe$ в травниках системи $HNO_3 - KI - ДМФА$ та визначити лімітуючі стадії цього процесу.

Для кінетичних досліджень використовували монокристали $CdTe$ та $Cd_{1-x}Mn_xTe$ ($x = 0,3; 0,47; 0,5$), які наклеювали за допомогою піцеїну до кварцових підкладок. Для приготування травильних розчинів використовували 21% розчин KI в диметилформаміді ($ДМФА$) та 68%-ву HNO_3 . Перед початком вимірювання кінетики розчинення поверхню напівпровідника протравлювали поліруючим травником і промивали 0,2 М водним розчином $Na_2S_2O_3$ та дистильованою водою [2]. Експериментальні дослідження проводили на установці, для хіміко-динамічного полірування методом диску, що обертається.

Визначено, що збільшення вмісту HNO_3 у травнику збільшує швидкість розчинення поверхні напівпровідника (рис.). Формування полірованої поверхні напівпровідників відбувається у вузькому інтервалі при концентрації нітратної кислоти 12-15 об.%. Це можна пояснити збільшенням концентрації окисника KI в травильних композиціях, внаслідок чого виділяється більше вільного йоду. При додаванні HNO_3 більше 15% спостерігається утворення осаду KNO_3 в травильному розчині, оскільки він погано розчинний в $ДМФА$, тому підвищувати концентрацію окисника немає можливості.

Порівнюючи залежності швидкості розчинення $CdTe$ та твердих розчинів $Cd_{1-x}Mn_xTe$ від концентрації мангану в складі напівпровідника можна помітити, що із збільшенням Mn відбувається збільшення швидкості розчинення досліджуваних зразків. Проте $CdTe$ має найбільші швидкості розчинення в травниках системи $HNO_3 - KI (DMFA)$ по відношенню до $Cd_{1-x}Mn_xTe$. Така тенденція зберігається для всіх досліджуваних травильних композицій, що свідчить про однотипний механізм розчинення монокристалів, які вивчались. Зниження швидкості травлення твердих розчинів $Cd_{1-x}Mn_xTe$ по відношенню до $CdTe$ може бути пов'язане з розупорядкуванням кристалічної ґратки кадмій телуриду при заміщенні атомів кадмію манганом, який має менший атомний радіус, та ущільненням упаковки кристалу. Досліджено залежність швидкості фізико-хімічної взаємодії твердих розчинів $Cd_{1-x}Mn_xTe$ у поліруючому розчині $HNO_3 - KI - ДМФА$ від швидкості обертання диску та встановлено, що процес полірування лімітується дифузійними або кінетичними стадіями. Такий механізм дозволяє підібрати оптимальні умови проведення ХДП для формування полірованої поверхні із заданою швидкістю розчинення.

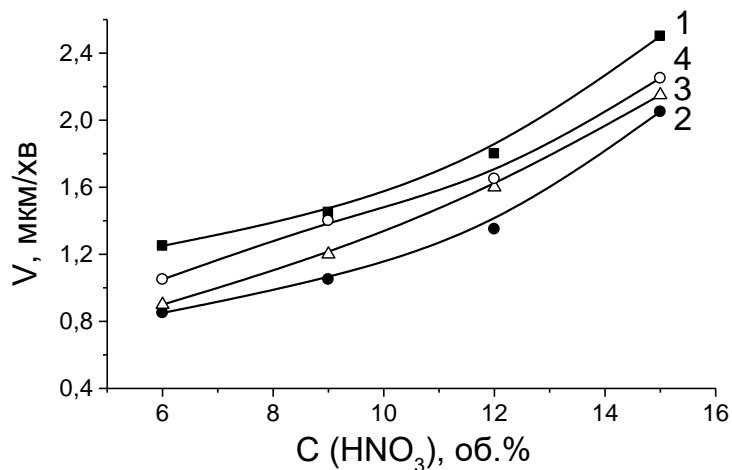


Рис. Концентраційні залежності швидкості травлення (мкм/хв) CdTe (1) Cd_{0,7}Mn_{0,3}Te (2), Cd_{0,53}Mn_{0,47}Te (3), та Cd_{0,5}Mn_{0,5}Te (4) в розчинах HNO₃ – KI – DMF (T = 293 K, γ = 78 хв⁻¹)

Визначено вплив концентрації окисника на кінетику хімічної взаємодії якості полірованої поверхні твердих розчинів Cd_{1-x}Mn_xTe в розчинах потрійної системи HNO₃ – KI – ДМФА. Визначено вплив концентрації мангану в монокристалі напівпровідника на швидкість і якість поверхні, що обробляється. Встановлено, що для хіміко-динамічного полірування твердих розчинів напівпровідників Cd_{1-x}Mn_xTe можна використовувати досліджувані розчини, при чому полірування лімітується дифузійним або змішаним механізмом. Запропоновані травильні композиції можуть бути використані для фінішної хімічної обробки твердих розчинів Cd_{1-x}Mn_xTe, після травлення в яких поверхні необхідно обробити Na₂S₂O₃ та великою кількістю води.

1. Denysyuk R.O., Tomashik V.M., Tomashik Z.F., Chernyuk O.S., Grytsiv V.I. Chemical treatment of monocrystalline cadmium telluride and Cd_{1-x}Mn_xTe solid solutions by H₂O₂ – HI – citric acid etchant compositions // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics. – 2009. – V. 12, N.2. – P. 125-128.

2. Томашик З.Ф., Денисюк Р.О., Томашик В.М., Чернюк О.С., Гнатів І.І., Раренко І.М. Хім.взаємодія монокристалів Cd_{1-x}Mn_xTe з розчинами йоду в ДМФА// Вопросы химии и химической технологии. – 2008. – № 5. – С. 104-107.

ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НАНОЧАСТИНОК Ag₂S, ОТРИМАНИХ МЕТОДОМ БІОЛОГІЧНОГО СИНТЕЗУ

Борова М.М., Горюнова І.І., Плоховська С.Г., Пушкарьова Н.О., Ємець А.І.

ДУ «Інститут харчової біотехнології та геноміки НАН України», Marie0589@gmail.com

Ag₂S є напівпровідниковим матеріалом з шириною забороненої зони ~ 1 еВ, що має відмінні фотоелектричні та термоелектричні властивості, високу хімічну стабільність та незначну токсичність для живих організмів. Наночастинки Ag₂S мають асиметричний спектр випромінювання, високу інтенсивність флуоресценції, світлостійкість, біосумісність та мнїторезистентність, що дає їм суттєвий потенціал застосування в оптоелектроніці, каталізі, як біомаркери і сенсори для медицини [1]. Існує два основних способи отримання колоїдних квантових точок на основі срібла, а саме синтез в органічній фазі та у водній фазі [2]. Квантові точки, що синтезовані в органічній фазі, зазвичай мають високу інтенсивність фотолюмінесценції, хорошу монодисперсність і високу стабільність, але їх синтез має деякі

недоліки, такі як токсичні реагенти, висока вартість експериментів, складні процедури або важкі умови реакції, такі як рутинний безкисневий процес, мікрохвильове опромінення або висока температура. Зелений синтез - це метод отримання напівпровідникових наночастинок з використанням різних живих систем, включаючи бактерії, дріжджі, гриби та рослини. Розробка екологічних, зручних та недорогих технологій синтезу наночастинок сульфиду срібла необхідна для того, щоб замінити шкідливі та дороговартісні покривні та відновлюючі агенти, які використовують у процесі хімічного синтезу наночастинок, що потім перешкоджає їх застосуванню в медико-біологічній галузі. Метою роботи було синтезувати квантові точки Ag_2S за допомогою екстракту «бородатих» коренів *Linaria maroccana*, дослідити їх фізико-хімічні властивості.

Для дослідження структури та морфології отриманих квантових точок Ag_2S використовували електронний мікроскоп JEOL, JEM-2100F (Японія). Прискорююча напруга приладу 200 кВ. Попередньо зразки обробляли ультразвуком, після чого краплини розчинів зразків наносили на мідну сітку з вуглецевим покриттям. Раманівська спектроскопія. Спектри мікрокомбінаційного розсіювання світла (мікро-КРС, Раманівські спектри) були отримані за допомогою спектрометра LabRam HR Evolution ("Horiba Scientific", Японія), оснащеного конфокальним мікроскопом BX-41 ("Olympus", Японія). Збудження мікро-КРС випромінюванням He-Ne лазера, спектральне розділення 3 cm^{-1} . Збудження при 633 нм. Точність визначення частоти фононних ліній становила $\leq 0,2 \text{ cm}^{-1}$. Потужність лазера $< 0,1 \text{ мВт}$, щоб уникнути нагрівання зразків під мікроскопом об'єктив ($50 \times$).

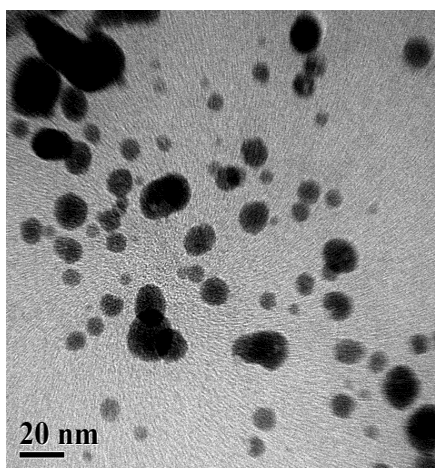


Рис. Трансмісійна електронна мікроскопія наночастинок Ag_2S (*L. maroccana*)

Для синтезованих наночастинок Ag_2S є характерною моноклинна кристалічна структура (акантит) та розміри окремих наночастинок переважно в межах 5-10 нм. За допомогою трансмісійної електронної мікроскопії визначено також елементний склад синтезованих зразків наночастинок. Встановлено, що, залежно від ділянки зразка, переважно вміст елементів Ag та S знаходиться у межах 30-40%. Отримані Раманівські смуги добре співвідносяться з існуючими спектрами комбінаційного розсіювання для нанокристалів Ag_2S і тонких плівок. Раманівська смуга, орієнтована приблизно на 220 cm^{-1} . Цей пік спостерігався при синьому (488 нм) або зеленому (514-532 нм) збудженні, тоді як при червоному збудженні (633 або 647 нм) спостерігали смугу на 200 cm^{-1} .

Таким чином, квантові точки Ag_2S , що синтезовані за допомогою рослинної матриці *L. maroccana* мають менший діаметр, максимум розподілу наночастинок за розмірами припадає на 5-10 нм, що є перевагою при їх подальших медико-біологічних застосуваннях. Результати Раманівської спектроскопії узгоджуються з літературним даними, отримані піки Раманівського розсіювання є типовими для наночастинок з люмінесценцією, зсунутою до блакитного діапазону.

1. Sadovnikov S. I., Kuznetsova Y. V., Rempel A. A. Ag_2S silver sulfide nanoparticles and colloidal solutions: Synthesis and properties // Nano-Structures & Nano-Objects. – 2016. – Vol.7. – P. 81–91.

2. Ma Y., Zhang Y., Yu W. Near infrared emitting quantum dots: synthesis, luminescence properties and applications // J. Mater. Chem. C. 2019. – Vol. – P. 13662–79.

РОЗРОБКА ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПАРАМЕТРІВ ДЛЯ СТВОРЕННЯ ЦЕЛЬЗІАН-СЛАВСОНІТОВОЇ КЕРАМІКИ

Волощук В.В.¹, Лісачук Г.В.¹, Кривобок Р.В.¹, Захаров А.В.¹, Чефранов Є.В.¹

¹ Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»,
valenty93vol@gmail.com

Створення радіопрозорих керамічних матеріалів з комплексом високих експлуатаційних характеристик та вдосконалення технологічних параметрів виготовлення деталей складних форм з різними розмірами в наш час є нагальною потребою сучасної авіаційної та ракетно-космічної промисловості. Авіаційна промисловість висуває жорсткі вимоги до керамічних матеріалів, для яких допуски з точки зору фізико-механічних та електрофізичних властивостей є дуже обмежені.

Недоліком радіопрозорих матеріалів на органічній основі є низька термостійкість (за максимальної температури експлуатації 400 – 500 °С не більше 2 – 3 хв.), а також значною зміною діелектричних властивостей із зростанням температури. Найбільш перспективним напрямком для створення радіопрозорих матеріалів є використання технічної кераміки, склокерамічних матеріалів і керамоматричних композитів. Основні властивості, що заслуговують уваги з точки зору виготовлення радіопрозорих керамічних матеріалів є сталість заданих показників діелектричної проникності та діелектричні втрати при температурі до 2000 °С, висока жаростійкість, термостійкість, зносостійкість, низька теплопровідність та відсутність окиснення.

Для розробки технологічних параметрів створення виробів з радіотехнічної кераміки розглядався метод лиття з водних суспензій у гіпсові форми, особливо на етапі формування зразків. На попередньому етапі досліджень було отримано склад керамічної маси на основі цельзіан-славсонітової фази, що входять до системи BaO – SrO – Al₂O₃ – SiO₂ та розроблено оптимальну інтенсифікуючу добавку для спікання заданої фази (Li₂O – 0,18; SnO – 0,59). В якості сировинних матеріалів в експерименті використовували кварц (оксид кремнію (IV) (чда)), глинозем марки Г - 00 (оксид алюмінію (чда)), карбонат барію (чда) та карбонат стронцію (чда).

Результати якісного рентгенофазового аналізу та електронної мікроскопії показали, що за температур випалу понад 1250 °С у всіх зразках присутня тільки фаза Ba_{0.25}Sr_{0.75}Al₂Si₂O₈, а структура зразків кераміки представлена барійстронцієвим анортитом є однорідною, без дефектів та тріщин.

Оптимальні технологічні параметри керамічних зразків визначали з використанням методу математичного планування (ПФЕ 2³), де змінними параметрами були: вміст розріджуючої добавки, час помелу та температура випалу зразків. Встановлено, що в досліджуваній області найкращих властивостей матеріал набуває при вмісті 0,1 мас. % добавки Dolarix PC 67, 30 хвилини помелу та за температури випалу 1350 °С. Створений матеріал характеризується наступними показниками: водопоглинання – 0,07 %, уявна щільність – 3,06 г/см³ та межа міцності при згині – 72,50 МПа, що задовольняє вимогам для створення цельзіан-славсонітової кераміки.

За результатами комплексних досліджень рекомендовано наступні технологічні параметри виробництва за двостадійною керамічною технологією: випал на стадії синтезу за температури 1200 °С з 2-годинною витримкою; помел продуктів синтезу в шаровому млині до забезпечення залишку на ситі № 0063 не більше 1% з додаванням 0,1 мас. % розріджуючої добавки Dolarix PC 67 та вологістю шлікера – 30 %. Лиття заготовок зі шлікера у гіпсові форми та випал виробів за температури 1350 °С з 2-годинною витримкою.

Подальші дослідження будуть направлені на вивчення діелектричних та радіофізичних властивостей виробів з цельзіан-славсонітової кераміки у діапазоні надвисоких частот.

ДОСЛІДЖЕННЯ ФІЗИКО-ХІМІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ НАНОКОМПОЗИТІВ З ОРНІДАЗОЛОМ НА ОСНОВІ НАТИВНОГО, АМІНОВАНОГО ТА МЕТИЛЬОВАНИХ КРЕМНЕЗЕМІВ

Гайдай А.Р.¹, Фуртат І.М.¹, Мурланова Т.В.¹, Вакулук П.В.¹, Козакевич Р.Б.², Дем'яненко Є.М.², Лобанов В.В.², Тьортих В.А.², Голуб О.А.¹

¹Національний університет «Києво-Могилянська академія», alina.gaidai@ukma.edu.ua

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

На сьогоднішній день адсорбційне модифікування кремнезему біологічно активними сполуками дозволяє покращувати фізико-хімічні властивості, необхідні для створення на його основі сучасних форм лікарських засобів [1]. Варіюючи ступінь покриття поверхні, можна змінювати кількість активних адсорбційних центрів на поверхні і, як наслідок, отримувати нанокompозити з контрольованою будовою адсорбційного шару [2]. Зокрема, введення в поверхневий шар аміногруп дозволяє синтезувати амінокремнеземи, які виявляють значну сорбційну здатність щодо йонів металів, органічних сполук, ферментів, білків, полімерних вуглеводнів, алкілароматичних амінів, анілінів, піролів, піридинів, тощо. Гідрофобізація поверхні внаслідок функціоналізації метильними групами покращує мембранотропні властивості високодисперсного кремнезему [2]. Разом з тим залишається нез'ясованим питання стосовно впливу прищеплених органічних груп на властивості отриманих на їхній основі нанокompозитів. Позаяк саме модифікація поверхні дозволяє одержати універсальні наноматеріали, які можна використовувати для створення лікарських засобів із широким спектром властивостей.

Як нативну матрицю (К) у роботі використовували пірогенний кремнезем (А-300 «Силлард П») виробництва Калуського дослідно-експериментального заводу МНТК «Хімія поверхні» з площею поверхні 300 м²/г (за низькотемпературною адсорбцією азоту методом BET). Для одержання амінокремнеземної матриці здійснювали реакцію поверхневих силанольних груп кремнезему з 3-амінопропілтриетоксисиланом за температури 110 °С протягом 2 год в толуолі з подальшим відмиванням толуолом та ацетоном для видалення нез'язаного силану. Одержання метильованих матриць проводили функціоналізацією кремнезему триметилсилільними групами обробкою гексаметилдисилазаном газофазно у реакторі з псевдорозрідженим шаром за температури 60 – 90 °С протягом 24 год. [3].

Нанокompозитні матеріали одержували методом імпрегнування нативної та функціоналізованих матриць розчином орнідазолу, таким чином, щоб кінцевий вміст активного компонента в сухих нанокompозитах складав 0,184 ммоль/г SiO₂, що є значно меншим за кількість здатних до адсорбції силанольних груп на поверхні кремнезему (0,8 ммоль/г SiO₂).

Ізотерми адсорбції орнідазолу нативним і функціоналізованими кремнеземами будували застосовуючи водний розчин орнідазолу з кінцевою концентрацією активної сполуки від 0,05 до 20 ммоль/л, що були меншими чи більшими за кількість здатних до адсорбції силанольних груп (0,8 ммоль/1 г SiO₂) [4]. У роботі застосовували таке співвідношення адсорбенту (*m*) і розчину адсорбату (*V*): маса нативного кремнезему/амінованого кремнезему 1 г, об'єм розчину 100 мл. Час експозиції адсорбенту та розчину адсорбату становив 24 години, за температури 20 °С, що достатньо для досягнення рівноваги.

Визначення кінетики десорбції орнідазолу з поверхні нанокompозитів здійснювали за статичних умов. Як середовище розчинення використовували дистильовану воду (*V* = 100 мл) за температури 37 °С, наважка нанокompозиту для десорбції складала 0,1 г (вміст орнідазолу 4 %, *m* орнідазолу на поверхні = 0,4 г), наважка орнідазолу для розчинення – 0,4 г). Кількісне визначення орнідазолу під час процесу десорбції здійснювали спектрофотометрично за довжини хвилі $\lambda = 314$ нм на спектрофотометрі VV-1200 (LABinstech, Китай).

Зважаючи на багатостадійність процесів десорбції для аналізу одержаних кінетичних кривих застосовували рівняння формальної кінетики, а також низку моделей, які прийнято використовувати для опису цих процесів.

В результаті модифікування поверхні матриці кількість прищеплених аміногруп на 1 г кремнезему становила 0,67 ммоль, кількість триметилсилільних груп – 0,24; 0,66 та 0,8 ммоль (ступінь заміщення 30, 83 та 100 % відповідно).

У наших попередніх дослідженнях з використанням квантово-хімічних розрахунків і методу ПЧ–спектроскопії було з'ясовано, що механізм взаємодії орнідазолу з нативним та функціоналізованими кремнеземами полягає в утворенні водневих зв'язків у випадку амінованих матриць, а також за рахунок гідрофобних взаємодій – у випадку з метильованими матрицями. Різниця у взаємодії впливає на вивільнення активної речовини з поверхні нанокompозитів. При цьому найвищий ступінь вивільнення активної речовини притаманний нанокompозитам, створеним на основі нативної, амінованої та частково метильованої (вміст $-CH_3$ груп на поверхні 30 %) матриць. У нанокompозитах створених на основі метильованих матриць з вищим вмістом функціональних груп (83 і 100 %), спостерігається зниження вивільнення активної речовини. Найменший ступінь вивільнення орнідазолу був зафіксований у композиту, створеного на основі 100 % метильованої матриці.

Аналіз ізотерм адсорбції орнідазолу нативним і амінованим кремнеземом, показав, що загальна адсорбція описується ізотермою S-типу в обох випадках, тобто взаємодія між адсорбованими молекулами переважає сили взаємодії між розчищеною речовиною та адсорбентом. На гідрофобних метильованих матрицях (не залежно від ступеня модифікування, тобто 30, 83 і 100 %) чіткої залежності між адсорбцією і концентрацією орнідазолу виявлено не було. Із застосуванням адсорбційних моделей Ленгмюра і Фрейндліха, з'ясовано, що ізотерми сорбції орнідазолу відповідають гетерогенній поверхні, активні центри якої характеризуються різними величинами енергії.

Оцінка біодоступності активної речовини засвідчила підвищення швидкості десорбції з поверхні нанокompозитів, порівняно зі швидкістю розчинення чистої лікарської форми орнідазолу. Це може бути пояснено зміною кристалічної структури орнідазолу в аморфну форму при нанесенні його на поверхню матриці, що також підтверджено даними рентгенофазового аналізу.

Дослідження стабільності одержаних композитів та швидкості вивільнення орнідазолу, підтвердили пролонгованість десорбції активної речовини у водний розчин з поверхні нанокompозитів отриманих на основі функціоналізованих матриць. Сповільнення швидкості вивільнення активної сполуки спостерігалось в ряді нанокompозитів на основі частково метильованої ($-CH_3$ груп 30 %), нативної, амінованої, 83% та 100% метильованої матриць. Таким чином, модифікування поверхні кремнезему метильними групами, підвищує її гідрофобізацію, тим самим подовжуючи ефект пролонгації. Це створює передумови подальших досліджень біологічних властивостей нанокompозитів, для підтвердження перспективності їхнього застосування для створення гібридних лікарських засобів у терапії ран різного генезу.

1. Kupiec K., Konieczka P., Namieśnik J. Characteristics, Chemical Modification Processes as well as the Application of Silica and its Modified Forms // Critical Reviews in Analytical Chemistry. – 2009. – Vol.39(2). – P.60-69.

2. Чуйко А.А. Медицинская химия и клиническое применение диоксида кремния. – К.: Наукова думка, 2003. – 415 с.

3. Kozakevch R.B., Bolbukh Y.M., Tertykh V.A. Silica carriers for controlled release of active compound // Surface. – 2008. – Vol.14. – P.325-331.

4. Gaidai A.R., Vakuliuk P.V., Furtat I.M. at all Preparation and properties of nanocomposites based on silica matrix modified with antimicrobial preparations // Voprosy khimii i khimicheskoi tekhnologii. – 2019. – No. 3. – P.6-16.

ФІЗИКО-ХІМІЧНЕ ОБГРУНТУВАННЯ ТА ТЕХНОЛОГІЯ ВИГОТОВЛЕННЯ НОВИХ ЛІКАРСЬКИХ ФОРМ НА ОСНОВІ НАНОРОЗМІРНОГО КРЕМНЕЗЕМУ

Геращенко І.І.¹, Степанюк К.О.², Ключков Д.Г.³

¹Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

²Вінницький національний медичний університет ім. М.І. Пирогова, katyunichka8@gmail.com

³ТОВ «Київфармгруп»

Лікування ран різного походження залишається актуальною проблемою в сучасній медицині. Населення розвинутих країн неухильно старішає, що супроводжується зростанням частоти хронічних гнійно-септичних уражень нижніх кінцівок, серед яких, зокрема, трофічні виразки і діабетична стопа. В країнах з тропічним кліматом гнійні рани різної локалізації зустрічаються також доволі часто. Місцеве застосування антибіотиків для лікування цієї патології не завжди дає бажаний результат, а іноді, навпаки, призводить до переходу ранового процесу у довготривалу хронічну фазу. Крім того, останнім часом спостерігається здатність мікроорганізмів утворювати на поверхні рани біоплівки, які практично не піддаються лікуванню тільки антибіотиками.

Одним із перспективних напрямів, який є альтернативою застосування мазей і розчинів з антимікробною дією, служить метод лікування за допомогою сорбційних препаратів. Як сорбент, який чи не найбільше підходить для цієї мети, розглядається високодисперсний (нанорозмірний) кремнезем, що здатний зв'язувати у рановому середовищі продукти деградації тканин, мікроорганізми і зайву рідину. Доведено, що основними лікувальними чинниками нанокремнезему у разі місцевого застосування є високий показник адсорбції білка, гідрофільність і осмотична активність; безпосереднього антимікробного ефекту в нього немає [1].

На основі цієї субстанції нами створено гідрофільно-гідрофобну сорбційну композицію у вигляді порошку для застосування у першій, ексудативній фазі ранового процесу і гелевидну суспензію для застосування у другій фазі. До складу гідрофільно-гідрофобної композиції, яка отримала назву «Пателен[®]», входять 1) нанорозмірний кремнезем (аеросил марки А-300); 2) аеросил марки R972 Pharma або поліметилсилоксан (ПМС) і 3) катіонна поверхнево-активна речовина (КПАР) бензалконію хлорид або декаметоксин [2, 3]. Гелевидна форма представляє собою суспензію А-300, виготовлену на розчині склоподібного тіла з очей великої рогатої худоби або гіалуронату натрію з додаванням сульфату цинку.

Для виготовлення нанокомпозиції «Пателен[®]» опрацьовано лабораторну і заводську технології, що складаються з таких стадій: 1) термічна обробка А-300 при 180 °С задля його дегазації та стерилізації; 2) механохімічна іммобілізація КПАР на поверхні гідрофобного компонента у кульовому млині з метою його часткової гідрофілізації та ущільнення; 3) перемішування у міксері напівпродуктів, одержаних на стадіях 1 і 2 – одержання готового продукту. Моніторинг фізико-хімічних показників напівпродуктів і контроль якості готового продукту здійснювали методами термічного аналізу (ТГ/ДТГ/ДТА), ІЧ спектроскопії, вимірюванням насипної густини та білоксорбційної активності, мікробіологічними дослідженнями. Методом низькотемпературної ¹Н ЯМР спектроскопії досліджували стан води на міжфазних границях гідрофільного і гідрофобного компонентів. Так, зокрема, показано, що насипна густина готового продукту має бути в діапазоні 55–65 г/л, а білоксорбційна активність щодо желатини – не менше 140 мг/г. Енергія зв'язування води гідрофобним ПМС майже удвічі більше за цей показник для гідрофільного А-300, що зумовлено насамперед морфологією міжчастинкового простору: середній радіус заповнених водою пор для ПМС становить лише 4 нм, а для А-300 – 10 нм. Додавання до ПМС 2 мас. % декаметоксину призводить до певного зниження міжфазної енергії води. У 1 г препарату відсутні мікроорганізми *Staphylococcus aureus* і *Pseudomonas aeruginosa*, а вміст непатогенної аеробної мікрофлори і грибів відповідає фармакопейним вимогам щодо препаратів даної групи (нестерильні засоби для місцевого застосування).

Для обґрунтування складу гелевидної суспензії, яку готували лабораторним способом, було досліджено парні взаємодії між її компонентами, а саме: 1) адсорбцію білка і гіалуронової кислоти на А-300; 2) адсорбцію цинку (II) на А-300; 3) комплексоутворення цинку (II) з білком і гіалуроновою кислотою. Для виявлення закономірностей окрім А-300 і цинку (II) в дослідженнях було задіяно оксид алюмінію, ряд кремній- та алюмінійвмісних матеріалів; мідь (II). Для дослідження застосовували метод побудови ізотерми адсорбції, методи спектрофотометричного титрування та динамічного розсіювання світла (ДРС). Питому поверхню матеріалів визначали методом теплової десорбції аргону.

Експериментальні дані з адсорбції цинку (II) доповнювали результатами квантово-хімічного моделювання. Встановлено, що аеросил марки А-300 виявляє високу адсорбційну здатність щодо білка, але не адсорбує гіалуронову кислоту. Адсорбційна активність кремній- та алюмінійвмісних матеріалів щодо цинку (II) і міді (II) спадає в ряду: цеоліт NaX > цеоліт NaA-ТК-1173 > смектит > амінопропілаеросил > силікагель KG-60 > силікагель KG-40 > Syloid® 244 FP > ПМС > А-300 > каолін > ентеросгель, який в цілому відображає перехід структури від мікро- до мезо-, макро- і непористої та зменшення катіонообмінних властивостей матеріалу. Оксид алюмінію, поверхня якого в нейтральному розчині заряджена позитивно, катіонів Zn^{2+} і Cu^{2+} не адсорбує.

Квантово-хімічні розрахунки показали, що адсорбція цинку (II) на алюмосилікатних поверхнях характеризується вищою, порівняно з кремнеземною поверхнею, енергією взаємодії. Визначено найбільш імовірні місця взаємодії гідратованих йонів цинку з гідроксильною групою поверхні кремнезему та алюмокремнезему. Методом спектрофотометричного титрування встановлено, що йони цинку у водному розчині при рН 8–9 утворюють комплекси з макромолекулярними компонентами склоподібного тіла. Константа рівноваги процесу комплексоутворення, представлена як концентрація Zn^{2+} у розчині, за якій ступінь зв'язування дорівнює 50 %, становить ~ 4 ммоль/л; для модельного білка – бичачого сироваткового альбуміну (БСА) – аналогічний процес відбувається з константою рівноваги ~ 1.3 ммоль/л. Взаємодію гіалуронату натрію з йонами цинку даним методом виявити не вдалось. За допомогою методу ДРС визначено розмірні характеристики агрегатів, що утворюються внаслідок взаємодії склоподібного тіла і БСА з йонами цинку. Методом молярних відношень встановлено стехіометрію комплексів БСА з йонами Zn^{2+} та Cu^{2+} .

Висновки. В результаті фізико-хімічних та фармако-технологічних досліджень обґрунтовано склад та опрацьовано оптимальну технологію виготовлення нових лікарських засобів на основі нанорозмірного кремнезему, призначених для лікування ран – гідрофільно-гідрофобної сорбційної композиції у вигляді порошку і гелевидної суспензії.

1. Чуйко А.А. Медицинская химия и клиническое применение диоксида кремния. – К.: Наукова думка, 2003. – 416 с.

2. Геращенко І.І., Чепляка О.М., Вільцанюк О.А., Бурковський М.І., Желіба М.Д. Препарат для лікування ран. Патент на корисну модель № 33629, опубл. 10.07.08., Бюл. №13.

3. Gerashchenko I. and Chepliaka O. Hydrophilic/hydrophobic pharmaceutical composition and method of its production and use. Eur. Patent PCT/EP2019/052021.

МАГНІТНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАНОЧАСТИНОК ГАДОЛІНІЙ ІТРІЄВИХ ФЕРОГРАНАТІВ

Горбик П.П., Дубровін І.В., Абрамов М.В.

Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, dilvua@gmail.com

Ферити привертають увагу дослідників мікрохвильового випромінювання через їх можливе використання в мікросхемах із зниженою напругою і як поглиначів електромагнітного випромінювання. Проникнення електромагнітних хвиль можливо в феритах через їх непровідну природу. Метали обмежені в цьому відношенні через скін-ефект. Через низькі втрати на вихрові струми ферити вважаються найкращим матеріалом для різних електронних застосувань. Дослідження залізо-ітрієвого гранату стає все більш важливим через властивості, які можуть широко використовуватися в оптичних комунікаціях, магнітооптичних пристроях і в мікрохвильових печах. Ітрієвий гранат є найбільш представницькою і відомою сполукою серед гранатів. Відомо, що різні намагніченості можуть бути досягнуті шляхом заміни ітрію йонами рідкоземельних елементів.

Феромагнетики такого складу, що мають магнітні властивості, використовується в медицині як контрастної речовини при виконанні магнітно-резонансних досліджень, що дозволяє плавно змінювати контрастність МРТ зображення. Дослідження, які представлено у даній роботі, були спрямовані для розуміння ролі заміни йонів ітрію на йони рідкоземельного металу гадолінію та на визначення магнітних властивостей ітрії-гадолінію гранату - вивченню магнітної поведінки ітрії-гадолінієвого гранату шляхом вимірювання залежності намагніченості його частинок від морфології, розміру і хімічного складу.

Недавній прогрес в технології синтезу ітрії-гадолінієвого гранату $Y_3Fe_5O_{12}$ дозволяє отримувати висококристалічні частинки в нанометровому діапазоні. Процес наносинтезу також дозволяє дуже добре контролювати розмір частинок наноматеріалу. Наночастинки, зазвичай, мають велике відношення поверхні до об'єму в порівнянні з об'ємним матеріалом. Спостерігалось, що наночастинки ітрії-гадолінієвого гранату демонструють унікальну магнітну поведінку через анізотропію та спіновий безлад у поверхні, а також через великі відносини поверхні до об'єму. Для отримання нанотруктур ітрії-гадолінієвого гранату було використано золь-гель метод синтезу.

Дегідратацією спільно осаджених гідроксидів ітрію, гадолінію і заліза з подальшим термічним відпалом на повітрі отримано нанокристали твердих розчинів складу $(Y_{1-x}Gd_x)_3Fe_5O_{12}$, де $x = 0 \div 0,2$. Показано, що після відпалу зразків при 1000 °С утворюються нанокристали ітрії-гадолінієвого фериту зі структурою гранату розміром $\sim 30 \sim 50$ нм. Встановлено, що зменшення розміру частинок нанопорошків призводить до зменшення їх намагніченості насичення.

Користуючись тим, що магнітні властивості зразків, наприклад σ_s , поступово змінюються в залежності від складу, існує можливість виготовлення матеріалу з необхідними магнітними властивостями.

Високі для наночастинок значення питомої намагніченості насичення дають можливість застосування цих матеріалів в медицині як магнітного носія лікарських препаратів або для використання при магнітній гіпертермії. Мікрохвильові властивості поглинання електромагнітного випромінювання роблять цей матеріал сильним кандидатом для застосування в мікрохвильових пристроях.

АДСОРБЦІЯ ЖЕЛАТИНУ НА ПОВЕРХНІ НАНОРОЗМІРНИХ ОКСИДІВ: ВИХІДНИХ ТА ПІСЛЯ ГІДРО/ТЕРМООБРОБКИ

Гузенко Н.В.¹, Кравченко А.А.¹

¹ Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка Національної академії наук України,
guznataliia@gmail.com

Висодисперсні пірогенні оксиди завдяки їх унікальним властивостям є дуже перспективними для створення різноманітних матеріалів із заданими властивостями та широко використовується як наповнювачі, загусники, сорбенти у медицині та ін. Тому дослідження їх властивостей при створенні нових композитних матеріалів є дуже актуальними. В роботі було досліджено вплив природи поверхні високодисперсних оксидів, а саме кремнезему Біосил ($S_{\text{ВЕТ}} = 295 \text{ м}^2/\text{г}$), пірогенного оксиду алюмінію ($S_{\text{ВЕТ}} = 89 \text{ м}^2/\text{г}$), змішаного алюмо-титано-кремнезему AST-1 ($S_{\text{ВЕТ}} = 99 \text{ м}^2/\text{г}$) та кремнезему Асил 60 ($81 \text{ м}^2/\text{г}$), а також вплив гідро/термообробки цих оксидів на їх здатність сорбувати макромолекули білків (на прикладі желатини Merck).

Показано, що у всіх випадках ізотерми адсорбції білку добре описується рівнянням Ленгмюра. Величина максимальної адсорбції A_{max} для вихідного кремнезему Біосил, в випадку адсорбції з водного розчину, дорівнює близько 360 мг/г. Таки значення адсорбції, можуть бути пов'язані з тим, що макромолекули желатину містять основні амінокислоти аргінін Arg та лізін Lys, які заряджені позитивно при нейтральному рН та є необхідними для встановлення електростатичних взаємодій з електронегативною поверхнею кремнезем. Крім того, адсорбція желатину може відбуватися шляхом утворення чисельних водневих зв'язків між активними функціональними групами білку, а саме електронодонорними карбонільними групами, та наявними на поверхні гідроксильними (силанольними) групами [1, 2]. Оксид алюмінію за величиною адсорбції желатину дещо поступається кремнезему ($A_{\text{max}} = 251 \text{ мг/г}$). Отримані дані можуть означати, що в умовах експерименту (при рН суспензій близьких до рН ізоелектричної точки желатину) зміна адсорбційних центрів (природа) поверхні з кислотних на основні здійснює незначний вплив на адсорбцію білку. Пояснення цьому може бути в тому, що молекула білку в достатній кількості містить глютамінову амінокислоту (яка буде заряджена негативно при нейтральному рН), та може приймати участь у електростатичних взаємодіях з позитивно зарядженою поверхнею Al_2O_3 . Крім того, як і в випадку з кремнеземом, адсорбція на нанорозмірному оксиді алюмінію може відбуватися за рахунок утворення чисельних водневих зв'язків.

Зменшення адсорбційної здатності щодо желатину на поверхні оксиду алюмінію може бути пояснено меншою величиною питомої поверхні Al_2O_3 , що був використаний у роботі, у порівнянні з кремнеземом Біосил. Це припущення було перевірене на кремнеземі Асил 60 та на змішаному алюмо-титано-кремнеземі AST-1, величини питомої поверхні яких близькі до $S_{\text{ВЕТ}}$ оксиду алюмінію. В випадку кремнезему Асил 60 та змішаного оксиду AST 1 хід ізотерм та величини максимальної адсорбції желатину ($A_{\text{max}} = 264$ та 219 мг/г відповідно) близькі до адсорбції на Al_2O_3 . Цікаво, що у перерахунку на 1 м^2 , адсорбція білку на поверхні нанооксидах алюмінію, кремнеземі Асил 60 та алюмо-титано-кремнеземі AST-1 (2,8, 3,2 та $2,2 \text{ мг/м}^2$ відповідно) виявляється навіть вищою у порівнянні з кремнеземом Біосил ($1,2 \text{ мг/м}^2$). Це може бути пов'язане з формуванням більш пухкого адсорбційного шару на оксидах з меншою величиною питомої поверхні в наслідок утворення більшої кількості хвостів і петель макромолекули адсорбату.

Аналогічні залежності для різних оксидів спостерігаються і у випадку адсорбції желатину з суспензій, виготовлених на 0,9% розчині NaCl (рис.). При цьому, для кремнезему Біосил спостерігається незначне підвищення адсорбції желатини, а для інших оксидів і оксидних систем – зменшення величини максимальної адсорбції білку, порівняно з адсорбцією з води. Одержані значення можуть бути пов'язані з формуванням більш щільних адсорбційних шарів макромолекул білку.

Очевидно, що в ході використання в медицині, косметології та інше вихідні активні компоненти композитів зазнають попередньої обробки, так, наприклад: вихідні нанорозмірні оксиди піддаються обробці водою; тому дуже важливим є питання, як при цьому можуть змінюватися їх властивості. Для перевірки цього готували 10%-ні водні суспензії високодисперсних оксидів і висушували їх в сушильній шафі при 70 °С до повного висихання. Виявлено, що після такої обробки для всіх досліджуваних зразків спостерігається значне зниження білоксорбуючої активності та зміна характеру адсорбції білку. Так, білоксорбуюча активність нанокремнезему Біосил після змочування водою і наступного висушування знижується більш ніж у 2 рази ($A_{\max} = 157$ мг/г) (рис.). Значне зменшення адсорбції желатину з води або з 0,9% розчину NaCl спостерігається також для зразків нанооксиду алюмінію та суміші SiO_2 та Al_2O_3 . При цьому, характерного впливу фізіологічного середовища не спостерігалось. Показано, що, в даному випадку, ізотерми адсорбції желатину не описуються рівнянням Ленгмюра, яке характеризує мономолекулярну адсорбцію адсорбату на поверхні, і не виходять на насичення, що характерно для адсорбції макромолекул білків на непористих сорбентах. Цікаво, що для молекул аргону вся вихідна поверхня нанооксидів після проведеної гідро/термообробки залишається цілком доступною: так питома поверхня вихідного і змоченого/висушеного кремнезему, яку вимірювали за адсорбцією аргону, майже однакові (близько 300 м²/г). Явище, що спостерігається, може свідчити про утворення деякої поруватої структури адсорбентів у процесі проведеної обробки і недоступністю для макромолекул желатину значної частини поверхні первинних частинок нанооксидів. Ймовірно, що після гідро/термообробки може відбуватися зростання первинних частинок нанооксидів в містах їх контакту (можливо за рахунок утворення додаткових водневих або ж силосанових зв'язків). Таким чином, між первинними частками утворюються зазори і пустоти (пори), які здебільшого є цілком доступними для малих молекул, проте недоступні для макромолекул білку.

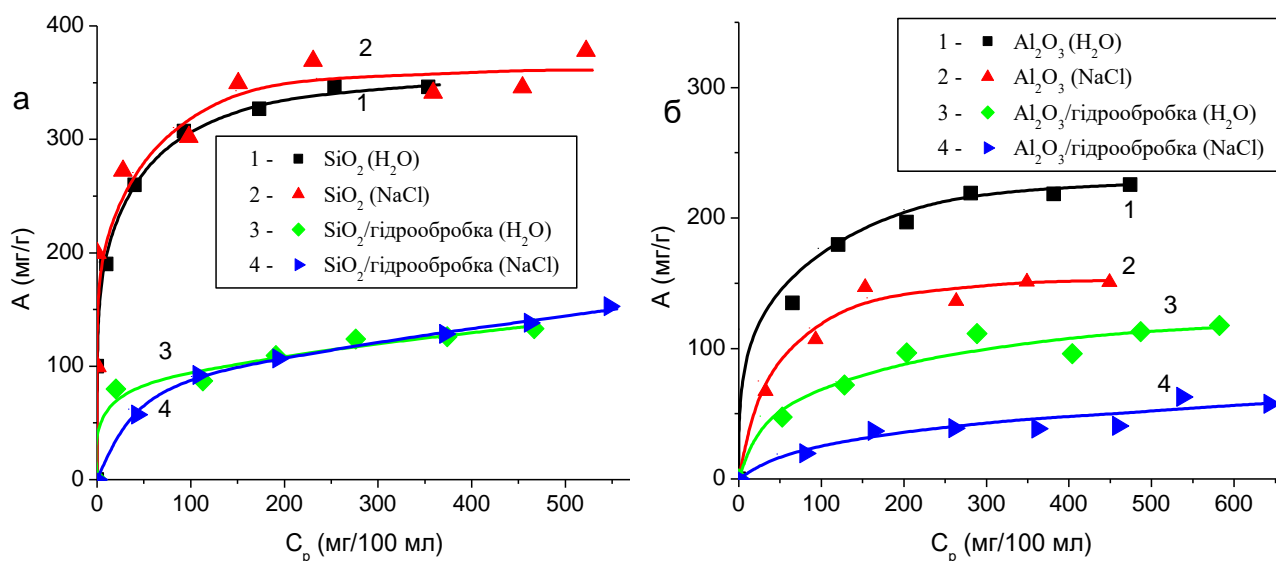


Рис. Ізотерми адсорбції желатину на поверхні кремнезему Біосил (а) та оксиду алюмінію (б): вихідних з води (1) та з 0,9%-ого розчину NaCl (2) та після гідро/термообробки з води (3) та з 0,9%-ого розчину NaCl (4)

1. Vasilenko A. P., Guzenko N. V., Voronin E.F. Adsorption Equilibriums in a Silica-Poly(vinyl alcohol)-Gelatin System // Colloid Journal. – 2009. – 71, No. 6. – P. 735-739.

2. Василенко А. П., Гузенко Н. В., Носач Л. В., Воронин Е. Ф. Влияние модифицирования высокодисперсного кремнезёма поливинилпирролидоном на адсорбцию желатина // Хим.-фарм. журн. – 2010. – 44, № 2. – С. 33-36.

ВПЛИВ ТИПУ НАНОНАПОВНЮВАЧА НА ТЕПЛОФІЗИЧНІ ТА ТЕРМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ТЕРМОСТІЙКИХ ПОЛІМЕРНИХ НАНОКОМПОЗИТІВ НА ОСНОВІ БІСФТАЛОНІТРИЛУ

Гусакова К.Г., Мельничук О.Г., Григор'єва О.П., Старостенко О.М., Файнлейб О.М.

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України, polymernano@ukr.net

Натепер для високотехнологічних галузей промисловості актуальним є створення нових полімерних зв'язуючих із робочою температурою 360-400°C. Одним зі шляхів підвищення термостійкості є наповнення полімерної матриці нанонаповнювачами різної природи та хімічної будови. Високі термічна та хімічна стійкість фталонітрильних полімерних матриць відкривають широкі перспективи для створення на їхній основі нових термо- та хімічно стійких зв'язуючих та наноконкомпозитів для застосування у різних галузях промисловості та техніці, що працює за екстремальних умов.

У даній роботі для підвищення термо- та теплостійкості зв'язуючого, розробленого на основі фталонітрильних термосетів, використовували хімічно модифіковані нанорозмірні наповнювачі з аміно- або епоксидними групами на їхній поверхні. Метою роботи було встановлення впливу типу та вмісту модифікованого нанонаповнювача на теплофізичні властивості і термостійкість наноконкомпозитів на основі фталонітрильного зв'язуючого.

Вихідними компонентами для створення матриці зв'язуючих та наноконкомпозитів були: терморективний фталонітрильний мономер – 2,2-біс[4-(3,4-диціано-феноксифеніл)пропан (бісфталонітрил бісфенолу А, далі БФН), епокситрифенольна смола марки ЕТФ-40 (далі ЕТФ) та лінійний полісульфон (далі ПСФ). Співвідношення компонентів у синтезованих зразках зв'язуючого складало БФН/ЕТФ/ПСФ $\approx 56/38/6$ (мас.%). Як наповнювачі використали мікрочастинки силікатного модифікованого аміногрупами монтморилоніту марки Nanomer I.30E (компанія Nanosor Inc., США, далі аміно-ММТ), який є представником глинистих силікатних мінералів загальної формули $M_x(Al_{4-x}Mg_x)Si_8O_{20}(OH)_4$, активними поверхневими центрами аміно-монтморилоніту є групи NH_2 , вміст аміно-ММТ у матриці був $c = 0,5$ мас. %. У ролі другого наповнювача використали нанорозмірний епоксидциклогексил поліедральний олігомерний сілсесквіоксан (компанія Hybrid Plastics Inc., США, далі ЕЦГ-ПОСС), середній розмір наночастинок був 2-3 нм, кожна наночастинка мала активні поверхневі центри – 8 епоксидних груп, вміст ЕЦГ-ПОСС у матриці був $c = 0,025$ мас. %. Структурні формули основних хімічних компонентів, використаних при синтезі зразків, наведено в табл.1.

Синтез зразків зв'язуючого та наноконкомпозитів проводили при нагріванні суміші вихідних компонентів у певному співвідношенні шляхом поступового підняття температури від 240 °С до 300 °С. У результаті цього формуються так звані напів-взаємопроникні полімерні сітки (напів-ВПС), в яких відбувається взаємопроникнення фрагментів макромолекулярних ланцюгів лінійного ПСФ та складових кополімерної БФН/ЕТФ сітки. У синтезованих наноконкомпозитах, фрагменти макромолекулярних ланцюгів лінійного ПСФ взаємопроникні з гібридною сіткою складу БФН/ЕТФ/нанонаповнювач. Лінійний ПСФ також може хімічно реагувати з компонентами системи, але лише за кінцевими фенольними групами.

Дослідження теплофізичних властивостей синтезованих зразків проводили методом диференційної сканувальної калориметрії (ДСК) за допомогою калориметра “TA Instruments 2920 MDSC” в інертній атмосфері та швидкості нагрівання зразків 20 °С/хв. Термостійкість отриманих зразків визначали методом термогравіметричного аналізу (ТГА) з використанням “TA Instruments TGA Q50” шляхом лінійного нагрівання зразків в інертній атмосфері або в атмосфері повітря зі швидкістю 20 °С/хв.

Методом ДСК було встановлено (рис. 1), що всі досліджені зразки є аморфними та характеризуються наявністю двох ендотермічних переходів у високотемпературній області ($T > 300^\circ\text{C}$), які відповідають високим значенням температур склування ($T_{\text{ск}}$) даних зразків:

Таблиця 1

Структурні формули основних хімічних компонентів, використаних при синтезі зразків

Назва	Структурна формула
2,2-біс[4-(3,4-диціано феноксифеніл)пропан (бісфталонітрил бісфенолу А) (БФН)]	
Тригліцидиловий етер 1,1,2-трис (4-оксифеніл)-етану резорцину, епоксидна смола марки ЕТФ40 (ЕТФ)	
Полісульфон (ПСФ)	
Амінофункціоналізований монтморилоніт марки Nanomer I.30E, (аміно-ММТ)	$\text{H}_2\text{N}-\text{CH}_2-\left[\text{CH}_2\right]_{16}-\text{CH}_3$ Наночар монтморилоніту
Епоксидциклогексил поліедральний сілсеквіоксан олігомерний (ЕЦГ-ПОСС)	

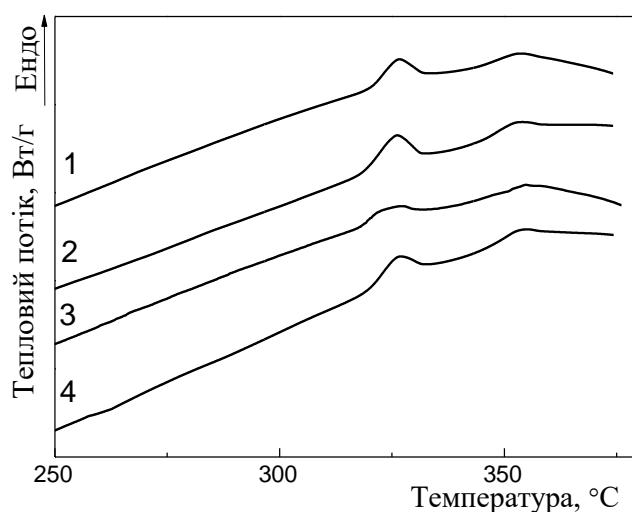


Рис. 1 ДСК термограми зразків зв'язуючого складу БФН/ЕТФ/ПСФ та створених на його основі наноккомпозитів, що містять нанонаповнювачі аміно-ММТ/ЕЦГ-ПОСС, мас. %: 1 – 0/0; 2 – 0.5/0; 3 – 0/0.025; 4 – 0.5/0.025

$T_{ск1} \sim 320-323^\circ\text{C}$ та $T_{ск2} \sim 349-352^\circ\text{C}$. Ми вважаємо, що в даних зразках перший ендотермічний перехід в області температур $T \approx 320-335^\circ\text{C}$ відповідає процесам розкладування кінетичних сегментів макромолекул ЕТФ та БФН у складі гібридної БФН/ЕТФ сітки, в той час, як другий ендотермічний перехід в області температур $T \approx 340-360^\circ\text{C}$ відповідає процесам розкладування кінетичних сегментів макромолекул БФН та ПСФ у сформованій БФН/ЕТФ/ПСФ матриці. Високі значення $T_{ск}$ підтверджують високу щільність (тобто густоту зшивання) сформованої БФН/ЕТФ/ПСФ матриці. Визначено, що введення аміно-ММТ та/або ЕЦГ-ПОСС суттєво не змінює теплофізичні характеристики зразків синтезованих наноконкомпозитів.

Методом ТГА досліджено стійкість до термічної (в інертній атмосфері) та термоокиснювальної (в атмосфері повітря) деструкції зразків вихідного зв'язуючого БФН/ЕТФ/ПСФ та наноконкомпозитів на його основі (рис. 2 а і б, відповідно), основні термічні характеристики наведено у табл. 2 і 3.

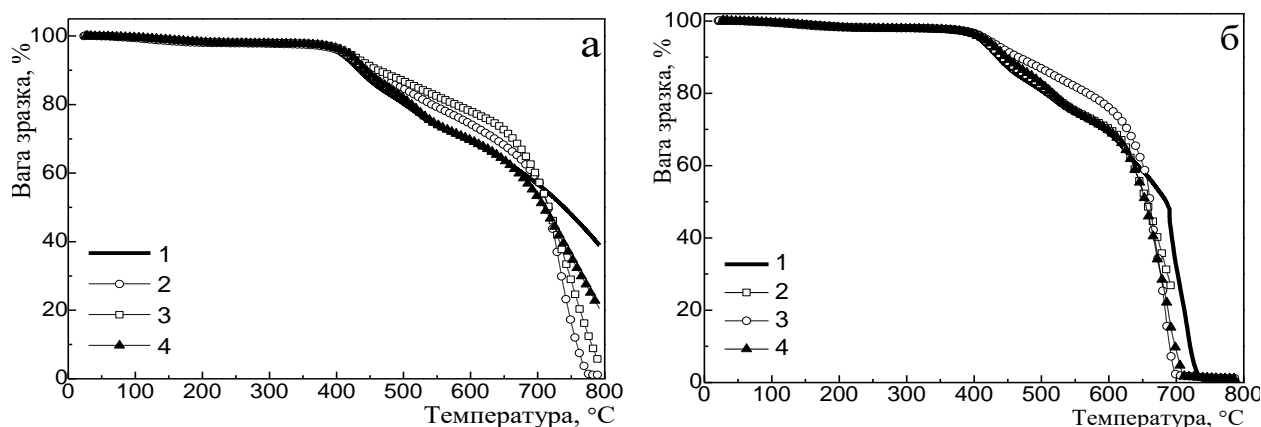


Рис. 2 ТГА термограми в атмосфері азоту (а) та в атмосфері повітря (б) зразків зв'язуючого складу БФН/ЕТФ/ПСФ та створених на його основі наноконкомпозитів, що містять нанонаповнювачі аміно-ММТ/ЕЦГ-ПОСС, мас. %: 1 – 0/0; 2 – 0.5/0; 3 – 0/0.025; 4 – 0.5/0.025

Таблиця 2

ТГА дані (в атмосфері азоту) для зразків зв'язуючого та наноконкомпозитів

Аміно-ММТ/ ЕЦГ-ПОСС, мас. %	$T_{d \text{ onset}}$	$T_{d5\%}$	$T_{d10\%}$	$T_{d20\%}$	Температура максимальної швидкості деструкції на стадії, $T_{d \text{ max}}$			Коксовий залишок (при 750°C), %
					I	II	III	
0/0	392	404	430	501	428	519	-	48
0.5/0	397	410	452	539	432	521	732	15
0/0.025	397	416	461	584	430	515	748	24
0.5/0.025	402	417	445	510	433	523	739	34

Встановлено, що зразки ненаповненого зв'язуючого БФН/ЕТФ/ПСФ мають високу стійкість до термічної деструкції і характеризуються двома основними стадіями, де відбувається термодеструкція ЕТФ ($T_{d \max 1}$), та БФН і ПСФ ($T_{d \max 2}$) із полімерної матриці (рис. 2, табл. 2). При введенні нанонаповнювачів аміно-ММТ та/або ЕЦГ-ПОСС спостерігається зсув основних температурних показників у більш високотемпературну область, поява додаткової стадії термічного розкладу з максимумом при $T_{d \max 3} = 732-748^\circ\text{C}$ (табл. 2). Все це свідчить про те, що вбудовування нанонаповнювачів до структури БФН/ЕТФ/ПСФ матриці, що формується, певним чином підвищує стійкість нанокompatитів до термічної деструкції. Визначено також, що найбільший ефект на термічні властивості зразків синтезованих нанокompatитів спостерігається при введенні ЕЦГ-ПОСС, у той час, як у нанокompatиті, де присутня суміш нанонаповнювачів (аміно-ММТ/ЕЦГ-ПОСС), синергічний ефект фіксується лише на початковому етапі термодеструкції зразка (до $\sim 440^\circ\text{C}$).

Таблиця 3

ТГА дані (в атмосфері повітря) для зразків зв'язуючого та нанокompatитів

Аміно-ММТ/ ЕЦГ-ПОСС, мас.%	$T_{d \text{ onset}}$	$T_{d5\%}$	$T_{d10\%}$	$T_{d20\%}$	Температура максимальної швидкості деструкції на стадії, $T_{d \max}$				Коксовий залишок (при 690°C), %
					I	II	III	IV	
0/0	396	409	436	506	431	629	692	715	32
0.5/0	396	416	443	513	425	520	636	671	27
0/0.025	397	420	467	570	435	515	661	682	8
0.5/0.025	398	417	446	514	436	514	669	689	18

Результати досліджень стійкості всіх синтезованих зразків до термоокиснювальної деструкції (рис. 3, табл. 3) також свідчать про позитивний вплив нанонаповнювачів на термічні властивості створених нанокompatитів, оскільки всі основні термічні характеристики даних нанокompatитів значною мірою підвищуються порівняно з БФН/ЕТФ/ПСФ матрицею.

Таким чином, можна зробити висновок, що синтезовані зразки зв'язуючого складу БФН/ЕТФ/ПСФ та нанокompatити на їхній основі відносяться до класу термостійких полімерів, оскільки характеризуються високою стійкістю до термічної та термоокиснювальної деструкції, мають високі значення температур склування, при цьому введення нанонаповнювачів (аміно-ММТ, ЕЦГ-ПОСС або суміші ММТ/ЕЦГ-ПОСС) сприяє додатковому підвищенню термічних характеристик створених нанокompatитів складу БФН/ЕТФ/ПСФ/нанонаповнювач.

СОРБЦІЙНЕ ВИЛУЧЕННЯ Cr(III), Mn(II), Cd(II), Pb(II) ТА Cu(II) ІОНІВ З ВОДНИХ РОЗЧИНІВ ЗА ДОПОМОГОЮ N-ВМІСНИХ ПОЛІФУНКЦІОНАЛЬНИХ ВПОРЯДКОВАНИХ КРЕМНЕЗЕМІВ

Кобилінська Н.¹, Дударко О.²

¹ Інститут колоїдної хімії та хімії води ім. А.В. Думанського

² Інститут хімії поверхні ім. О.О.Чуйко НАН України, odudarko80@gmail.com

Зростання рівня важких металів у навколишньому середовищі становить серйозну загрозу для здоров'я людей, живих організмів та екологічних систем. Основними джерелами потрапляння важких металів у навколишнє середовище є промислові відходи. Важкі метали накопичуються у мікроорганізмах, водних об'єктах та ґрунті, рослинах, потрапляють потім в їжу домашніх тварин, а по природному харчовому ланцюжку – в організм людини. Загалом токсична дія важких металів пов'язана з їх впливом на обмін речовин живих організмів, в т.ч. тварин та людини, призводить до зміни системи кровотворення, внутрішньої секреції; сприяє виникненню злоякісних новоутворень і порушення апарату спадковості [1, 2]. Сполуки накопичуються в живих істотах кожного разу, коли вони потрапляють в організм і зберігаються довше, аніж розкладаються (метаболізуються) або виводяться з організму [3, 4]. Одночасна присутність кількох важких металів у воді часто призводить до посилення токсичних проявів на біологічні об'єкти. В той же час для важких металів не існує надійних механізмів самоочищення. Залежно від складу забруднювачів і їх концентрації в стічних водах застосовують різні методи очищення, такі як, реагентні, іонообмінні, електрохімічні, електродіалізні, ультрафільтраційні, зворотний осмос, термічні, адсорбційні і т.д. Серед широкого спектру відомих методів очистки від іонів важких металів, найбільш широко використовуваним є адсорбція, завдяки простоті та економічній вигоді.

Значний потенціал в екстракції та адсорбції катіонів важких металів з водних розчинів становлять N-вмісні кремнеземні матеріали. Серед кремнеземних носіїв, SBA-15 має унікальні паралельні циліндричні пори з гексагональною упорядкованістю та високою питомою поверхнею, що сприяє ефективному масообміну для швидкого встановлення адсорбційної рівноваги. Поєднання N-вмісних функціональних груп з різним механізмом взаємодії на поверхні адсорбенту може змінити ділянки зв'язування іонів металів, що значно посилить їх вилучення з водних розчинів у ширшому діапазоні рН.

У даній роботі, для поліпшення селективності при сорбційному вилученні іонів Cr (III), Mn (II), Pb (II), Cd (II) та Cu (II) з водних розчинів, запропонована нова технологія одержання N-вмісних поліфункціональних матеріалів на основі SBA-15. Синтезовано мезопористі монофункціональні матеріали, що містять у поверхневому шарі похідні N-пропіл етилендіамінтриоцтової кислоти (SBA-ЕДТА), а також біфункціональні - на внутрішній та зовнішній поверхні яких, окрім комплексоутворюючих ЕДТА груп, містяться також амінопропільні групи (SBA-ЕДТА/NH₂) [5]. Адсорбційне вилучення катіонних форм важких металів на синтезованих зразках оптимізували шляхом дослідження впливу рН, часу контакту фаз та початкової концентрації аналіту, побудови ізотерм адсорбції, тощо. Контроль вмісту іонів металів в розчині до та після сорбції проводили за допомогою атомно-абсорбційної спектроскопії.

Одержані матеріали характеризуються мезопористою впорядкованою структурою та розвиненою площею поверхні (700-745 м²/г) згідно з результатами низько-температурної адсорбції/десорбції азоту. Вміст функціональних груп варіюється від 0,11 до 0,95 ммоль/г. Результати дослідження показали, що монофункціональний адсорбент характеризується високими максимальними адсорбційними ємностями при рН=6 щодо іонів важких металів ($q_{\text{екс}}$) (Таблиця 1). Аналіз ізотерм адсорбції показав, що біфункціональні адсорбенти мають більшу спорідненість до іонів важких металів, ніж монофункціональні. Ізотерми адсорбції іонів металів краще лінеаризуються в координатах моделі Ленгмюра, що свідчить про мономолекулярну адсорбцію аналітів на поверхні одержаних мезопористих адсорбентів (Таблиця 1).

Таблиця 1

Результати розрахунків параметрів ізотерм адсорбції іонів металів за моделями Ленгмюра та Френдліха на мезопористих зразках.

Ions	q _{екс} (мг г ⁻¹)	Ізотерма Ленгмюра			Ізотерма Френдліха		
		q _m (мг г ⁻¹)	K _L (л мкг ⁻¹)	R ²	K _F (мг ^{1-1/n} л ^{1/n} ·г ⁻¹)	n	R ²
<i>SBA-ЕДТА/NH₂</i>							
Cd(II)	59.1	60.98	0.10	0.9988	35.76	10.99	0.9968
Pb(II)	103.5	107.53	0.07	0.9997	34.54	4.97	0.9337
Mn(II)	36.1	37.74	0.10	0.9981	14.16	5.51	0.9707
Cr(III)	40.2	43.86	0.03	0.9827	10.72	4.24	0.9522
<i>SBA-ЕДТА</i>							
Cd(II)	111.2	112.36	0.11	0.9975	17.93	2.67	0.7045
Pb(II)	185.6	188.68	0.24	0.9997	54.43	3.56	0.6903
Mn(II)	49.4	50.00	0.13	0.9977	8.37	2.78	0.7082
Cr(III)	57.7	60.98	0.09	0.9976	7.51	2.24	0.7980

Ефективність вилучення іонів важких металів за допомогою отриманих N-вмісних мезопористих кремнеземів становить близько 96-92% протягом трьох циклів регенерації. При цьому одержані адсорбенти зберігають сорбційно-структурні параметри та впорядковану структуру.

Таким чином, введення різних N-вмісних груп на внутрішню та зовнішню поверхню впорядкованих кремнеземних матриць забезпечує ефективне та селективне вилучення іонів важких металів, включаючи Cr(III) та Mn(II), з водних розчинів.

Подяка. Представлена робота виконувалась в рамках спільного Українсько-індійського проекту Міністерства освіти та науки України «Створення нових органічно-неорганічних гібридних матеріалів як сорбентів для очищення стічних вод від іонів важких металів» (2019-2021 рр).

1. Engwa A.G., Ferdinand P.U., Nwalo F.N., Unachukwu N.M. Mechanism and Health Effects of Heavy Metal Toxicity in Humans. In: Poisoning in the Modern World - New Tricks for an Old Dog. 2020 – <https://doi.org/10.5772/intechopen.82511>

2. Jan A.T., Azam M., Siddiqui K. Ali A., Choi I., Haq Q.M. Heavy Metals and Human Health: Mechanistic Insight into Toxicity and Counter Defense System of Antioxidants. // Int. J. Mol. Sci. – 2015 – 16(12) – P.29592-29630.

3. Chételat J., Ackerman J.T., Eagles-Smith C.A., Hebert C.E. Methylmercury exposure in wildlife: a review of the ecological and physiological processes affecting contaminant concentrations and their interpretation, Sci. Total Environ. – 2019 – [711](#) – P.135117.

4. Aaseth J., Wallace D.R., Vejrup K., Alexander J. Methylmercury and Developmental Neurotoxicity: A Global Concern. // Current Opinion in Toxicology. – 2020 – 19 – P. 80-87.

5. Dudarko O., Kobylinska N., Mishra B., Kessler V.G., Tripathi Bijay P., Seisenbaieva G. Facile strategies for synthesis of functionalized mesoporous silicas for the removal of rare-earth elements and heavy metals from aqueous systems // Micropor. Mesopor. Mater. – 2021 – 315 – P. 110919.

СИНТЕЗ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ КОМПОЗИТНИХ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ КРЕМНЕЗЕМУ ТА ПОЛІМОЛОЧНОЇ КИСЛОТИ

*Козакевич Р.Б.¹, Поліщук Л.М.¹, Тумко А.В.², Фуртат І.М.²,
Вакулюк П.В.², Кусяк А.П.³, Тьортих В.А.¹*

¹Інститут хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України

²Національний університет «Києво-Могилянська академія»

³Житомирський державний університет імені Івана Франка

kozakevych@gmail.com

Пластик став одним з необхідних матеріалів у нашому повсякденному житті. Більша частина всіх пластмас синтезується з невідновлюваних джерел сировини: природний газ, нафта, вугілля. В даний час в світі гостро стоїть питання зменшення споживання нафтогазових ресурсів. Тому актуальна область науки про полімери протягом останніх років змістила свій інтерес до біополімерів та ефективних способів їх виробництва, переробки та застосування [1]. Полімолочна кислота (ПМК) є в даний час одним з найбільш перспективних біополімерів, які використовуються в даний час в промисловості [2]. ПМК біодеградує в умовах компостування, а також засвоюється мікроорганізмами, тому створення композицій на її основі і подальша їх переробка у виробі дозволить скоротити споживання невідновлюваних природних ресурсів, а також значно поліпшити екологічну ситуацію в світі.

Полімолочна кислота є полієфіром молочної (2-гідроксіпропіонової) кислоти (рис. 1).

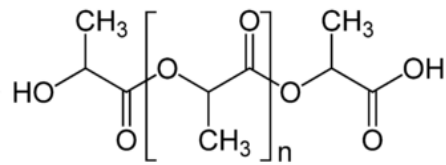


Рис. 1 Структурна формула полімолочної кислоти

ПМК володіє абсолютною біосумісністю, що робить її безпечним полімером для контакту з організмом людини, вона біодеструктує і в організмі перетворюється в природну для людини молочну кислоту, яка потім під дією ферментів розпадається.

Дана робота присвячена розробці методів синтезу та дослідженню властивостей композитів на основі кремнезему та полімолочної кислоти [3]. Одержання композитних матеріалів було проведено шляхом полімеризації *L*-лактиду з розкриттям його кільця в поверхневому шарі вихідного (А-300) та модифікованого (А-NH₂) кремнеземного носія (рис. 2, 3). Для модифікування проводили реакцію поверхневих силанольних груп з 3-амінопропілтриетоксисиланом. Вміст хемосорбованих аміногруп визначали спектрофотометричним методом за реакцією із саліциловим альдегідом на довжині хвилі 400 нм. Кількість прищеплених аміногруп на 1 г кремнезему становила 0,25 ммоль [4].

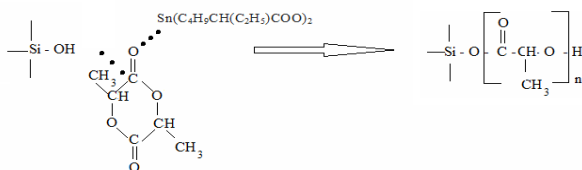


Рис. 2 Схема синтезу композиту А-300/ПМК

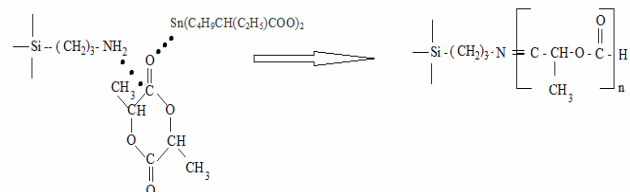


Рис. 3 Схема синтезу композиту А-NH₂/ПМК

Для підтвердження полімеризації *L*-лактиду з розкриттям його кільця в поверхневому шарі кремнеземного носія були отримані ІЧ-спектри вихідного кремнезему, кремнезему з прищепленими амінопропільними групами та одержаних на їх основі композитів з полімолочною кислотою (рис. 4, 5). ІЧ-спектри зразків реєстрували на ІЧ-спектрофотометрі з Фур'є-перетворенням (Thermo Nicolet Nexus FT-IR, США). Для цього приготовлені зразки змішували з оптично чистим КВг (Fluka) із масовим співвідношенням 1:20.

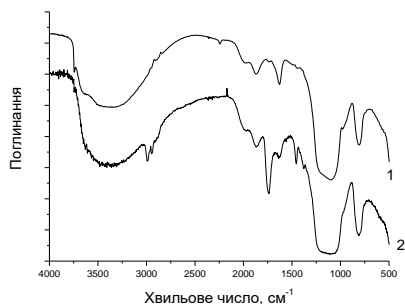


Рис. 4 ІЧ-спектри пірогенного кремнезему А-300 (1) та композиту А-300/ПМК (2)

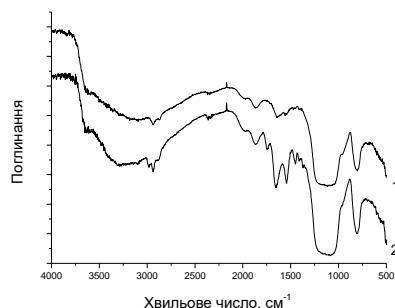


Рис. 5 ІЧ-спектри амінокремнезему (1) та композиту А-NH₂/ПМК (2)

Після проведення в поверхневому шарі полімеризації лактиду в спектрі (рис. 4, крива 2) спостерігаються інтенсивні смуги поглинання в області валентних коливань С-Н і смуга поглинання при 1740 см⁻¹, яка відноситься до валентних коливань карбонільної групи (С=О) [5]. При цьому зменшується інтенсивність смуги валентних коливань вільних силанольних груп поверхні кремнезему. Це дає підстави вважати, що полімеризація лактиду здійснюється з одночасним прищепленням ПМК до структурних силанольних груп поверхні з утворенням гідролітично нестійких зв'язків Si-O-C. Згідно з результатами ІЧ-спектроскопії (рис. 5, крива 1) у спектрі амінокремнезему наявні смуги при 1570 та 2930 см⁻¹, що відносяться відповідно до деформаційних коливань N-H і валентних коливань C-N в пропільному радикалі. У випадку, коли на поверхні кремнезему наявні амінопропільні групи (рис. 5, крива 2), після контакту з лактидом і проведення полімеризації в спектрі спостерігається поява характерної смуги з максимумом поглинання 1640 см⁻¹, що відповідає азометиновим зв'язкам у поверхневих сполуках, утворених між амінопропільними групами носія та карбонільними групами прищепленого полілактиду. Ці дані узгоджуються із результатами термогравіметричного аналізу.

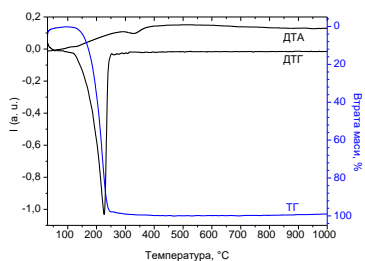


Рис. 6 Криві ТГ, ДТГ та ДТА для лактиду

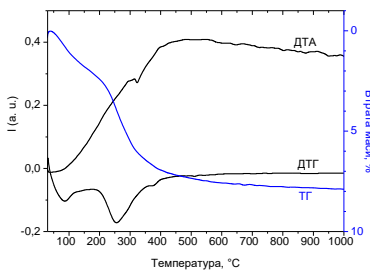


Рис. 7 Криві ТГ, ДТГ та ДТА для композиту А-300/ПМК

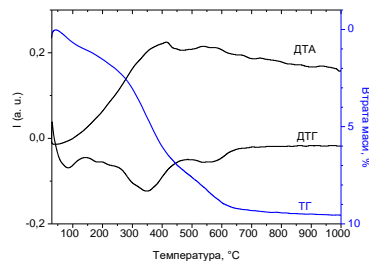


Рис. 8 Криві ТГ, ДТГ і ДТА для композиту А-NH₂/ПМК

Термоокиснювальна деструкція лактиду починається при 121°C, проходить в одну стадію та при температурі 250°C досягається повний розклад. Максимальна втрата маси лактиду відбувається при температурі 225°C (рис. 6.). Отримані дані ДТА, ТГ та ДТГ для зразка композиту А-300/ПМК демонструють, що при температурі 90 °C відбувається втрата

маси у кількості 2% (рис. 7). Процес деструкції проходить в одну стадію в інтервалі температур 200–400 °С з піком деструкції 250 °С. Термоокиснювальна деструкція композиту А- NH₂/ПМК (рис. 8) розпочинається за температури 180 °С та перебігає у два етапи. На першому етапі в інтервалі 200–400 °С відбувається початкове руйнування модифікатора, з піком деструкції 350 °С. На другій стадії (450–600 °С) відбувається карбонізація та окиснення продуктів розкладу органічної частини. І, насамкінець, за температури 650 °С спостерігається остаточна окисна деструкція полімолочної кислоти. Підвищення температури деструкції для композитів може бути пов'язане з більш сильнішою взаємодією ПМК з поверхнею кремнезему.

Наступним етапом було дослідження сорбційних властивостей одержаних композитів щодо катіонів важких металів Pb(II), Co(II) та Cu(II). Дослідження сорбційних властивостей композитів А-300/ПМК та А-NH₂/ПМК (таблиця) проводили у статичному режимі при періодичному перемішуванні. Для цього використовували 0,1 г адсорбенту на 25 мл розчину солей обраних катіонів: Pb(NO₃)₂, CoCl₂ та CuSO₄·5H₂O, фіксуючи рівноважні концентрації катіонів атомно-абсорбційним методом.

Таблиця

Адсорбційні характеристики синтезованих композитів щодо йонів токсичних металів

Катіони	Адсорбційна ємність, ммоль/г	
	А-NH ₂ /ПМК	А-300/ПМК
Pb(II) (pH=7)	1,00	0,50
Cu(II) (pH=2)	0,05	0,04
Co(II) (pH=7)	0,23	0,10

Таким чином, одержано композитні сорбенти шляхом полімеризації *L*-лактиду з розкриттям його кільця в поверхневому шарі кремнеземного носія. Встановлено, що одержані композити ефективно вилучають із водних розчинів катіони токсичних металів (Pb²⁺, Co²⁺ та Cu²⁺).

1. Панчук М.В., Шлапак Л.С., Курта С.А., Струмінська О.О. Виробництво та використання біополімерів — шлях до покращення екології довкілля // Науковий вісник ІФНТУНГ. – 2011. – № 4(30) – С. 92-101.

2. Ehsani M., Khodabakhshi K., Asgari M. Lactide synthesis optimization: investigation of the temperature, catalyst and pressure effects // e-Polymers. – 2014. – P. 353–361.

3. Dechy-Cabaret O., Martin-Vaca B., Bourissou D.. Controlled ring-opening polymerization of lactide and glycolide. // Chem. Rev. 2004, – 104. – P.6147–6176.

4. Тертых В.А., Янишпольский В.В., Чуйко А.А., Галич И.П., Цыперович А.С., Ковальчук Т.А. Имобилизация α-амилазы на поверхности высокодисперсного кремнезема // Докл. АН УССР. Сер.Б. – 1977. – № 7. – С. 654 – 657.

5. Наканиси К. Инфракрасные спектры и строение органических соединений. – М.: Мир. – 1965. – 216 с.

КІНЕТИЧНІ ЗАКОНОМІРНОСТІ ФОРМУВАННЯ НАНОКОМПОЗИТІВ СРІБЛА НА ОСНОВІ СИНТЕТИЧНИХ ФУЛЬВОКИСЛОТ

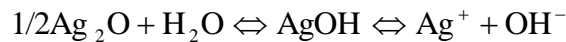
Литвин В.А., Суковач Т.М., Семенова М.І.

Черкаський національний університет ім.Б.Хмельницького, litvin_valentina@ukr.net

Синтез наноконкомпозитів срібла становить значний інтерес завдяки їх унікальним фізико-хімічним властивостям, що знаходить широке використання в різних областях науки та техніки [1]. Наноконкомпозити, що містять нанорозмірне срібло можуть бути отримані як фізичними, так і хімічними методами [2]. Однак найбільшого поширення набув хімічний підхід в основі якого лежить реакція відновлення. Встановлено, що на розмір, морфологію, стійкість і властивості металічних наночастинок значною мірою впливають умови синтезу, кінетика взаємодії іонів металів з відновниками та процеси адсорбції стабілізуючого агента на наночастинках металу. У зв'язку з цим розробка синтетичного шляху, в якому вказані властивості наноконкомпозитів добре контролюються є перспективним та актуальним завданням.

У даному дослідженні вивчалися кінетичні закономірності формування наноконкомпозитів срібла у реакції відновлення Ag^+ йонів синтетичними фульвокислотами, отриманими з таніну [3]. Останні виконували також роль стабілізатора утворених наночастинок срібла за рахунок адсорбції на поверхні металічної фази.

Пряме потенціометричне дослідження витрати Ag^+ іонів в процесі формування наноконкомпозитів срібла дозволив отримати інформацію про кінетику та механізм реакції. На графіку залежності pAg від часу (рис. 1) чітко виділяються три ділянки, які відповідають різним стадіям процесу. Зокрема, в точці *a* відбувається швидке формування мікрофази Ag_2O після змішування реагентів в умовах надлишку луку. Ділянка *ab* відповідає відновленню Ag^+ іонів синтетичними фульвокислотами на поверхні утворених гетерогенних центрів нуклеації Ag_2O . Це спричиняє поступове розчинення мікрофази Ag_2O . Концентрація Ag^+ іонів у розчині на цій стадії визначається рівновагою процесу:



і, отже, залежить від концентрації OH^- іонів у розчині. Точка *b* на кінетичних кривих зміни pAg відповідає повному розчиненню мікрофази Ag_2O . На завершальній стадії, після повного розчинення мікрофази Ag_2O , на поверхні наночастинок триває відновлення Ag^+ іонів з розчину, що супроводжується лінійним зростанням pAg (ділянка *bc*).

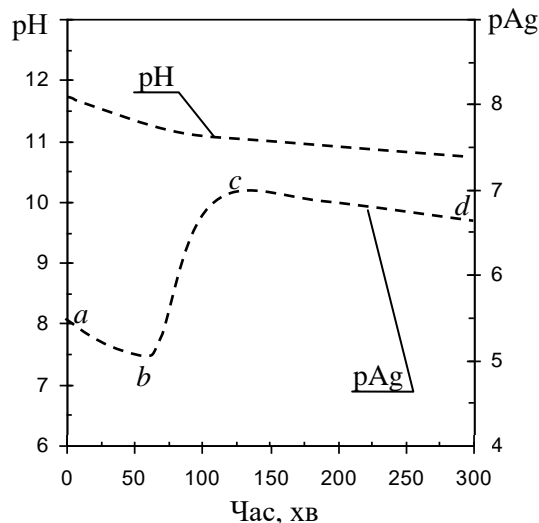


Рис. 1 Потенціометричні криві pH та pAg для процесу формування наноконкомпозитів срібла з використанням синтетичних фульвокислот як функції часу

Незначне зниження pAg у кінці процесу синтезу (ділянка cd) обумовлене взаємодією утворених наночастинок срібла з киснем повітря. Це приводить до часткового розчинення наночастинок і, отже, збільшення концентрації Ag^+ іонів в розчині.

Оскільки на початковому етапі реакції (період від змішування реагентів до повного зникнення мікрофази Ag_2O) відновлення Ag^+ іонів відбувається на поверхні Ag_2O (гетерогенний процес), то швидкість реакції не залежить від концентрації Ag_2O в розчині. Таким чином, ця стадія описується кінетикою нульового порядку за Ag_2O . Тому константа швидкості утворення наночастинок срібла на початковому етапі (k_0) може бути розрахована за формулою:

$$\frac{dn(Ag_2O)}{dt} = k_0,$$

де $n(Ag_2O)$ – це кількість речовини мікрофази Ag_2O (моль), t – час існування мікрофази Ag_2O в системі (с), k_0 – константа швидкості реакції нульового порядку (моль·с⁻¹).

Після повного розчинення мікрофази Ag_2O спостерігається лінійний ріст pAg (ділянка bc), що відповідає зменшенню концентрації Ag^+ іонів в системі. На цьому етапі відновлення Ag^+ іонів продовжується на поверхні вже існуючих наночастинок срібла і описується кінетикою першого порядку за Ag^+ іоном (k_1). Константа швидкості реакції відновлення Ag^+ іонів на цій стадії бути знайдена з виразу:

$$\frac{d \ln[Ag^+]}{dt} = \frac{F}{RT} \cdot \left(\frac{\partial E}{\partial t} \right)_{T, OH^-, [Ag_n^0]}$$

у який підставляється значення похідної $(\partial E / \partial t)_{T, OH^-, [Ag_n^0]}$, визначене графічно як кутовий коефіцієнт лінійної ділянки bc кривої pAg проти часу (рис. 1), враховуючи, що $E = 2,303 \cdot (RT/F) \cdot \Delta pAg$.

Розраховані значення константи швидкості реакції нульового порядку за Ag_2O (k_0) на початковій стадії процесу формування наночастинок (до повного розчинення мікрофази Ag_2O) і константи швидкості реакції першого порядку за Ag^+ іоном (k_1) на більш пізніх етапах росту наночастинок (після повного розчинення мікрофази Ag_2O) при різних температурах наведені в таблиці.

Таблиця

Константи швидкості реакції на різних стадіях формування нанокompatитів срібла з використанням синтетичних фульвокислот з таніну залежно від температури

Початкова стадія			Кінцева стадія		
Константа швидкості нульового порядку $k_0 \cdot 10^7$ (моль·с ⁻¹)			Константа швидкості першого порядку $k_1 \cdot 10^3$ (с ⁻¹)		
303 К	313 К	323 К	303 К	313 К	323 К
2,4±0,2	6,5±0,2	18,2±0,3	5,2±0,2	9,4±0,2	12,7±0,2

1. Zhang S. A Review on Preparation and Applications of Silver-Containing Nanofibers / S. Zhang, Y. Tang, B. Vlahovic // Nanoscale Research Letters. – 2016. – Vol. 11. – P. 80.
2. Крутяков Ю. А. Синтез и свойства наночастиц серебра: достижения и перспективы / Ю. А. Крутяков, А. А. Кудринский, А. Ю. Оленин, Г. В. Лисичкин // Успехи химии – 2008. – Т. 77, № 3. – С. 242–269.
3. Litvin V.A. Synthetic fulvic acids from tannin / V. A. Litvin, R. Abi Njoh // Journal of Chemistry and Technologies. – 2020. – 28(3). – 251-259.

ВПЛИВ ДЕФЕКТІВ КРИСТАЛІЧНОЇ ГРАТКИ НА ВЛАСТИВОСТІ ТВЕРДИХ ТІЛ

Литвинчук А.П., Чайка М.В., Камінський О.М.

Житомирський державний університет імені Івана Франка, oximiriocat@gmail.com

Метою даної роботи є дослідження впливу дефектів кристалічної ґратки на фізико-хімічні властивості твердих тіл та розробка методики їх виявлення. Кристалічна ґратка – це розміщення в просторі йонів, атомів або молекул у певному систематичному порядку, а точки в яких розміщені частинки, називаються вузлами кристалічної ґратки. У цих вузлах розміщуються атоми, іони або молекули, які здійснюють коливальний рух. З підвищенням температури амплітуда коливань збільшується, що виявляється в тепловому розширенні тіл. Нерівномірність у розподілі енергії в кристалі, а також дія зовнішніх впливів (електричних, механічних, дії випромінювань) може викликати появу дефектів [1]. Незважаючи на те, що кількість дефектів у кристалах дуже мала, їхній вплив на переважну більшість фізичних властивостей є вирішальним.

Дефекти у кристалах можна поділити на чотири групи [2]:

- Точкові – порушення періодичності в ізольованих точках кристалу (вакансії, атоми у міжвузловинах, домішкові атоми у вузлах);
- Лінійні – порушення періодичності в одному напрямі (дислокації, ланцюги точкових дефектів);
- Поверхневі – простягаються у двох вимірах на відстані, що співрозмірна кристалу, а в третьому складає декілька параметрів ґратки (площини двійників, границі зерен та блоків, дефекти укладання частинок, домішкові фази);
- Об'ємні дефекти у трьох вимірах значно перевищують параметр ґратки (фігури росту, порожнечі, включення домішкових фаз, механічні пошкодження кристалів).

Неправильне розташування окремих атомів в кристалічній ґратці створює точкові дефекти. Так, в кристалі з однаковими атомами, наприклад в металі, у певному місці ґратки може бути відсутнім один з атомів, а тому там утворюється порожнеча, яку називають вакансією. Якщо атом даної речовини чи домішковий атом потрапляє між атомами у вузлах кристалічної ґратки, то виникає дефект впровадження [1-2].

Якщо розглядати іонну кристалічну ґратку для якої повинна зберігатись електронейтральність, то утворення у ній дефектів пов'язане з перерозподілом зарядів. Так, коли у ґратці відбувається утворення вакансії катіону, то це супроводжується утворенням і вакансій аніону, - такий тип дефекту називають дефектом Шотткі. Впровадження іону між вузлами кристалічної ґратки супроводжується появою на даному місці вакансії, яку можна розглядати як центр заряду протилежного знаку – це дефект Френкеля.

Відомо багато властивостей, які залежать або на які впливають дефекти кристалічних ґраток [1]:

- Електрична та теплопровідність у металах (сильно зменшують точкові дефекти);
- Електронна провідність у напівпровідниках (контрольовані заміщенням дефектів);
- Дифузія (контрольована вакансіями);
- Іонна провідність (контрольована вакансіями);
- Пластична деформація в кристалічних матеріалах (керована дислокаціями);
- Забарвлення (залежить від дефектів);
- Механічна міцність (сильно залежить від дефектів).

Отже, багато фізико-хімічних властивостей кристалів сильно залежать від дефектів різних груп. Наприклад, міцність і пластичність матеріалу найсильніше залежать від лінійних, поверхневих і об'ємних дефектів. Електроопір в основному залежить від точкових дефектів. Коефіцієнт дифузії, теплопровідність, забарвлення кристалів також сильно залежать від наявності дефектів. Тому виявлення дефектів є актуальною задачею під час вирощування кристалів у промисловості та дослідження їх властивостей.

Поширеним та достатньо простим у реалізації методом виявлення точкових дефектів є метод утворення центрів забарвлення (комплексних центрів). Відомо, що центрами забарвлення, або «Фарбен-центрами» називають комплекси точкових дефектів, які володіють власною частотою поглинання світла і тому змінюють забарвлення кристалів. В основі методу лежить нагрівання лужно-галоїдного кристалу у парах лужного металу, в результаті чого помітно змінюється його забарвлення [3]. Для виконання експерименту потрібно помістити очищений від залишків гасу та плівки шматочок металічного натрію масою 0,1 г у сухий тигель і швидко засипати 1 г добре розтертого, чистого NaCl. Після цього тигель накрити кришечкою та прожарювати в муфельній печі при 400 °С протягом 10 хв. Виявлено, що безбарвні кристали NaCl у парах лужного металу набувають яскраво синього забарвлення. Смуги поглинання, які з'являються, характерні для кристалу і не залежать від природи металу. Це доводить той факт, що центр забарвлення створюється при взаємодії власного точкового дефекту кристалу з електроном або діркою, які надходять із парів лужного металу. Встановлено, що інтенсивність забарвлення залежить від кількості металу та часу прожарювання суміші за умови сталої кількості солі. Простота даного методу та невисока температура кипіння натрію дозволяють встановлювати точкові дефекти в лужно-галоїдних кристалах шляхом візуального порівняння інтенсивності забарвлення солі.

Більшість методів експериментального виявлення дислокацій засновані на реєстрації тих напруг або деформацій, які зумовлені дислокацією. Одним із найпоширеніших методів виявлення дислокацій є метод селективного травлення. Після хімічного розчинення у селективних травниках орієнтованого сколу або грані монокристалу на її поверхні утворюються дрібні ямки або виступи, які називають – фігурами травлення [3]. Вони утворюються в тих місцях, де на поверхню кристалу виходять дислокації, і як наслідок, структура кристалу порушена. Розташування, кількість і форма фігур травлення характеризують дислокаційну структуру кристалу. По кількості ямок на одиницю площі поверхні визначають густину дислокацій. Відомо, що в середньому вона становить 10^5 - 10^7 см⁻² [4]. Визначення густини дислокацій за фігурами травлення є основним промисловим методом контролю якості кристалів, але він не придатний для кристалів з густиною дислокацій меншою, ніж 10^6 - 10^7 см⁻². Селективне травлення відіграє важливу роль в експрес-контролі дефектів структури кристалів під час їх виробництва та в наукових лабораторіях. Воно призводить до формування на поверхні видимих контрастних ямок травлення і дозволяє ідентифікувати не лише дислокації та їх густину, але і дефекти упаковки, двійники, включення інших фаз [5]. Багаторазове проведення хімічного розчинення кристалів у селективних травильних розчинах та зменшення товщини матеріалу шар за шаром дає можливість точно встановити дефектну структуру в об'ємі кристалу.

1. Шевченко Л. Л. Кристалохімія: Підручник. – К.: Вища шк. 1993. – 174 с.
2. Ван-Бюрен Х.Г. Дефекты в кристаллах. – М.: Иностранная литература, 1962. - 610 с.
3. Переш Є.Ю., Різак В.М., Семрад О.О. Хімія твердого тіла: навч. пос. – Ужгород: ТДВ Патент, 2011. Ч.1. – 210 с.
4. Металознавство: Підручник / О.М. Бялік, В.С. Черненко, В.М. Писаренко, Ю.Н. Москаленко. – К.: ІВЦ Вид-во Політехніка, 2002. – 384 с.
5. Окрепка Г.М. Селективне травлення монокристалів $Zn_xCd_{1-x}Te$ / Г.М. Окрепка, В.М. Томашик // Фізика і хімія твердого тіла. – 2015. – Т. 16, № 4. – С. 711-715.

ОСОБЛИВОСТІ ОДЕРЖАННЯ МАГНІТНИХ НАНОЧАСТИНОК ДЛЯ ВИКОРИСТАННЯ У ФЕНТОНОПОДІБНИХ КАТАЛІЗАТОРАХ

Макидо О.Ю., Хованець Г.І.

Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАН України, khovanets_galyna@ukr.net

Інтерес до магнітних нанокompatитів, що складаються з наночастинок ферит-шпінелі та немагнітної матриці, зростає через їх високий потенціал щодо широкого використання у різних технологічних галузях – це ферро-рідина, магнітна доставка ліків, магнітне збереження інформації тощо. Серед вимог, які висуваються до властивостей магнітних частинок, таких як коерцитивна сила, залишкова намагнічуваність, є також вимоги щодо зменшення їх розміру та однорідності форми, що є умовою одержання частинок з унікальними магнітними властивостями.

Окрему увагу науковців заслужив ферит кобальту CoFe_2O_4 завдяки властивостям об'ємного матеріалу (висока намагніченість насичення і коерцитивної сила, сильна анізотропія, механічна твердість і хімічна стабільність).

Відомо багато методів одержання наночастинок CoFe_2O_4 , зокрема, золь-гель метод, метод співосадження, випаровування розчинника, гідротермальний та цитратний методи. Оскільки одержані наночастинок мають сильну тенденцію до агрегації, що ускладнює використання їх унікальних властивостей, то був запропонований синтез нанокompatитів на відповідній матриці, який дозволяє отримати ультратонкі частинки із властивостями, відмінними від властивостей об'ємного матеріалу.

В нашій роботі представлено результати одержання наноструктурованого фериту кобальту співосадженням солей феруму та кобальту з водних розчинів на поверхню полімерної матриці. Для підвищення гомогенності розмірів частинок та запобігання їх агрегації співосадження гідроксидів феруму та кобальту проводили на попередньо синтезовані частинки поліметилметакрилату (ПММА), які мали розмір приблизно 60 нм.

Солі Fe^{3+} та Co^{2+} вводили у розчин при мольному співвідношенні $\text{Co} : \text{Fe} = 1 : 2$ і проводили перемішування разом з частинками ПММА за температури 40°C . Осадження здійснювали за допомогою гідроксиду амонію у кількості $(\text{Fe}^{3+} + \text{Co}^{2+}) : \text{NH}_4\text{OH} = 1 : 10$.

Після цього температуру процесу підвищували до 90°C і за інтенсивного перемішування витримували протягом 2 годин. Отриманий осад відділяли від фільтрату центрифугуванням та промивали до рН 7, висушували при 100°C протягом 24 годин та прожарювали при 550°C .

Для підтвердження структури отриманого осаду проведено комплексний термогравіметричний та диференційний термічний аналізи на дериватографі Q-1500D системи Paulik–Paulik–Erdey та рентгеноструктурний аналіз за допомогою рентгенівського дифрактометра ДРОН-3М у $\text{CuK}\alpha$ випромінненні ($\lambda = 1,5418 \text{ \AA}$).

Для дериватографії одержаний осад ПММА- $\text{Fe}(\text{OH})_3$ - $\text{Co}(\text{OH})_2$ попередньо висушували при 100°C протягом 24 годин. Як показали результати (Рис. 1.), оцінка термограми ускладнюється накладанням ефектів

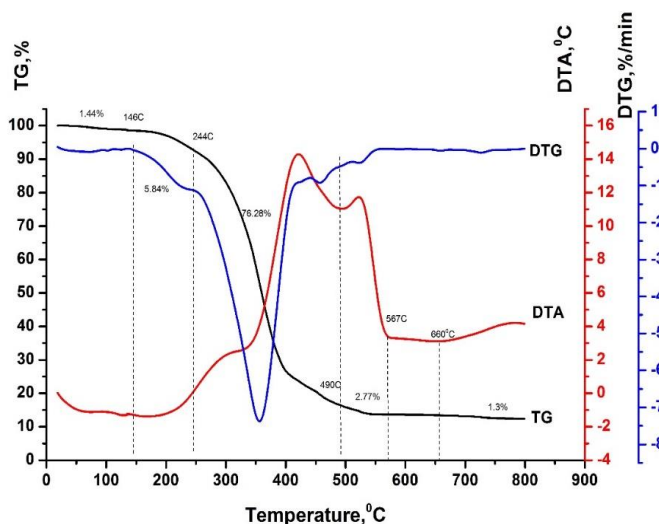


Рис. 1 Термограма осаду ПММА- $\text{Co}(\text{OH})_2$ - $\text{Fe}(\text{OH})_3$ після сушіння при 100°C

декількох процесів. На кривій диференційного термічного аналізу (ДТА) спостерігається два ендотермічних ефекти та 4 екзотермічних ефекти, що супроводжуються втратою маси.

Перший ендотермічний пік, розташований в інтервалі температур 20–146°C, відповідає втраті адсорбованої та міжкристалічної води. Другий широкий ендотермічний ефект з максимумом при 200°C відповідає термічному розкладу $\text{Fe}(\text{OH})_3$ до аморфного $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$. В цьому інтервалі температур (146–244°C) втрата маси зразка пов'язана також із першою стадією деградації ПММА, для якого при 170°C характерним є розрив слабкого зв'язку голова до голови. В діапазоні температур 244–490°C спостерігається різке зменшення маси зразка, а на кривій ДТА можна виділити два екзотермічних ефекти – неявно виражений при 320°C та яскраво виражений при 420°C. На цьому інтервалі відбувається розклад $\text{Co}(\text{OH})_2$ з утворенням фази фериту кобальту CoFe_2O_4 .

Крім того, таке різке зменшення маси зразка пов'язане із деструкцією полімеру, вміст якого у композиті досягає 63% по масі. При 330°C починається друга стадія термічного розкладу ПММА, а при 420°C відбувається руйнування основного ланцюга з утворенням легких продуктів. Невелика втрата маси (2,77%) при піднятті температури до 567°C пов'язана із згоранням карбонізованого залишку, чому відповідає екзотермічний ефект при 530°C. В діапазоні температур 567–660°C продовжується утворення фази фериту кобальту CoFe_2O_4 без втрати маси. Екзотермічний ефект, що спостерігається вище 660°C, пов'язаний із розпадом фериту кобальту та виділенню в окрему фазу $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ з одночасним збільшенням розмірів кристалітів.

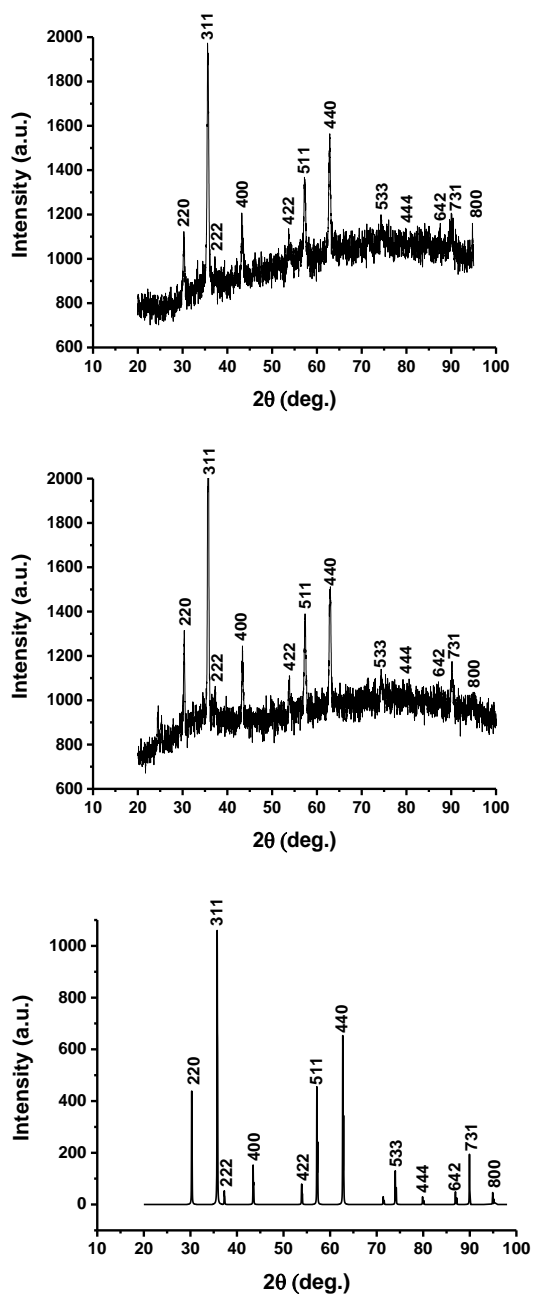
а

Рентгеноструктурний аналіз виконаний для зразків CoFe_2O_4 , відпалених за температур 550°C та 650°C. Для порівняння використовували стандартну карту JCPDS 1-1121.

На одержаних рентгенограмах (Рис. 2.) отримані дифракційні піки відповідають структурі шпінелі CoFe_2O_4 з гранецентрованою кубічною фазою. Слідів інших фаз, можливих домішок або проміжної фази не спостерігалось. Зразки мають широкі піки, що вказує на нанокристалічні розміри отриманих частинок. При зростанні температури відпалу (Рис. 2 а,б) піки стають більш різкими та звуженими, що обумовлено більш впорядкованою структурою або зростанням розміру кристалу синтезованого фериту кобальту.

б

Проведені аналізи підтвердили одержання фериту кобальту стехіометричної будови. Отриманий наноструктурований CoFe_2O_4 має магнітні властивості, що дає можливість використовувати його для подальшого синтезу фентоноподібних каталізаторів з метою можливості застосування магнітної сепарації для вилучення їх з реакційного середовища після проведення каталітичної реакції.



в

Рис. 2 Рентгенограми зразків CoFe_2O_4 , відпалених при різних температурах: **а)** 550°C, **б)** 650°C та **в)** CoFe_2O_4 (JCPDS 1-1121)

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА DyBiPbSi₂S₈

Марчук О.В., Смітюх О.В.

Волинський національний університет імені Лесі Українки, marchuk.oleg@vnu.edu.ua

Отримання багатофункціональних матеріалів із наростаючим компонентним вмістом (чотири, п'ять і т.д.) є одним з основних напрямків в сучасній науці про напівпровідникове матеріалознавство. Серед багатокомпонентних систем важливе місце належить системам, які в своєму складі містять рідкісноземельні метали. Інтерес до таких матеріалів викликаний їх специфічними тепловими, електричними і оптичними властивостями. Асиметричність у структурі розширює їх можливість застосування у сфері інфрачервоної і нелінійної оптики.

Представлені результати експерименту є одним із етапів систематичного дослідження структури халькогенідних фаз, що кристалізуються у структурному типі La₂PbSi₂S₈ (просторова група – R3c (№ 167), символ Пірсона – hR26).

У роботі вперше представлено результати вивчення кристалічної структури халькогенідної фази DyBiPbSi₂S₈ (таблиця 1) рентгенівським методом порошку.

Сплав стехіометричного складу DyBiPbSi₂S₈ виготовляли сплавленням простих речовин високого ступеня чистоти у вакуумованому до залишкового тиску (10⁻² Па) контейнері із високоякісного кварцу. Для приготування вихідної шихти розраховані кількості вихідних речовин зважували на аналітичних терезах ВЛР 200. Загальна маса вихідної шихти становила 1,0 г. Синтез здійснювали у муфельній печі з програмним управлінням технологічними процесами МП-30. Максимальна температура синтезу становила 1420 К, гомогенізуючий відпал за температури 770 К тривав 240 годин. Розрахунок кристалічної структури здійснювали за дифрактограмою (рисунок 1), яка була отримана на дифрактометрі ДРОН 4-13 в межах 2 Θ = 10 - 100° (CuK α – випромінювання, крок сканування – 0,05°, експозиція у кожній точці – 20 с). Обробку даних та визначення кристалічної структури здійснювали за допомогою пакету програм WinCSD [4]. Візуалізацію структури проводили за допомогою програми VESTA [5].

Таблиця

Експериментальні умови одержання масиву дифракційних даних і результати уточнення кристалічної структури халькогенідної фази DyBiPbSi₂S₈

<i>a</i> , (нм)	0.88813(4)
<i>c</i> , (нм)	2.6422(2)
<i>V</i> , (нм ³)	1.8049(3)
Кількість атомів в комірці	78
Кількість атомних позицій	6
Розрахована густина (г/см ³)	4.9200(8)
Адсорбційний коефіцієнт (1/см)	968.70
Спосіб обрахунку	Повнопрофільни
<i>R</i> _i ; <i>R</i> _p	0.0734; 0.1883
2 θ ; sin θ / λ (макс)	100.00; 0.497
Фактор шкали	0.35475(7)
Вісь текстури і параметр	[037] і 1.0700

У структурі халькогенідної фази DyBiPbSi₂S₈ (СТ La₂PbSi₂S₈) правильна система точок (ПСТ) 18*e* (таблиця 2) заселена сумішшю атомів Dy, Bi і Pb (1/3 : 1/3 : 1/3), а ПСТ 12*c* – атомами Si (рис. 2). Міжатомні відстані є адитивними величинами. Координаційне оточення катіонів наступне: атоми статистичної суміші (Dy, Bi і Pb) центровані в тригональних призмах із двома додатковими атомами [6S₂ 2S₁], атоми Si координують навколо себе по чотири атоми Сульфуру [3S₂ 1S₁].

Структурні дані для халькогенідної фази $\text{DyBiPbSi}_2\text{S}_8$

Атом	ПСТ	КЗП	x	y	z
Dy	18e	1/3	0.635(2)	0.635(2)	0.25
Bi	18e	1/3	0.652(2)	0.652(2)	0.25
Pb	18e	1/3	0.681(2)	0.681(2)	0.25
Si	12c	1	0	0	0.6806
S1	12c	1	0	0	0.5734
S2	36f	1	0.041(3)	0.244(2)	0.1508

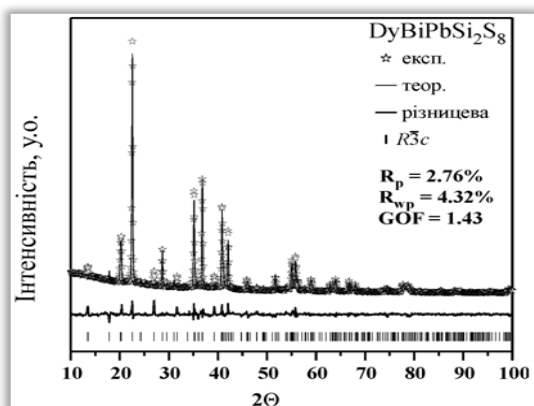
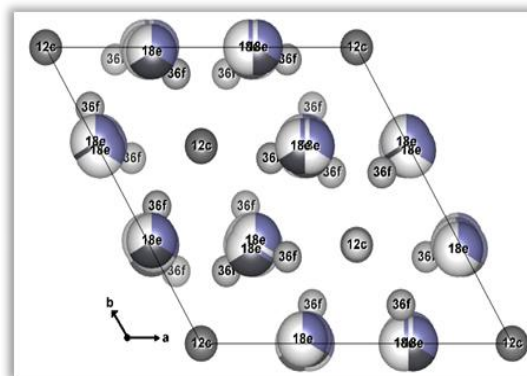


Рис. 1 Дифрактограма халькогенідної фази $\text{DyBiPbSi}_2\text{S}_8$ (Cu $\text{K}\alpha$ -випромінювання) та різницева діаграма між експериментальним та теоретичним профілями. Вертикальні риси вказують на положення відбить hkl

Рис. 2. Проекція елементарної комірки халькогенідної фази $\text{DyBiPbSi}_2\text{S}_8$ на площину bc



1. Daszkiewicz M., Marchuk O.V., Gulay L. D., Kaczorowski D. Crystal structures and magnetic properties of $\text{R}_2\text{PbSi}_2\text{S}_8$ ($\text{R} = \text{Y}, \text{Ce}, \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Ho}$), $\text{R}_2\text{PbSi}_2\text{Se}_8$ ($\text{R} = \text{La}, \text{Ce}, \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Gd}$) and $\text{R}_2\text{PbGe}_2\text{S}_8$ ($\text{R} = \text{Ce}, \text{Pr}$) compound. J. Alloys compd. – 2012. – 519. – P. 85-91.
2. Мельничук Х. О., Смітюх О. В., Марчук О. В., Мазур Н. В., Юхимчук В. О. Структурні дослідження халькогенідів $\text{Ce}_{0.5}\text{R}_{1.5}\text{PbSi}_2\text{S}_8$ і $\text{Pr}_{1.5}\text{R}_{0.5}\text{PbSi}_2\text{S}_8$ ($\text{R}' = \text{Tb}, \text{Y}, \text{Er}$) // Науковий вісник Ужгородського університету, серія "Хімія". – 2020. – Вип. № 1(43). – С.6-15.
3. Kaczorowski D., Melnychuk Kh. O., Marchuk O. V., Gulay L. D., Daszkiewicz M. Crystal structure and magnetic properties of novel $\text{La}(\text{Ce}, \text{Pr})\text{R}'\text{PbSi}_2\text{S}_8$ ($\text{R}' = \text{Ce}, \text{Pr}, \text{Sm}, \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Y}, \text{Ho}$ and Er) compounds. J. Solid State Chem. 2020. – 290. – P. 121565.
4. Akselrud L., Grin Yu. WinCSD: software package for crystallographic calculations (Version 4). J. Appl. Cryst. – 2014, – 47. – P. 803-805.
5. Momma K., Izumi F. VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data. J. Appl. Crystallogr. 2011. – 44. – P. 1272-1276.

ЕЛЕКТРОХІМІЧНІ ПРОЦЕСИ ПРИ ВЗАЄМОДІЇ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ Cd_{1-x}Mn_xTe З ТРАВІЛЬНИМИ КОМПОЗИЦІЯМИ HNO₃-KI

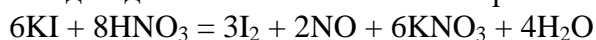
Мичківська Ю.С., Білова Ю.С., Денисюк Р.О.

Житомирський державний університет імені Івана Франка, sula26711@gmail.com

Напівпровідникові матеріали типу A^{II}B^{VI}, а саме монокристалічні Cd_{1-x}Mn_xTe, мають тривимірні фізичні та хімічні властивості. Тому існує величезний попит на цей матеріал при виробництві різних приладів та пристроїв. Тривала робота пристрою залежить від наступних характеристик: поверхні напівпровідника, геометричної форми, наявності дефектів та хімічного складу. Однак є і інша сторона медалі. При виготовленні матеріалів для таких приладів та пристроїв існують суттєві проблеми, пов'язані з нестабільністю, складністю вирощування, недосконалою обробкою та складними умовами роботи робочих елементів з цих матеріалів у різних режимах, а також правильний вибір травильних композицій. Тому формування поверхні монокристалічної підкладки із заданими характеристиками є першочерговим завданням, у зв'язку з чим вивчення закономірностей розчинення цих напівпровідників є дуже актуальним [1].

Метою цього дослідження є вивчення електрохімічного процесу, який відбувається під час розчинення монокристалів Cd_{1-x}Mn_xTe (x = 0,2; 0,3; 0,43; 0,5) у розчині HNO₃-KI-диметилформаміду (ДМФА).

Для дослідження потенціалу використовували монокристали Cd_{1-x}Mn_xTe (x = 0,2; 0,3; 0,43; 0,5), з якого готували електроди, які приклеювали піцеїном до кварцових підкладок. Розчин для травлення готували з використанням калій йодиду (KI), розчиненого в ДМФА. До отриманого розчину додавали відповідний об'єм 68% нітратної кислоти (HNO₃) і витримували його протягом 2 годин для встановлення хімічної рівноваги.



Перед вимірюванням потенціалу розчинення електрода, поверхню електрода протравили поліровальними розчинами та промили 0,2 М водним розчином Na₂S₂O₃ та великою кількістю дистильованої води. Експериментальне дослідження було проведено на пристрої, де електрод порівняння та досліджуваний зразок занурювали в розчин для травлення. Відстані між електродами приділили велике значення, вони мають бути на сталій відстані, на одному рівні і не торкатися стінки скляної посудини в якій знаходиться травник [2].

В роботі [3] було встановлено, що при збільшенні вмісту нітратної кислоти в травнику, тим вищі значення електрохімічного потенціалу монокристалів CdTe та твердих розчинів на його основі. Що стосується розведення травникової композиції лактатною кислотою, воно має незначний вплив на значення ЕРС, а саме це свідчить про те, що органічний розчинник не взаємодіє з поверхнею напівпровідника.

Ми також визначили, що збільшення вмісту HNO₃ у травнику сприяє збільшенню значення електродного потенціалу та утворенню напівпровідникової полірованої поверхні. Це можна пояснити збільшенням концентрації окисника в травильному розчині.

Встановлено, що при збільшенні концентрації Мангану зменшується значення електрохімічного потенціалу (рис.1) тому, що Манган стоїть в ряді активності металів перед воднем і є більш активний ніж Кадмій. Cd_{0,5}Mn_{0,5}Te має найбільший електрохімічний потенціал, а Cd_{0,8}Mn_{0,2}Te найменший. При саморозчиненні CdTe електрохімічний потенціал зростає, а не зменшується, в порівнянні з монокристалами Cd_{1-x}Mn_xTe (x = 0,2; 0,3; 0,43; 0,5), тому що саме в цьому розчині відбувається полірування поверхні напівпровідника. Зниження електродних потенціалів в Cd_{1-x}Mn_xTe (x = 0,2; 0,3; 0,43; 0,5), пов'язано з розпорядкуванням кристалічної ґратки CdTe при заміщенні Кадмію на Манган, який має менший атомний радіус, та ущільненням упаковки кристалу.

Досліджено взаємодію $Cd_{1-x}Mn_xTe$ ($x = 0,2; 0,3; 0,43; 0,5$) з травильними типу HNO_3 - KI - $DMFA$. Встановлено, що чим більша концентрація HNO_3 в травнику, тим вищі електродні потенціали саморозчинення монокристалів. Було встановлено, що зі збільшенням вмісту мангану в складі $Cd_{1-x}Mn_xTe$ зростає швидкість їх хімічного травлення та значення електрохімічного потенціалу.

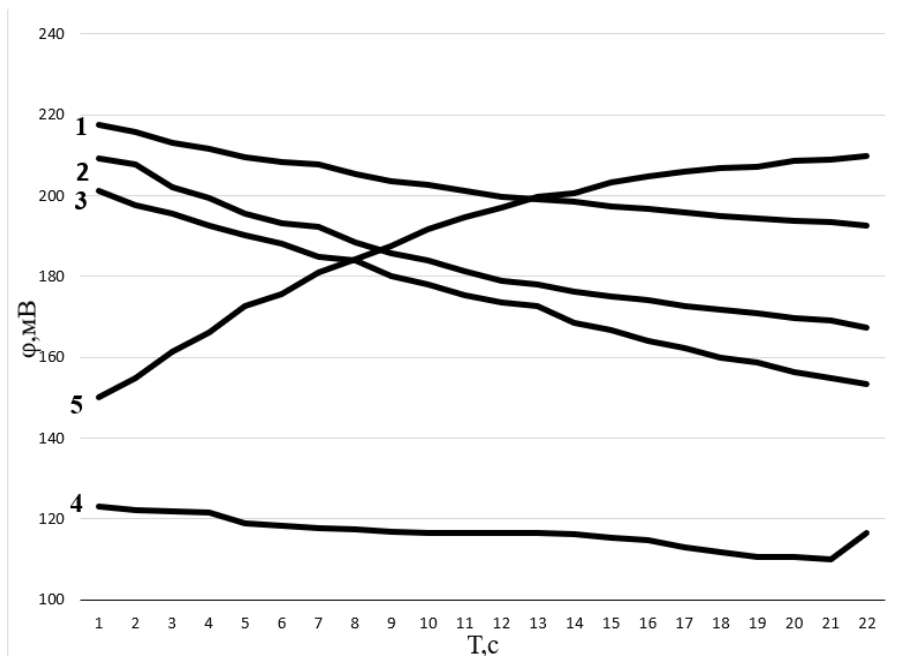


Рис. Електродні потенціали розчинення $Cd_{0.5}Mn_{0.5}Te$ (1), $Cd_{0.57}Mn_{0.43}Te$ (2), $Cd_{0.7}Mn_{0.3}Te$ (3), $Cd_{0.8}Mn_{0.2}Te$ (4), $CdTe$ (5) в травильному розчині $HNO_3 - KI -$ диметилформамід (ДМФА)

1. Денисюк Р.О., Томашик З.Ф., Чернюк О.С., Томашик В.М., Гнатів І.І. Хімічне розчинення монокристалів $CdTe$ та твердих розчинів $Cd_{1-x}Mn_xTe$ в травильних сумішах I_2-HI // Фізика і хімія твердого тіла. – 2009. – Т.10, №1. – С.134-137

2. Чайка М.В., Томашик З.Ф., Денисюк Р.О., Панасюк Д.Ю., Томашик В.М. Електрохімічні процеси при розчиненні $CdTe$ та $Zn_xCd_{1-x}Te$ у водних розчинах $K_2Cr_2O_7 - HBr -$ етиленгліколь // Третя Всеукраїнська наукова конференція. – 2016. – С.245-247

3. Орашкевич Т.О., Денисюк Р.О., Томашик В.М., Гвоздівський Є.Є., Чайка М.В. Електрохімічні процеси при розчиненні напівпровідників на основі $CdTe$ в $HNO_3-HI -$ органічний розчинник // П'ята регіональна науково-практична конференція. – 2016. – С.26-27.

МОДИФІКУВАННЯ ТРУБЧАСТИХ КЕРАМІЧНИХ МЕМБРАН ПІРОВУГЛЕЦЕМ

Огенко В.М.¹, Дубровіна Л.В.^{1,2}, Дубровін І.В.³

¹Інститут загальної та неорганічної хімії ім.В.І.Вернадського НАН України, dubrovina@ua.fm

²Інститут колоїдної хімії та хімії води ім. А.В.Думанського НАН України

³Інститут хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України

Завдяки простоті та дешевизні процесу мембранну фільтрацію з успіхом застосовують для розділення компонентів та усунення забруднюючих речовин у воді і стічних водах. Дослідження в області виготовлення і модифікування мембран спрямовані на підвищення продуктивності мембран, їх селективності, стійкості до забруднення та здешевлення. Цим вимогам цілком відповідають неорганічні керамічні мембрани, які мають чудові термічні і механічні властивості [1]. Раніше ми вже модифікували мембрани піровуглецем з поліізоціанату [2].

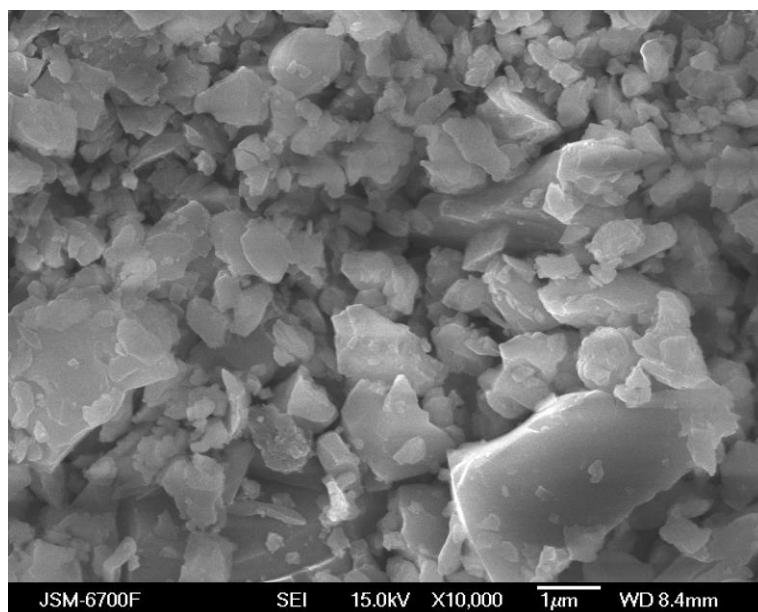
Метою даної роботи було модифікування трубчастих керамічних мембран піровуглецем з полімерних прекурсорів, які синтезовано у порах вихідної мембрани.

Склад мембран вивчали методом рентгенофазового аналізу (РФА) на автоматичному дифрактометрі ДРОН-3М з джерелом випромінення $\text{CuK}\alpha$ ($\lambda = 1.54178\text{\AA}$) в діапазоні кутів від 5 до $70^\circ 2\Theta$. Морфологію поверхні поперечних відколів мембран досліджували за допомогою скануючого електронного мікроскопа JSM-6700F (JEOL, Японія). Для модифікування використовували керамічні мембрани на основі глинистих матеріалів з додаванням шамоту (виробництво Інституту колоїдної хімії та хімії води ім.А.В.Думанського НАН України). Спочатку мембрани просочували водним розчином NiCl_2 . Полімерний прекурсор карбонізації отримували безпосередньо в порах мембран з поліізоціанату (ПІЦ) та розчину сухого молока в дистильованій воді. При карбонізації при 800°C в потоці аргону з полімерів утворюється модифікатор мембран.

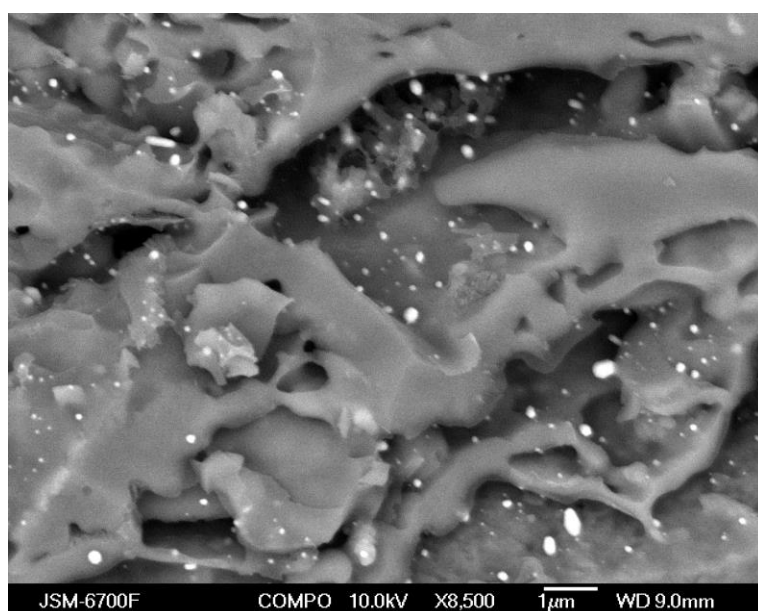
При використанні розчину сухого молока в порах мембрани відбувається цілий ряд реакцій між NCO -групами ПІЦ та компонентами молока і водою [3-4]. При реакції з водою і NH_2 -групами амінокислот утворюються сечовина і вуглекислий газ. Карбоксильні групи всіх кислот, що входять до складу молока, утворюють амідні та ангідридні відповідних кислот. При цих реакціях також виділяється вуглекислий газ. І, нарешті, вуглеводи, що складаються в основному з лактози, містять OH -групи, що реагують з NCO -групами ПІЦ з утворенням уретанових угруповань. Тому, що функціональність ПІЦ більше 2, формується цілий набір полімерів з ПІЦ та компонентів молока, які можна розглядати як псевдо-взаємнопроникну сітку (псевдо-ВПС). При карбонізації цієї сукупності полімерів утворюється модифікатор мембрани - піровуглець, а кальцій і магній, що входять до складу молока, переходять в нерозчинні карбонати. Після карбонізації колір мембран змінився від злегка жовтуватого до чорного з металевим блиском, що свідчить про утворення на поверхні і в порах мембрани піровуглецю і, можливо, графіту.

На дифрактограмах зразків модифікованих мембран рефлекси Карбону виділити неможливо, тому що вони дуже слабкі в порівнянні з рефлексами матеріалу мембрани (концентрація піровуглецю занадто низька). На наявність вуглецю в модифікованих мембранах в порівнянні з вихідною опосередковано показує збільшення відносної інтенсивності рефлексів Карбону $26,0 - 26,6$ і $41,3^\circ 2\Theta$, які перекриваються рефлексами від матеріалу вихідної мембрани. Додатково при карбонізації продуктами піролізу полімерної складової відбувається відновлення з NiCl_2 металевого Ніколу, якій є каталізатором одержання наноструктур вуглецю [2]. На дифрактограмі присутні рефлекси металевого Ніколу при $43,5$ і $51,7^\circ 2\Theta$.

На рис. 1 представлено мікрофотографії поперечних відколів вихідної і модифікованих мембран. У вихідної мембрані чітко видно структурні елементи кераміки (рис. 1а). У модифікованої мембрани (рис. 1б) вся поверхня структурних елементів вихідної мембрани покрита шаром заповнювача з включеннями об'ємних утворень металевого Ніколу різного



а



б

Рис. 1 Мікрофотографії СЕМ поперечних відколів вихідної (а) та модифікованої мембран (б)

розміру (від декількох до сотен нм). Також у порах мембрани знаходяться частинки піровуглецю складної форми (рис. 1б).

1. Anis S.F., Hashaikh R., Hilal N. Microfiltration membrane processes: A review of research trends over the past decade // J. Water Process Engineering. – 2019. – 32, December. – 100941.

2. Goncharuk V.V., Dubrovina L.V., Kucheruk D.D., Samsoni-Todorov A.O., Ogenko V.M., Dubrovin I.V., Water purification of dyes by ceramic membranes modified by pyrocarbon of carbonized polyisocyanate // J. Water Chem. and Technol. – 2016. – 38, № 1. – P.34-38.

3. Горбатова К.К., Гунькова П.И. Биохимия молока и молочных продуктов. - СПб.: ГИОРД, 2010. — 336 с.

4. Саундерс Дж., Фриш К. Химия полиуретанов. – М.: Мир, 1968. – 470 с.

ВИВЧЕННЯ ПРОЦЕСУ ВИЛУГОВУВАННЯ Ti^{4+} З ІЛЬМЕНІТОВОГО КОНЦЕНТРАТУ ІРШАНСЬКОГО РОДОВИЩА (УКРАЇНА)

Писаренко С.В.¹, Камінський О.М.², Чигиринець О.Е.¹, Черненко В.Ю.¹

¹НТТУ «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»,

² Житомирський державний університет імені Івана Франка,

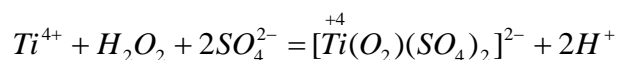
snezhunka1107@gmail.com

На сучасному етапі розвитку косметології та фармакології зростає необхідність у використанні природної не токсичної сировини, що не викликає канцерогенної, мутагенної та алергізуючої дії, не накопичується в органах і тканинах людини тощо. Такою сировиною, наприклад, може бути титановмісна руда (ільменіт), на основі якої одержують гліцерати титану [1].

Одним із джерел ільменітової руди (40 %) в Україні є Іршанське родовище Житомирської області. Особливістю цієї руди є те, що масовий вміст титану (в перерахунку на TiO_2) в ній найбільший в порівнянні з іншими родовищами [2].

Метою даної роботи є вивчення залежності оптичної густини розчинів з різними мольними співвідношеннями компонентів ($FeTiO_3 : KOH$) від довжини хвилі. З метою вивчення ефективності вилуговування іонів Ti^{4+} з мінеральної сировини, було отримано серію плавів з різним мольним співвідношенням $FeTiO_3 : KOH$.

Для підтвердження наявності в утвореному сплаві іонів титану(IV) використовували пероксидний метод, який базується на утворенні кольорових комплексів солей пероксотитанової кислоти за схемою:



Методом фотоколориметрії (КФК-2) встановлено залежності оптичної густини розчинів з різними мольними співвідношеннями компонентів ($FeTiO_3 : KOH$) від довжини хвилі (рис. 1, б).

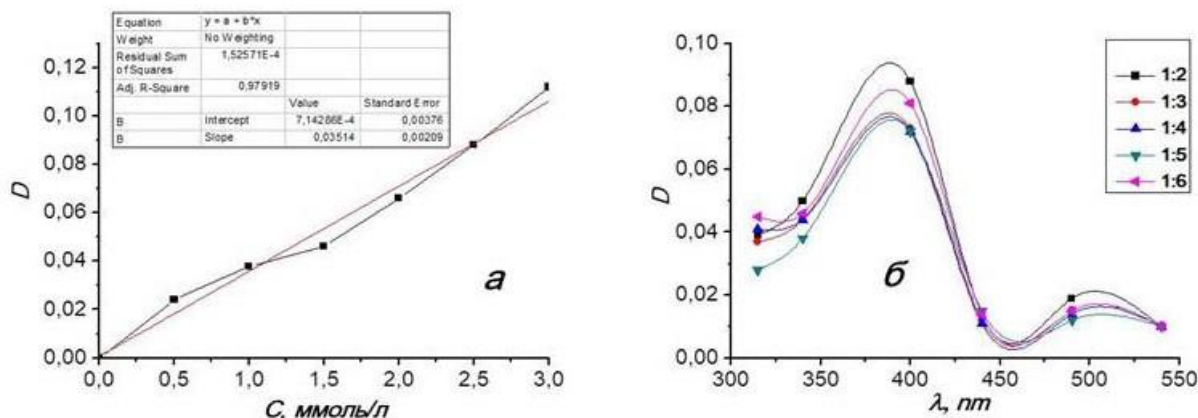


Рис. 1 Калібрувальний графік концентрації Ti^{4+} (а) та залежність оптичної густини розчинів з різними мольними співвідношеннями компонентів від довжини хвилі (б)

Визначено, що при поглинанні світла з довжиною хвилі $\lambda = 400$ нм розчином оптична густина максимальна, що задовільно узгоджується з літературними даними. При мольному співвідношенні $FeTiO_3 : KOH$ (1:2) реакція відбувається з високим вилученням іонів Ti^{4+} .

1. Хонина Т.Г. Синтез и биологическая активность кремнийтитанорганических соединений // Химико-фармацевтический журнал. – 2009. – № 2. – С. 26-32.
2. Zhaia J., Chena P., Suna W., Chenc W., Wanc S.. A review of mineral processing of ilmenite by flotation//Minerals Engineering. – 2020. – 157. – P. 1-11.
3. Fouda M.F.R., Amin R.S., Saleh H.I., Mousa H.A. Extraction of ultrafine titania from black sands broaden on the mediterranean sea coast in egypt by molten alkalis// Australian journal of basic and applied sciences. – 2010. – 4(9). – P. 4256-4265.

НАНОЧАСТКИ В МЕДИЧНІЙ ПРАКТИЦІ: ВІД ДІАГНОСТИКИ ДО ЛІКУВАННЯ

Пімінов О. Ф., Шульга Л. І., Домар Н. А., Губченко Т. Д., Ролік-Аттма С. М.

Національний фармацевтичний університет,

Інститут підвищення кваліфікації спеціалістів фармації, farmtex-ipksf@nuph.edu.ua

Одним з найпоширеніших об'єктів сучасної науки сьогодні виступають наночастки, що широко застосовуються в медичній практиці для діагностики та терапії захворювань, надання поверхням антимікробних властивостей тощо. Наночастки характеризуються надзвичайно малим розміром, що визначає їх специфічні властивості (велика площа поверхні, перенесення молекул, специфічність взаємодії з біологічними структурами). Досягнення нанотехнологій дозволяють отримувати частки із заданим розміром, формою, поверхневим зарядом, що надає можливість їм виступати носіями лікарських речовин, в тому числі й нуклеїнових кислот при цілеспрямованій доставці. Також наночастки знайшли застосування в якості пристроїв для відстеження стовбурових клітин, засобів тераностики раку й агентів візуалізації [6, 7].

Для діагностики захворювань наночастки використовують як *in vitro*, так й *in vivo*. Часто з діагностичною метою застосовують квантові точки та наночастки золота [3, 7]. Діагностичні наночастки також можуть бути завантажені терапевтичними агентами для лікування у післяопераційний період. Ще одне важливе застосування тераностичних агентів – це наночастки, які доставляють терапевтичні агенти в пухлини, відслідковуючи доставку лікарського засобу. Вони дозволяють проводити неінвазивну візуалізацію для отримання інформації про долю лікарського засобу після його введення *in vivo*. Наночастки покривають активними флуоресцентними агентами, зв'язаними з націлюючими лігандами, що призначені для розпізнавання специфічних рецепторів у цільовій тканині. Так, на сьогодні використовуються у клінічній практиці таргетної терапії раку такі наночастки, як антитіла до VEGF (бевацизумаб), антитіла EGFR (цетуксимаб) і антитіла HER2 (трастузумаб). Вони оцінюються як прицільні оптичні зонди для візуалізації. Така прицільна молекулярна візуалізація може ідентифікувати 92% аденокарцином легень і не дає псевдопозитивних результатів у грудній клітці. Задіяння вказаної молекулярної візуалізації сприяє більш повному хірургічному видаленню патологічних тканин [2, 6, 7].

Флуоресцентні наночастки можуть використовуватися для таких же додатків як і флуорофори для візуалізації. Зонди для оптичної візуалізації на основі цільових наночасток розроблені шляхом кон'югування пептидів природних лігандів, антитіл, їх фрагментів і невеликих молекул з наночастками, які мають властивості оптичного відтворення або помічені флуоресцентними барвниками. Останнім часом вони також проходять клінічні дослідження.

Наночастки створюються і для безпосереднього спостереження за процесом доставки. Так, тераностичні наноносії забезпечують загрузку лікарського засобу, а також дають можливість відслідковувати та відображати шлях *in vivo* як транспортера, так і лікарського засобу в організмі. Пухлини людини є дуже гетерогенні за своїми судинними структурами. Ефективність внутрішньопухлинної доставки і розподілу препарату варіюється від виду пухлини. Доставка ліків за допомогою тераностичних наночасток робить можливим неінвазивну їх *in vivo* візуалізацію і дозволяє оцінити реакцію на лікування у ранній стадії. У якості такого інструмента широко використовується флуоресцентні наночастки полімери, квантові точки, наночастки срібла, оксиду заліза тощо [7].

Сьогодні розроблена ефективна система доставки для націлювання як на пухлини, так і на стромальні компоненти на основі феримагнітних нанокластерів. Універсальні ліпідні магнітні наночастки (фериліпосоми) посилюють контрастні властивості МРТ та ефективно поглинаються пухлинами, їх стромальними компонентами. Хімічні сполуки всередині фериліпосом успішно вивільнюються при введенні та візуалізуються як на клітинному, так і тканинному рівні, виконуючи одночасно функцію терапевтичного агента та функцію доставки [1, 6].

Для циркуляції в крові з метою боротьби з інфекціями після хірургічного втручання розробляються наночастки з антибактеріальним покриттям. Під час хіміотерапії деякі пацієнти можуть бути більш чутливими до бактеріальних інфекцій. Однак, з інфекцією не можна боротися з допомогою лише антибіотиків, оскільки останні можуть викликати серйозні побічні ефекти у деяких пацієнтів після операції. Зловживання антибіотиками призводить до появи більш стійких і вірулентних штамів патогенів. У результаті в деяких випадках необхідно прописувати декілька антибіотиків як доповнення до протипухлинних препаратів до і після операції. Частиці можуть бути сконструйовані з антибактеріальними властивостями спеціально для боротьби з бактеріями *in vivo*, що потенційно мінімізує стійкість бактерій [4, 5]. Наприклад, недавно розроблено антибактеріальний лікарський носій, виготовлений з полімерних везикул на основі хітозану, до якого прививають антибактеріальний поліпептид, що вбиває як грампозитивні, так і грамнегативні бактерії. Вказана полімерна везикула має відмінну сумісність з кров'ю і низьку цитотоксичність, що важливо для пацієнтів після операції на пухлині.

Ще однією актуальною проблемою є передача бактеріального забруднення через кнопки, рамки, обладнання у медичних закладах. Для того, щоб нівелювати непряму передачу забруднення з поверхонь, будуть корисними наноадгезивні матеріали, що застосовуються при створенні антимікробних поверхонь. В означеному аспекті заслуговують на увагу поверхні з іммобілізованими антимікробними пептидами, що мають високу і широку антимікробну активність, а також наночастки з іммобілізованими антимікробними лігандами на поверхні для посилення їх протимікробної активності. Так, катіонна поверхнево-активна речовина (ПАР) четвертинного амонію дидодецилдиметиламонію броміду (ДДАБ) була іммобілізована на наночастках кремнезему для отримання антимікробних часток, які показали набагато нижчі мінімальні інгібуючі концентрації проти бактерій і грибів, ніж розчинні ПАР. За результатами доведено, що антимікробна активність наночасток не потребує вимивання ПАР з їх поверхні, властивості наночасток розширюються до віруліцидної активності.

Отже, застосування наночасток в медицині відкриває широкі можливості для діагностики та лікування різноманітних захворювань, що пов'язано з їх унікальними специфічними властивостями та поліфункціональністю.

1. Ananjana K. et al. Amino acid inspired tunable superparamagnetic iron oxide (SPION) nanostructures with high magnetic hyperthermia potential for biofunctional applications // *New Journal of Chemistry*. –2020. – Vol. 44, № 5. – P. 1962-1970.

2. Davis T. A. et al. Capillary electrophoresis analysis of offinity to assess carboxylation of multy-walled carbon nanotubes // *Anal Chim Acta*. – 2018. – Vol. 1027. – P. 149-157.

3. Zheng P. et al. Detection of mercury (II) with a surface-enhanced Raman scattering sensor based on functionalized gold nanoparticles // *Mater. Res. Express*. – 2017. – Vol. 4, № 5: 055017.

4. Rong-Mullins X. et al. Proteomic and genetic analysis of the response of *S. Cerevisiae* to soluble copper leads to improvement of the antimicrobial function of cellulosic copper nanoparticles // *Metallomics*. –2017. –Vol. 9, № 9. – P. 1304-1315.

5. Sadat Maddahi P., Yeganeh M., BadieiabBaghsiyahi F. ZnO nanoparticles as a sensitive platform for detection of nitration in tyrosine and tryptophan: A DFT study // *Materials Chemistry and Physics*. – 2019. – Vol. 237, № 1: 121857.

6. Пімінов О. та ін. Нанотехнології в медицині – тренди галузі *Innovative Approaches to Ensuring the Quality of Education, scientific Research and Technological Processes. Monograph 43* : Katowice : Publishing House of Katowice School of Technology, 2021. – P. 1111-1119.

7. Черноусова С., Еппле М. Наночастинки в медицині // *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*. – 2012. – Т. 10, № 4. – С. 667-685.

ПЛАЗМО-ЕЛЕКТРОЛІТНИЙ СИНТЕЗ КАТАЛІТИЧНИХ ГЕТЕРООКСИДНИХ ПОКРИТТІВ НА СПЛАВАХ ТИТАНУ

Сахненко М.Д., Каракуркчі Г.В., Маркова Н.Б., Степанова І.І.

Національний технічний університет “Харківський політехнічний інститут”,
anyutikukr@gmail.com

Інженерія поверхні (*surface engineering*) об'єднує сучасні та перспективні методи модифікації поверхні конструкційних матеріалів та сплавів, що дозволяє одержувати поліфункціональні покриття із широкою галуззю застосування. З використанням методів інженерії поверхні на даний час вирішуються питання протикорозійного захисту, підвищення зносостійкості, особливо під час експлуатації в екстремальних умовах, зниження рівня забруднення навколишнього середовища, а також багато інших проблем. Одним із способів поверхневої модифікації є метод плазмо-електролітного оксидування (ПЕО), використання якого дозволяє в одному технологічному процесі одержати високорозвинену оксидну матрицю металу-носія та сформувати оксидне покриття із комплексом функціональних властивостей (висока адгезійна та механічна міцність, корозійна стійкість, каталітична активність) [1].

Перспективним напрямом застосування ПЕО є формування каталітичних покриттів на сплавах титану, враховуючи те, що оксид титану володіє високою фотоактивністю і рухливістю нерівноважних носіїв заряду, фотокорозійною стабільністю, біологічною інертністю та високою гідрофільністю, які різко зростають в умовах УФ-опромінення. Введення в оксидну матрицю TiO_2 оксидів перехідних та тугоплавких металів прогнозовано дозволить підвищити активність таких гетерооксидних систем. У підсумку це дозволить використати синтезовані поліфункціональні покриття як основу для безреагентного очищення газових та водних середовищ від токсичних агентів. Можливість автономного використання таких систем є визначальним для впровадження означеного підходу у технології подвійного призначення [2].

Метою даної роботи стало дослідження формування плазмо-електролітних покриттів на титані, допованих оксидами перехідних металів (Cu, Zn) та вивчення їх функціональних властивостей.

ПЕО проводили на титані ВТ1-0 в гальваностатичному режимі в одну стадію за густини струму 4,0-10 А/дм². Час формування покриттів 10-30 хвилин. Використовували лужний електроліт складу, моль/дм³: 0,5-1,0 $K_4P_2O_7$, ZnO 0,1-0,4; $CuSO_4$ 0,4-0,8. ПЕО проводили при постійному перемішуванні та охолодженні робочого розчину до температури 20-30°C. Напруга ПЕО складала 100-150 В. Каталітичну активність одержаних систем досліджували у реакціях розкладання азобарвника метилового жовтогарячого (МЖ) під дією ультрафіолетового (УФ) випромінювання.

ПЕО в зазначених умовах на досліджуваних зразках сформовані рівномірні покриття ZnO-CuO- TiO_2 , що мають високу адгезію до оброблюваного сплаву. Встановлено, що ступінь фотодеструкції МЖ під дією УФ-випромінювання дорівнював 75-85%, що свідчить про наявність фотокаталітичних властивостей у синтезованих гетерооксидних покриттів.

Варіювання складу робочих електролітів та режимів ПЕО забезпечують гнучке керування морфологією поверхневих шарів та складом синтезованих покриттів, що впливає на їх функціональні властивості, зокрема активність у деструкції модельних токсичних агентів.

1. Sakhnenko M., Karakurkchi A., Galak A., Menshov S., Matykin O. Examining the formation and properties of TiO_2 oxide coatings with metals of iron triad //Eastern-European Journal of Enterprise Technologies. – 2017. – Vol. 2, No. 11(86). – pp. 4–10.

2. Галак О. В., Каракуркчі Г. В., Грибинук Я. В. Фільтровентиляційні установки (агрегати) стаціонарні та на бронеоб'єктах // Системи озброєння і військова техніка. – 2016. – № 4(48), – С. 5-9.

рН-ЧУТЛИВІ ОРГАНОКРЕМНЕЗЕМНІ ПЛІВКИ: ВПЛИВ ХІМІЧНОЇ ІММОБІЛІЗАЦІЇ НА ПРОТОЛІТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ АЗОБАРВНИКА

Роїк Н.В., Белякова Л.О.

Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка Національної академії наук України,
roik_nadya@ukr.net

рН-чутливі органокремнеземні плівки, одержані в результаті введення кислотно-основних індикаторів у оптично прозору кремнеземну матрицю, є одними з найбільш перспективних хімічних, біологічних та медичних сенсорів. Зазвичай, введення кислотно-основних індикаторів у кремнеземні плівки здійснюють шляхом імпрегнування [1, 2], допування [3, 4] чи ковалентного зв'язування [5, 6]. рН-чутливі матеріали з ковалентно зв'язаними рН-індикаторами мають суттєві переваги, оскільки забезпечують надійне утримування хімічно закріплених груп та їх швидку відповідь на присутність аналіту. Проте, хімічна іммобілізація рН-індикатора на поверхні носія може призводити до втрати функціональності та суттєвої зміни протолітичних властивостей.

Методом золь-гель синтезу було одержано оптично прозорі органокремнеземні плівки з ковалентно зв'язаним азобензеновим барвником – алізариним жовтим (АЖ). Синтезований матеріал охарактеризовано методами інфрачервоної (ІЧ) спектроскопії, низькотемпературної адсорбції-десорбції азоту та електронної спектроскопії в УФ-видимій області. Для з'ясування впливу ковалентного закріплення на кислотно-основні характеристики рН-чутливих груп, визначено константи кислотної іонізації K_a індивідуального та хімічно іммобілізованого АЖ.

В ІЧ спектрі АЖ-вмісного органокремнеземного матеріалу реєструється широка смуга поглинання при $3700\text{--}3000\text{ см}^{-1}$, що належить валентним коливанням зв'язку О–Н адсорбційно зв'язаних з молекулами води силанольних груп поверхні кремнезему. Крім того, при 2930 та 2870 см^{-1} спостерігаються смуги поглинання валентних коливань зв'язків С–Н алкільних груп. Характеристична смуга поглинання при 1640 см^{-1} зумовлена валентними коливаннями зв'язку С=О та деформаційними коливаннями зв'язку N–N амідної групи, що утримує індикаторний барвник на поверхні кремнезему. Додатковим доказом хімічного закріплення АЖ у синтезованому органокремнеземі є характеристична смуга поглинання при 1340 см^{-1} , що зумовлена валентними коливаннями в групі NO_2 .

Ізотерма низькотемпературної адсорбції-десорбції азоту на АЖ-вмісному органокремнеземі відноситься до типу V у відповідності з класифікацією ІЮПАК та описує адсорбцію на поверхні мезопористого матеріалу з низькою спорідненістю до адсорбату (інтенсивне зростання при $p/p_0 > 0.8$). Величина питомої поверхні, визначена з ізотерми адсорбції азоту за рівнянням БЕТ, складає $27\text{ м}^2/\text{г}$, тоді як об'єм пор, розрахований при $p/p_0 = 0.95$, дорівнює $0.11\text{ см}^3/\text{г}$. Крива розподілу пор за розміром, розрахована за рівноважною моделлю нелокальної теорії функціонала густини, підтверджує мезопористу структуру синтезованого АЖ-вмісного кремнезему з превалюючим діаметром пор близько 10 нм .

Величини pK_a для АЖ розраховували з рН-залежності інтенсивності смуги поглинання при 374 нм . Згідно аналізу результатів спектрофотометричного титрування фосфатних буферних розчинів АЖ, величини pK_{a1} та pK_{a2} складають 3.0 та 10.9 відповідно. Вони відповідають рівновазі між карбоксильною (чи фенольною) гідроксильною групою молекули азобарвника та їх дисоційованими протолітичними формами (Рис. 1а). Іммобілізація АЖ на поверхні кремнезему приводить до суттєвих змін його протолітичних властивостей та, як результат, переходу в інший діапазон рН зміни кольору (Рис. 1б). Аналіз положення ізобестичних точок на електронних спектрах АЖ-вмісної органокремнеземної плівки, зануреної у розчини фосфатного буферу з різним рН, свідчить про те, що рівновага між протолітичними формами поверхневих хромофорних груп досягається при значно нижчих значеннях рН, ніж у випадку АЖ. Хімічна іммобілізація АЖ на поверхні кремнезему за допомогою амідного зв'язку приводить до делокалізації негативного заряду гідроксильної групи за рахунок резонансного ефекту та зумовлює підвищення її кислотності. Іншими

словами, поверхневі АЖ-вмісні групи зберігають свою здатність відповідати зміною кольору на зміну рН завдяки іонізації фенольної групи, що має місце при нижчих значеннях рН, порівняно з індивідуальним АЖ. Визначена за даними спектрофотометричного титрування величина pK_a поверхневих фенольних груп складає 5.5.

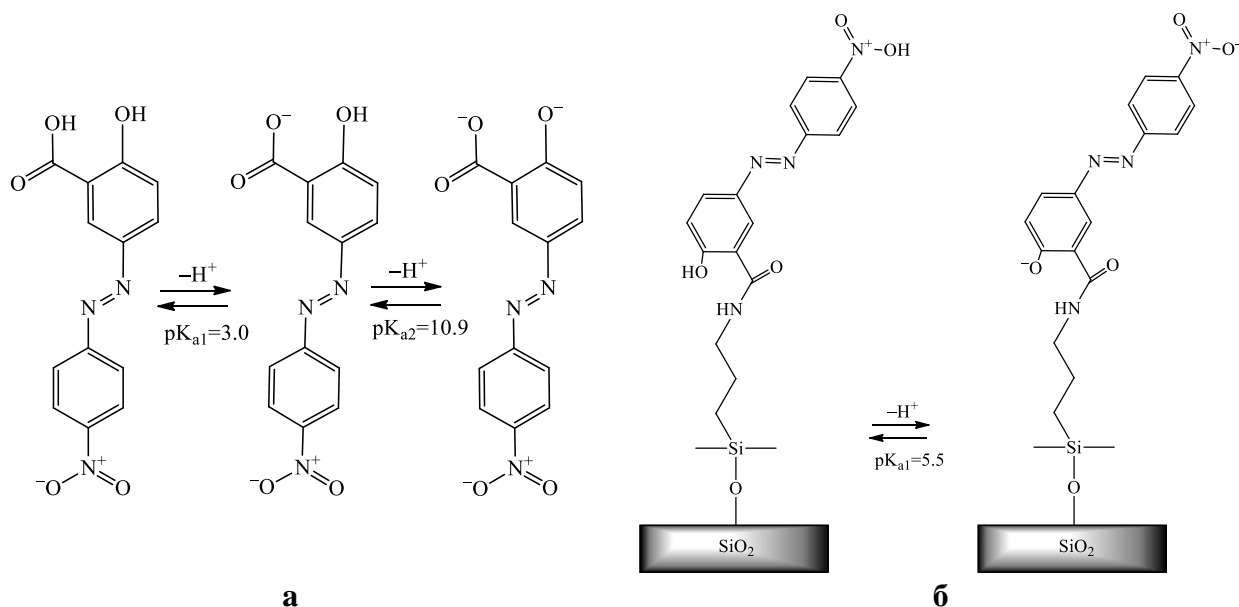


Рис. 1. Протолітичні рівноваги для АЖ (а) та АЖ-вмісного органокремнезему (б).

Таким чином, у даній роботі доведено, що хімічно іммобілізований у поверхневому шарі кремнезему азобензеновий барвник зберігає здатність відповідати зміною кольору на зміну рН середовища завдяки іонізації фенольної групи. Рівновага між протолітичними формами поверхневих АЖ-вмісних груп досягається при значно менших значеннях рН, порівняно з АЖ. При ковалентному зв'язуванні АЖ з поверхнею кремнезему величина pK_a зменшується від 10.9 до 5.5. Синтезована оптично прозора органокремнеземна плівка демонструє високу швидкість та зворотність зміну кольору у відповідь на зміну рН, а також стійкість при повторному зануренні у водні розчини з рН у діапазоні від 1 до 8.

1. Yamaguchi A., Namekawa M., Kamijo T., Itoh T., Teramae N. Acid-base equilibria inside amine-functionalized mesoporous silica // *Anal. Chem.* – 2011. – V. 83. – P. 2939–2946.
2. Oberg K.I., Hodyss R., Beauchamp J.L. Simple optical sensor for amine vapors based on dyed silica microspheres // *Sensors and Actuators B.* – 2006. – V. 115. – P. 79–85.
3. Kowada Y., Ozeki T. Preparation of silica-gel film with pH indicators by the sol-gel method // *J. Sol-Gel Sci. Technol.* – 2005. – V. 33. – P. 175–185.
4. Wu Z., Jiang Y., Xiang H., You L. Understanding the mechanisms of reaction and release of acid-base indicators entrapped in hybrid gels // *J. Non-Crystalline Solids.* – 2006. – V. 352. – P. 5498–5507.
5. Aigner D., Borisov S.M., Fernandez F.J.O., Sanchez J.F.F., Saf R., Klimant I. New fluorescent pH sensors based on covalently linkable PET rhodamines // *Talanta.* – 2012. – V. 99. – P. 194–201.
6. Rottman C., Turniansky A., Avnir D. Sol-gel physical and covalent entrapment of three methyl red indicators: a comparative study // *J. Sol-Gel Sci. and Technol.* – 1998. – V. 13. – P. 17–25.

ФОРМУВАННЯ І ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПІДЛОГОВИХ І НАСТІННИХ ПЛИТ

Салюк О.С. Леонова Н.Г.

Донецький національний університет імені Василя Стуса, saliuk.o@donnu.edu.ua

Керамічна плитка – один із найвідоміших будівельних матеріалів, який не тільки не втрачає своєї популярності, а й продовжує вдосконалюватись з року в рік. Сучасне виробництво керамічної плитки ґрунтується на використанні природних сировинних матеріалів: різноманітних видів глин з додаванням кварцового піску, шпатів та інших додаткових компонентів. Облицювальна кераміка за міцністю, екологічністю та багатьма іншими властивостями перевершує більшість сучасних матеріалів будівельного призначення. Так, обсяг виробництва підлогових і настінних плит в Україні у 2018 р. склав майже 54 млн м², це відповідно на 3 % більше, ніж у 2017 р. Виробництво у 2019 р. збільшилося ще на 3–4 % і прогнозують подальше поступове зростання вітчизняного виробництва.

Метою даної роботи було формування і визначення фізико-хімічних характеристик підлогових і настінних плит.

Процес формування підлогових і настінних плит включав декілька етапів. Перший – приготування прес-порошку для основи плитки. Для виготовлення прес-порошку використовують глину або декілька різних за хімічним складом глин та непластичні матеріали і добавки. Наступний етап – пресування плитки, яке відбувалося на гідравлічних пресах. Тиск та режим пресування залежить від форми та розмірів виробів, щільності і властивостей прес-порошку. Після пресування плитку підсушують у шахтовій сушарці. На наступному етапі плитка піддавалася глазуруванню. Після глазурування та декорування плитка поступала у піч для випалювання.

Після виготовлення плитки визначено її наступні параметри: водопоглинання, зносостійкість, коефіцієнт лінійного розширення, границя міцності на згин і стійкість до агресивних середовищ.

Згідно з ДСТУ Б В. 2.7-283:2011, водопоглинання для досліджуваної настінної плити становить 15,84 %, для досліджуваної підлогової плити 0,07 %. Зносостійкість глазурованої керамічної плитки визначено за методикою PEI (EN ISO 105645.7). Зносостійкість визначають тільки для підлогових плит, у досліджуваних плитах – 3 клас – 750 оборотів.

Встановлено, що для керамічної плитки коефіцієнт лінійного теплового розширення відповідає наступній величині: при підвищенні температури на 1 °С облицювання з керамічної плитки подовжується на 4–8 сотих міліметра з розрахунку на кожен метр вихідної довжини.

Слід звернути увагу, що міжнародний стандарт ЕМ 130 10545.4, який визначає характеристики міцності плитки, розрахований на окремо взятую плитку. Плитка ж у складі суцільного підлогового покриття має в кілька разів більш високе значення максимального навантаження вигину. Границя міцності на згин (R), за ДСТУ Б В. 2.7-283:2011, для настінних плит $R \leq 19,00 \text{ N/мм}^2$, для підлогових $R \leq 45,00 \text{ N/мм}^2$, сила ламання (S): для настінних плит $S \leq 800 \text{ N}$, для підлогових $S \leq 1500 \text{ N}$. Досліджувані плити мають такі показники: границя міцності на згин – для досліджуваної настінної плити $R = 23,89 \text{ N/мм}^2$, для досліджуваної підлогової плити $R = 60,16 \text{ N/мм}^2$, сила ламання – для настінної плити $S = 1150 \text{ N}$, для підлогової плити $S = 2830 \text{ N}$.

Хімічні характеристики керамічної плитки є характеристиками її поверхні і залежать, головним чином, від структури та інших параметрів поверхневого шару. Визначено, що стійкість до дії агресивних середовищ у досліджуваних плитах становить 5 балів (найвищий показник), тому досліджувані плити є хімічно стійкими.

Таким чином, розглянуто процес формування і визначено фізико-хімічні характеристики настінних і підлогових плит. Усі визначені показники знаходяться у межах, зазначених у нормативних документах.

ФІЗИКО-МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ГАЛЬВАНІЧНИХ ПОКРИТТІВ Fe-Co-W

Сарай В.В., Єрмоленко І.Ю., Тур Ю.І., Сахненко М.Д., Каракуркчі Г.В.

Національний технічний університет "Харківський політехнічний інститут",

yutur2021@gmail.com

Фізико-механічні властивості, зокрема адгезія до матеріалу основи, мікротвердість і термічна стабільність є не тільки показниками якості, а й визначальними експлуатаційними характеристиками гальванічних покриттів. Водночас, шорсткість поверхні електролітичних сплавів віддзеркалює ступень розвинення поверхні, що дозволяє прогнозувати структурно чутливі властивості одержаних матеріалів, в т.ч. електрокаталітичні [1].

У роботі представлені результати випробувань механічних властивостей гальванічних покриттів Fe-Co-W, нанесених на основу з низьковуглецевої сталі (Ст3) з комплексних цитратних електролітів складу, моль/л: $\text{Na}_3\text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7 \times 2\text{H}_2\text{O} - 0,5$; $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3 \times 9\text{H}_2\text{O} - 0,075$; $\text{Na}_2\text{WO}_4 \times 2\text{H}_2\text{O} - 0,06$; $\text{CoSO}_4 \times 7\text{H}_2\text{O} - 0,2$; $\text{Na}_2\text{SO}_4 - 0,15$; $\text{H}_3\text{BO}_3 - 0,1$ [2]. Осадження покриттів здійснювали уніполярним імпульсним струмом при $i_k = 4-6 \text{ А/дм}^2$ і тривалості імпульс/пауза $t_i/t_p = 10/10 \text{ мс/мс}$. Елементний склад покриттів визначали за допомогою енергетично-дисперсійної рентгенівської спектроскопії, мікротвердість – на твердомірі ПМТ-3 при навантаженні $P = 0,02-0,2 \text{ кг}$ та витримці 10 с, шорсткість поверхні оцінювали за розрахованими середнє арифметичним R_a і середньоквадратичним R_q амплітудними параметрами за результатами АСМ-аналізу, згідно з міжнародними стандартами ISO 4287/1. Тестування термічної тривкості зразків з покриттям Fe-Co-W здійснювали нагріванням зразків від $50 \text{ }^\circ\text{C}$ до $700 \text{ }^\circ\text{C}$ в атмосфері повітря.

Аналіз морфології поверхні покриттів з вмістом Fe – 45–49, Co – 32–31, W – 23–20 мас.% свідчить про формування глобулярної структури з розмірами агломератів 3–5 мкм, які утворюються меншими за розміром сфероїдами (0,3–0,5 мкм). Результати металографічних досліджень доводять, що нанесені у відпрацьованих режимах електролізу покриття мають високу адгезію до матеріалу основи та зберігають її при поліруванні, підготовці шліфів та інших видів механічної обробки. Параметри шорсткості поверхні R_a і R_q визначені як 0,42 і 0,58 відповідно, що вказує на значне розвинення поверхні, порівняно з матеріалом підкладки, шорсткість якої становить $R_a = 0,033$ і $R_q = 0,043$, і дозволяє віднести одержані матеріали до 8-го класу шорсткості. Встановлено, що зразки з покриттям Fe-Co-W є термічно стійкими в інтервалі температур $50-700 \text{ }^\circ\text{C}$. При підвищенні температури понад $700 \text{ }^\circ\text{C}$ спостерігається утворення накипу на поверхні зразків і збільшення їх маси. Встановлено збільшення мікротвердості покриттів зі зростанням вмісту тугоплавкого компонента в сплаві. Застосування імпульсного струму забезпечує підвищення мікротвердості сплавів Fe-Mo-W до $\sim 700 \text{ кгс/мм}^2$, що робить їх конкурентоздатними по відношенню до покриттів електролітичним хромом [3].

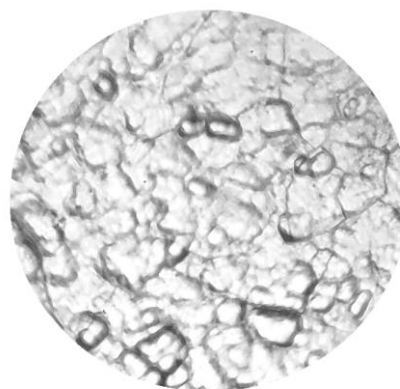


Рис. Морфологія покриттів Fe-Co-W. Збільшення $\times 40$ разів

1. Yermolenko I.Yu., Ved M.V., Sakhnenko N.D., Sachanova Y.I. Composition, Morphology, and Topography of Galvanic Coatings Fe-Co-W and Fe-Co-Mo. *Nanoscale Research Letters*. – 2017. – Vol. 12. – P. 352.

2. Єрмоленко І.Ю., Ведь М.В., Сахненко М.Д. Електроосадження тернарних покриттів Fe-Co-W з цитратного електроліту. *Вісник НТУ «ХПІ»*. Х.: НТУ «ХПІ», 2017. – № 48(1269). – С. 102–108.

3. Yar-Mukhamedova G., Ved' M., Yermolenko I., Sakhnenko N., Karakurkchi A., Kemelzhanova A. Effect of electrodeposition parameters on the composition and surface topography of nanostructured coatings by tungsten with iron and cobalt//*Eurasian Chemico-Technolog. Journal*. – 2020. – 22. – P. 19–25.

ЛІКВІДУС СИСТЕМИ $Tl_2Se-CdSe-SnSe_2$

Селезень А.О., Олексеюк І.Д., Піскач Л.В.

Волинський національний університет ім. Лесі Українки, andrijandrij1993@gmail.com

Методами рентгенофазового та диференційно-термічного аналізу досліджено фазові рівноваги та побудовано поверхню ліквідусу системи $Tl_2Se-CdSe-SnSe_2$. Дослідження квазіпотрійної системи $Tl_2Se-CdSe-SnSe_2$ зумовлене пошуком нових тетрарних сполук і твердих розчинів для напівпровідникового матеріалознавства.

Для синтезу зразків використовували прості речовини (Tl, Cd, Sn, Se) чистотою не менше 99,99% основного компонента. Синтез здійснювали у вакуумованих кварцових контейнерах одноступеневим високотемпературним методом у печі шахтного типу. Максимальна температура становила 1320 К для зразків до 80 мол. % CdSe і 1420 К – для інших зразків. Гомогенізуючий відпал проводили при 570 К протягом 350 год., після чого загартовували їх у 20 %-ий розчин NaCl. Порошкові спектри синтезованих зразків одержували на приладі ДРОН 4-13, термографічні дослідження – на дериватографі системи Паулік-Паулік-Ердеї з Pt/Pt-Rh термопарою.

Система утворена трьома квазібінарними перерізами: $Tl_2Se-CdSe$, $CdSe-SnSe_2$ та $Tl_2Se-SnSe_2$, вихідні компоненти яких є бінарними напівпровідниковими сполуками, що плавляться конгруентно та мають вузькі області гомогенності. Для побудови поверхні ліквідусу квазіпотрійної системи $Tl_2Se_3-CdSe-SnSe_2$ вивчали 57 сплав концентраційного трикутника. Ідентифікацією підтверджено існування бінарних і потрійних сполук: Tl_2Se , $CdSe$, $SnSe_2$, Tl_4SnSe_4 , Tl_2SnSe_3 та $Tl_2Sn_2Se_5$. Побудовано поверхню ліквідусу квазіпотрійної системи $Tl_2Se-CdSe-SnSe_2$. В досліджуваній квазіпотрійній системі перерізи $Tl_2Se-CdSe$, Tl_4SnSe_4-CdSe та Tl_2SnSe_3-CdSe є квазібінарними в усьому досліджуваному концентраційному та температурному інтервалах. Встановлено область первинної кристалізації $BTM-Tl_2CdSnSe_4$, яка утворюється за перитектичним процесом: $L_p + \beta-CdSe \leftrightarrow BTM-Tl_2CdSnSe_4$. У системі, що розділена 15 моноваріантними кривими та 15 нонваріантними точками, протікає сім евтектичних і два перитектичних подвійних процеси та по три евтектичних і перитектичних потрійних процеси (табл. 1).

Таблиця

Нонваріантні процеси у квазіпотрійній системі $Tl_2Se-CdSe-SnSe_2$

№	Нонваріантна точка	Нонваріантний процес	T, K
1	e_1	$L \leftrightarrow \alpha-Tl_2Se + \beta-CdSe$	622
2	e_2	$L \leftrightarrow \alpha-Tl_2Se + \gamma-Tl_4SnSe_4$	633
3	e_3	$L \leftrightarrow \gamma-Tl_4SnSe_4 + \delta-Tl_2SnSe_3$	693
4	e_4	$L \leftrightarrow \delta-Tl_2SnSe_3 + Tl_2Sn_2Se_5$	694
5	e_5	$L \leftrightarrow \varepsilon-SnSe_2 + \beta-CdSe$	891
6	e_6	$L \leftrightarrow \gamma-Tl_4SnSe_4 + \beta-CdSe$	703
7	e_7	$L \leftrightarrow \delta-Tl_2SnSe_3 + BTM-Tl_2CdSnSe_4$	711
8	E_1	$L \leftrightarrow \alpha-Tl_2Se + \beta-CdSe + \gamma-Tl_4SnSe_4$	592
9	E_2	$L \leftrightarrow \gamma-Tl_4SnSe_4 + \delta-Tl_2SnSe_3 + \beta-CdSe$	665
10	E_3	$L \leftrightarrow \delta-Tl_2SnSe_3 + \varepsilon-SnSe_2 + \beta-CdSe$	656
11	p_1	$L + \varepsilon-SnSe_2 \leftrightarrow Tl_2Sn_2Se_5$	732
12	p_2	$L + \beta-CdSe \leftrightarrow BTM-Tl_2CdSnSe_4$	860
13	P_1	$L + \beta-CdSe \leftrightarrow \gamma-Tl_4SnSe_4 + BTM-Tl_2CdSnSe_4$	683
14	P_2	$L + \beta-CdSe \leftrightarrow BTM-Tl_2CdSnSe_4 + \varepsilon-SnSe_2$	773
15	P_3	$L + \varepsilon-SnSe_2 \leftrightarrow BTM-Tl_2CdSnSe_4 + Tl_2Sn_2Se_5$	668

ОТРИМАННЯ ЕВТЕКТИЧНИХ КОМПОЗИТІВ В СИСТЕМІ $\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{Y}_2\text{O}_3$ МЕТОДОМ ГОРИЗОНТАЛЬНОЇ СПРЯМОВАНОЇ КРИСТАЛІЗАЦІЇ

Сірик Ю.В., Вовк О.М., Гринь Л.О., Романенко А. О., Ніжанковський С.В.

Інститут монокристалів НАН України, lab15oxydal@gmail.com

Евтектичні композити на основі тугоплавких оксидів викликають значний інтерес, так як ці композити демонструють високі механічні характеристики при високих температурах [1, 2]. Наприклад, евтектичний композит $\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ (YAG, ітрій-алюмінієвий гранат) має міцність на вигин 360–500 МПа від кімнатної температури до 2073 К на повітрі. Межа повзучості при стисканні при 1873К приблизно в 13 разів перевищує таку в спечених композитах однакового хімічного складу. Отже, завдяки своїми механічними властивостями евтектичні композити на основі Al_2O_3 , можуть використовуватися при високих температурах.

Метою представленої роботи було встановлення умов отримання евтектик $\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{YAG}$ методом горизонтальної спрямованої кристалізації (ГСК) в захисному відновному середовищі. Головною перевагою метода ГСК є можливість отримання великих за розміром кристалічних пластин та керування вмістом і розподілом компонент і домішок в злитку, що впливають на функціональні характеристики. Застосування захисних відновних середовищ дозволяє використовувати тонкостінні молібденові тиглі для кристалізації високотемпературних оксидних розплавів та зменшити випаровування компонент.

Вирощування проводилось на установці «Горизонт-3» в середовищі Ar , CO і H_2 при загальному тиску в кристалізаційній камері на рівні $1,3 \times 10^5$ Па, температура та швидкості витягування наведені в таблиці. В якості сировини використовувалась шихта з порошоків 81.5 мол.% Al_2O_3 (99.999%) та 18.5 мол.% Y_2O_3 (99.999%) у вигляді таблеток. Після кристалізації злитки охолоджувались до 1000 °С протягом 12 год., а потім до кімнатної температури протягом 24 год.

Таблиця

Режими кристалізації евтектик на основі $\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{Y}_2\text{O}_3$

Зразок (кристал)	Швидкість витягування, мм/г	Температура розплаву, °С	Евтектичні фази
1	30	1925	$\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$
2	15	1945	$\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{YAlO}_3$
3	5	1900	$\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$

Було отримано кристалічні злитки розміром 30x25x70 мм³ (Рис. 1). Згідно рентгенофазового аналізу зразки **1** та **3** складаються з фаз корунду (Al_2O_3) та гранату (YAG) див рис. 2г), 2е), а зразок **2** з фаз Al_2O_3 та алюмінату ітрію YAlO_3 із структурою перовскіту (YAP), (рис. 2д). Мікроструктура зразків, що визначалась за допомогою скануючої електронної мікроскопії (СЕМ) (див. рис 2 а)-в)), характерна для евтектичних сплавів, а саме, зразкам **1**, **3** притаманна морфологія евтектики $\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{YAG}$, зразок **2** характеризується морфологією метастабільної евтектики $\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{YAP}$, хоча склад шихти відповідає евтектиці $\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{YAG}$.

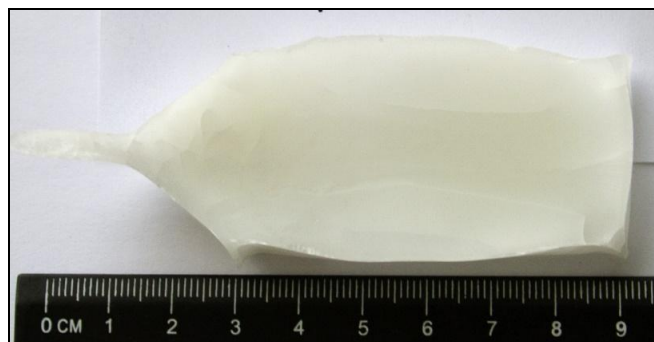


Рис. 1 Вигляд вирощеного кристала

Встановлено вплив швидкості кристалізації і температури розплаву на морфологію кристалів. Порівняння морфології зразків **1** та **3** вказує, що при зменшенні швидкості кристалізації характерна міжфазна відстань збільшується, що призводить до укрупнення мікроструктури вирощеної евтектики Al_2O_3 -YAG. Підвищення температури розплаву вище певного значення призводить до кристалізації метастабільної евтектики Al_2O_3 -YAP (зразок **2**), яка у порівнянні з евтектикою Al_2O_3 -YAG має більш дрібнозернисту структуру.

Таким чином в роботі показано, що метод ГСК придатний для отримання евтектичних композитів в системі Al_2O_3 - Y_2O_3 , і за допомогою режимів кристалізації можна керувати морфологією і фазовим складом цих композитів.

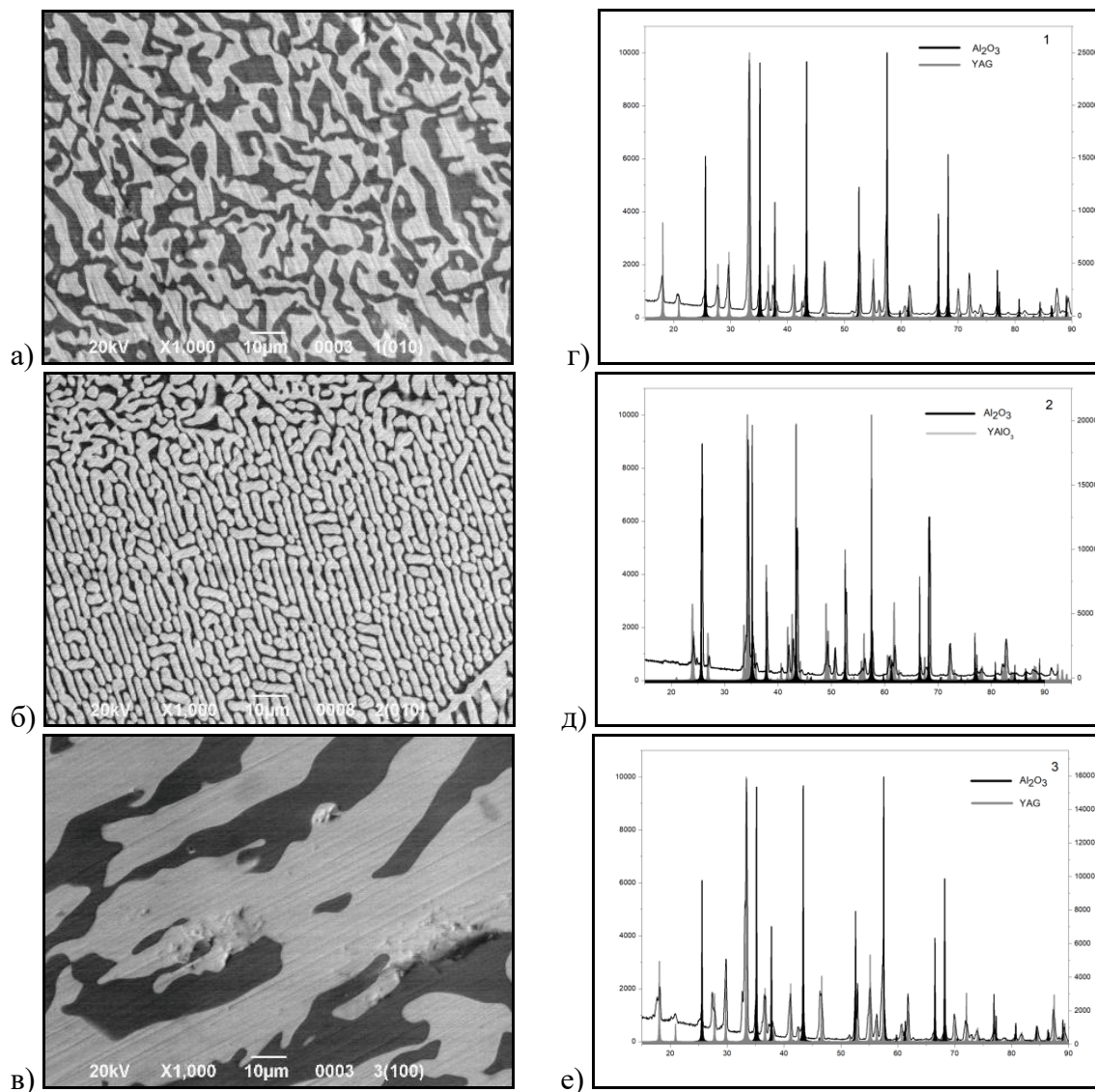


Рис. 2 СЕМ зображення мікроструктури зразків: а) -1, б) -2, в) -3, та рентгенівські дифрактограми зразків г) -1, д) -2, е) -3. На СЕМ зображеннях темна фаза - Al_2O_3 , світла фаза - YAG в зразках **1,3**, YAP в зразку **2**

1. Ying Nie, Mingfu Zhang, Yang Liu, Yequan Zhao, Microstructure and mechanical properties of Al_2O_3 /YAG eutectic ceramic grown by horizontal directional solidification method // Journal of Alloys and Compounds. – 2016. – 657. – P. 184-191

2. Xue-song Fu, Lian-sheng Fu, Guo-qing Chen, Wen-bo Han, Wen-long Zhou, High temperature deformation of non-directionally solidified Al_2O_3 /YAG/ ZrO_2 eutectic bulk ceramic // Ceramics International. – 2017. – 43, 2. – P. 1781-1787

ГАЗОРОЗПИЛЕНІ ПОРОШКИ ДЛЯ ВИСОКОЕФЕКТИВНИХ МАГНІТНИХ МАТЕРІАЛІВ

Терновий Ю.Ф., Лічконенко Н.В.

Інженерний навчально-науковий інститут Запорізького національного університету
nvlichkon75@ukr.net

Сучасний світ неможливо уявити без постійних магнітів. Вони застосовуються в автомобілебудуванні, комп'ютерній і офісній техніці, побутовій електроніці, медицині, електротехнічній промисловості. Найпершим рукотворним постійним магнітом була загартована вуглецева сталь (Гілберт, 1600 р.), яку використовували в основному для створення зброї. Однак вона мала низькі магнітні властивості. На зміну вуглецевої прийшли леговані сталі (1880 р.), а потім в 1917 р. в Японії були відкриті кобальтові сталі (до 35-40% *Co*), які використовувались в якості матеріалів для постійних магнітів [1].

У наш час попит на постійні магніти продовжує постійно зростати в зв'язку з їх використанням в пристроях для отримання «чистої» енергії – електромобілях, вітряних турбінах тощо.

Магнітно-тверді матеріали - це матеріали, що володіють великою коерцитивною силою, високою залишковою магнітною індукцією і низькою магнітною проникністю [2]. Поліпшення властивостей магнітно-твердого матеріалу полягає в тому, щоб отримати якомога більше значення залишкової індукції і високе значення коерцитивної сили. Такі властивості гарантують високе значення максимальної магнітної енергії, яка є однією з найбільш важливих характеристик магнітно-твердого матеріалу [3]. Крім основних характеристик магнітно-твердих матеріалів велике значення мають криві повернення і оборотна проникність, яка характеризує цикли гістерезису, а також стабільність магнітних властивостей [4]. На сьогоднішній день існують різні принципи класифікації магнітно-твердих матеріалів [4]. За складом і способом отримання їх підрозділяють на литі, порошкові та інші матеріали для постійних магнітів. Метод порошкової металургії є більш перспективним ніж метод лиття. Методом лиття важко виготовляти дрібні магніти масою до 200 г, особливо складної форми. Вихід придатної продукції при литті дрібних деталей становить 10-20%, а методом порошкової металургії – 95-98%. Крім того, порошкова металургія дозволяє отримувати вироби практично без припусків на обробку і забезпечити високі магнітні характеристики [5].

В даний час значну частину порошкових магнітно-твердих матеріалів виготовляють із сплавів на основі *Nd-Fe-B*. Ця інтерметалідна сполука має тетрагональну кристалічну структуру з 68 атомами в елементарній чарунці, її магнітні властивості складають: намагніченість насичення $4\pi I_s = 1,6$ Тл, температура Кюрі ~ 315 °С, константа анізотропії $K_1 = 5$ МДж/м³. Сполука *Nd₂Fe₁₄B* стала основою для створення постійних магнітів, які зараз володіють найвищими значеннями магнітної енергії до 440 кДж/м³ (теоретична межа 512 кДж/м³) [6]. Їх магнітна енергія в 8-10 разів вище, ніж у феритових магнітів, в 5-10 разів – магнітів класу Альніко і в 2-3 рази - *Sm-Co* магнітів.

Магніти на основі хімічної сполуки *Nd₂Fe₁₄B* можна виготовляти різними методами – відцентровим розпиленням, високошвидкісним загартуванням з наступним пресуванням і спіканням в атмосфері аргону. В результаті реалізації різних технологій отримання постійних магнітів зі швидко загартованих сплавів на основі *Nd-Fe-B* отримують ізотропні композиційні магніти, ізотропні гарячепресовані магніти і анізотропні гарячедеформовані магніти [5-6]. Однак аморфний стан частинок сплавів на основі системи *Nd-Fe-B* може забезпечити і газове розпилювання струменя розплаву, як більш технологічний і високопродуктивний метод.

На базі УКрНДІспецсталі за участю авторів виконана робота по отриманню порошкових сплавів системи *Nd-Fe-B* за низького тиску газу-енергоносія (1,0-1,6 МПа) у вигляді сферичних частинок. При оптимальних параметрах вихід сферичних частинок становив понад 76% ваг.

Проведені дослідження магнітних властивостей отриманих магнітопластів (наповнювач – епоксидна смола) з газорозпиленого порошку в початковому і відпаленого стані ($T > T_{кр}$) показують, що відпал істотно підвищує значення коерцитивної сили (H_c) дрібнодисперсних порошків, що в першу чергу пов'язано з кристалізацією аморфного стану і формуванням фази $Nd_2Fe_{14}B$ з розміром зерна 0,1-1,0 мкм. Так, відпал при $T=773-973$ К підвищує H_c в середньому в чотири рази. Найбільше зростання магнітних властивостей спостерігається в сплавах з підвищеним вмістом неодиму та бору.

Порошки системи $Nd_2Fe_{14}B$, отримані методом газового розпилення, використовують в якості магнітно-твердого матеріалу для виробництва високоенергетичних постійних магнітів для мікродвигунів, малогабаритних електронних приладів, вимірювальних приладів тощо. Ці магнітопласти відрізняються високим ступенем точності і однорідності магнітних характеристик.

1. Pareti L., Bolzoni F., Leccabue F., Ermakov A.E. Magnetic anisotropy of MnAl and MnAlC permanent magnet materials // J. Appl. Phys. – 1986. – 59. – P. 3824–28/
3. Гиршов В.Л., Котов С.А., Цеменко В.Н. Современные технологии в порошковой металлургии. – С-Пб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2010. – 385 с.
4. Кекало И.Б., Самарин Б.А. Физическое металловедение прецизионных сплавов. Сплавы с особыми магнитными свойствами. – М.: Металлургия, 1989. – 496 с.
5. Д. Д. Мишин. Магнитные материалы. – М.: Высшая школа, 1981. – 335с.
6. Терновой Ю.Ф., Пашетнева Н.Н., Воденников С.А. Полуфабрикаты и изделия из распыленных металлических порошков. – Запорожье: Издательство ЗГИА, 2010. – 184 с.
7. Кекало И.Б., Менушенков В.П. Быстрозакаленные магнито-твердые материалы системы Nd-Fe-B. – М.: МИСиС, 2000. – 118 с.

ЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ФОТОЧУТЛИВИХ ГЕТЕРОСТРУКТУР $n\text{-SnS}_2/p\text{-InSe}$, ВИГОТОВЛЕНИХ МЕТОДОМ СПРЕЙ-ПРОЛІЗУ

Ткачук І.Г.^{1,3}, Орлецький І.Г.², Ковалюк З.Д.¹

¹Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України,
Чернівецьке відділення,

²Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,

³Буковинський державний медичний університет, ivan.tkachuk.1993@gmail.com

Тонкі плівки сульфідів олова (SnS , SnS_2 , Sn_2S_3) характеризуються різним фазовим складом, який визначає їх основні фізичні властивості. Плівки дисульфиду олова SnS_2 з шириною забороненої зони $E_g \approx 2,45\text{eV}$ придатні для виготовлення фронтального шару фотоприймачів на основі гетеропереходів. Плівка SnS_2 містить хімічні елементи Sn і S, які широко розповсюджені, мають невисоку собівартість і малотоксичні.

Моноселенід індію InSe за значенням ширини забороненої зони $E_g = 1.2$ eВ відноситься до придатних матеріалів для фотоелектричного перетворення енергії в наземних умовах. Шарувата структура кристалів InSe зі слабким Ван-дер-Ваальсівським зв'язком обумовлює зручність у виготовленні підкладок для гетероструктур і позбавляє операцій різання злитків на пластини та їх механічної і хімічної обробки. З використанням селеніду індію створені фоточутливі і діодні структури різних типів.

Для одержання структур $n\text{-SnS}_2/p\text{-InSe}$ використовували вирощені методом Бріджмена кристали селеніду індію p -типу провідності. Для діркової електропровідності здійснювалося легування домішкою Cd (0.1 % за масою). За даними дослідження ефекту Холла концентрація носіїв заряду становила $p \approx 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ і їх рухливість перпендикулярно до вісі симетрії С в InSe при температурі 295 К дорівнювала $\mu_{pH} \approx 50 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$.

Дослідження I - V -характеристик в інтервалі напруг $-3 \text{ V} < V < 3 \text{ V}$ при температурах від $T = 243 \text{ K}$ до $T = 333 \text{ K}$ вказували на здатність гетероструктури $n\text{-SnS}_2/p\text{-InSe}$ випрямляти струм (рис.1). Пряме зміщення гетеропереходу відповідало прикладанню позитивного потенціалу до базової області $p\text{-InSe}$, зворотне зміщення – позитивному потенціалу на плівці $n\text{-SnS}_2$.

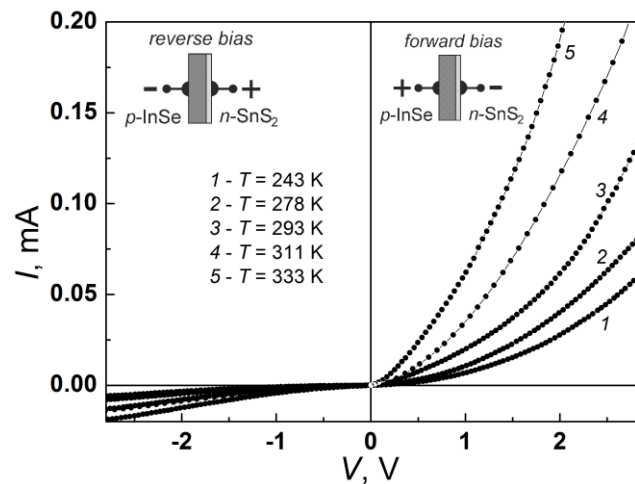


Рис. 1 I - V -характеристики гетероструктури $n\text{-SnS}_2/p\text{-InSe}$ в температурному діапазоні від $T = 243 \text{ K}$ до $T = 333 \text{ K}$

Струм у базовій області $p\text{-InSe}$ гетероструктури $n\text{-SnS}_2/p\text{-InSe}$ протікає у перпендикулярному напрямку відносно площини шарів кристалу. Це обумовлює виникнення у структурі значного послідовного опору R_s . При прямому зміщенні, внаслідок зменшення опору електричного переходу вся зовнішня напруга, починаючи з певного значення, прикладається до високоомної базової області $p\text{-InSe}$.

При збільшенні температури зменшується опір базової області $p\text{-InSe}$ і для виникнення достатньої напруженості електричного поля space charge limit області необхідна більша пряма напруга. На I - V -характеристиках гетероструктури $n\text{-SnS}_2/p\text{-InSe}$ при $T = 333 \text{ K}$ space charge limit спостерігається при більшому прямому зміщенні $V > 1.6 \text{ V}$. У області менших прямих напруг, при яких у координатах $\ln I = f(\ln V)$ значення $m = 1.6 - 1.7$, механізми формування прямого струму визначаються енергетичним бар'єром на гетеропереході $n\text{-SnS}_2/p\text{-InSe}$.

Для з'ясування механізму утворення прямого струму крізь енергетичний бар'єр гетеропереходу $n\text{-SnS}_2/p\text{-InSe}$ проводився аналіз I - V -характеристики у координатах $\ln I = f(V)$ у діапазоні напруг $3kT/q < V < 1.6 \text{ V}$. В температурному інтервалі $T = 243 - 333 \text{ K}$ залежності $\ln I = f(V)$ характеризуються незалежним від температури нахилом $d(\ln I)/dV$. Коефіцієнт неідеальності змінювався в межах $3.5 < A < 20$. Високі значення A у подібних до досліджуваних структур гетеропереходах $p\text{-Ge}/n\text{-Si}$ ($A = 24.9 - 29.4$) є результатом тунельного або тунельно-рекомбінаційного механізмів протікання носіїв заряду крізь бар'єр. З даних досліджень було встановлено, що при прямих зміщеннях $V < 0.6 \text{ V}$ ($T \approx 290 \text{ K}$) основним механізмом проходження струму є тунелювання електронів з дна зони провідності $n\text{-SnS}_2$ крізь бар'єр на стани у забороненій області $p\text{-InSe}$ з наступною рекомбінацією з дірками валентної зони. Швидкість наростання з тунельного струму від напруги при підвищенні температури збільшується через зростання концентрації електронів у зоні провідності $n\text{-SnS}_2$. При прямих напругах $V > 0.6 \text{ V}$ ($T \approx 290 \text{ K}$) спад зовнішньої напруги зосереджується на високоомній базовій області $p\text{-InSe}$ і реалізується механізм space charge limit. При підвищенні температури напруга прояву space charge limit збільшується до $V = 1.6 \text{ V}$ ($T \approx 330 \text{ K}$). Зворотний струм у діапазоні досліджуваних напруг $-3 \text{ V} < V < 0 \text{ V}$ у гетероструктурі $n\text{-SnS}_2/p\text{-InSe}$ формується тунелюванням електронів з дна зони провідності і енергетичних станів забороненої зони $E_{C2} - E_F = 0.3 - 0.4 \text{ eV}$ $p\text{-InSe}$ у зону провідності $n\text{-SnS}_2$ крізь енергетичний бар'єр утворений In_2Se_3 .

ВПЛИВ ВУГЛЕЦЕВОГО ВОЛОКНА НА ФІЗИКО-МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ПОЛІТЕТРАФТОРЕТИЛЕНУ

Томіна А.-М. В.¹, Калініченко С.В.²

¹Дніпровський державний технічний університет, an.mtomina@gmail.com

²ТОВ «СПЕЦТЕХОСНАСТКА»

Стабільну та надійну роботу вузлів тертя технологічного обладнання сучасної техніки забезпечують полімерні композиційні матеріали (ПКМ), у тому числі на основі фторполімерів. Використання фторполімерної матриці дозволяє отримати деталі з низьким коефіцієнтом тертя (без використання мастильних засобів) [1], здатністю роботи в хімічно активному чи інертному середовищі [2], низькою вагою, можливістю працювати практично безшумно, стійкістю до вібрацій, динамічних і втомних навантажень тощо [3].

Політрифторхлоретилен [-CF₂-CFCl-] був обраний як матриця для створення ПКМ. Даний полімерний матеріал характеризується високою хімічною стійкістю та пластичністю. Вироби на основі політрифторхлоретилену можуть експлуатуватися при температурах від 78 К до 403 К (еластичні) або навіть до 463 К (кристалічні) залежно від їх режиму формування.

Як наповнювач для фторполімерів широкого розповсюдження набули вуглецеві волокна. Так, їх використання дозволяє отримати композит із покращеним комплексом триботехнічних і фізико-механічних характеристик [4].

Приготування ПКМ на основі політрифторхлоретилену, що містять 5-20 мас.% дискретного (2-4 мм) вуглецевого волокна марки Toray T700SC (виробник компанія «Toray Group», Японія), здійснювали методом компресійного пресування. Фізико-механічні властивості вихідного полімеру та композиту на його основі визначали на машині FP-100 [5].

На рис. 1 наведено залежності напруження (σ , МПа) від деформації (ϵ , %).

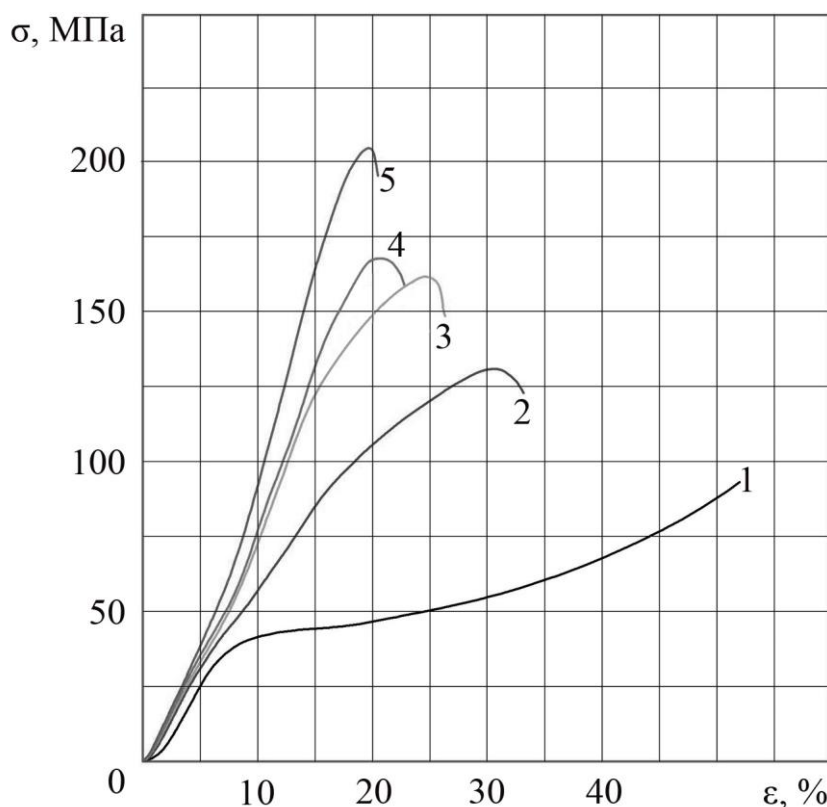


Рис. 1 Залежність напруження (σ , МПа) від деформації (ϵ , %) політрифторхлоретилену (1) і композитів на його основі, армованих 5 (2); 10 (3); 15 (4); 20 (5) мас. % волокна

Вивчення залежності «напруження (σ) – відносна деформація (ϵ) при стисненні» вихідного полімеру та композитів на його основі показало (рис.1), що крива деформації

ненаповненого фторопласту згідно з класифікацією Херцберга [6] належить до V типу, який характеризує пружну гетерогенно-пластичну поведінку.

В той час як ПКМ, що містять від 5 і до 20 мас.% волокна, відповідно до класифікації Херцберга належить до кривих II типу — характеризують пружну гомогенно-пластичну поведінку, яка призводить до незворотних змін форми зразків (про що свідчить відсутня межа плинності): введення волокна зменшується здатність до пластичної деформації ПКМ, унаслідок чого відбувається крихке руйнування зразків (табл.1).

Таблиця 1

Загальний вигляд зразків після стиснення

Вміст волокна, мас. %	0	5	10	15	20
Загальний вигляд зразка					

Введення вуглецевого волокна Toray T700SC призводить до покращення міцнісних характеристик вихідного полімеру (табл. 2).

Таблиця 2

Вплив вуглецевого волокна на фізико-механічні властивості політрифторхлоретилену

Показник	Вміст волокна, мас. %				
	0	5	10	15	20
Межа пропорційності ($\sigma_{\text{пр}}$), МПа	27	28	33	35	56
Межа міцності ($\sigma_{\text{в}}$), МПа	-	131	162	168	204
Модуль пружності (E), МПа	455	670	812	875	900

Загалом аналіз фізико-механічних характеристик розроблених ПКМ свідчить, що використання вуглецевого волокна марки Toray T700SC 5-20 мас.% як наповнювача для політрифторхлоретилену є перспективним шляхом підвищення модуля пружності та межі пропорційності в 1,5-2 й 1,3-2 рази відповідно. Високі показники механічних характеристик розроблених ПКМ дозволяють їх рекомендувати для виготовлення деталей рухомих з'єднань машин і механізмів, що використовуються у різноманітних сферах сучасної промисловості: текстильної, металургійної, сільськогосподарської тощо.

1. Машков Ю.К., Байбарацкий А.А., Сырьева А.А, Кургузова О.А. Новые износостойкие полимерные композиты материалов с углеродными наномодификаторами // Новые материалы и технологии в машиностроении. – 2011. – №14. – С. 67–70.

2. Машков Ю.К., Кургузова О.А., Рубан А.С. Разработка и исследование износостойких полимерных нанокомпозитов // Вестник СибАДИ. – 2018. – Т. 15, № 1 – С. 36 А.С. 45.

3. Петрова П.Н., Федоров А.Л. Исследование модифицирующего влияния различных моторных масел на триботехнические свойства ПТФЭ и композитов на его основе // Новые материалы и технологии в машиностроении. – 2012. – №6. – С. 84–87.

4. Васильев А.П., Охлопкова А.А., Стручкова Т.С., Алексеев А.Г., Иванова З.С. Разработка антифрикционных материалов на основе политетрафторэтилена с углеродными волокнами // ВЕСТНИК СВФУ. – 2017. – № 3(59). – С. 39–47.

5. Буря О.І., Калініченко С.В., Набережна О.О., Кончиц А.А. Полімерна композиція: пат. 122358 Україна. МПК: C08L 23/04. №а 2018 08067; заявл. 20.07.2018; опубл. 26.10.2020, Бюл. № 20. 4 с.

6. Херцберг Р.В. Деформация и механика разрушения конструкционных материалов. / пер. с англ. под. ред. Бернштейна М.Л. Москва: Металлургия, 1989. – 560 с.

СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ КРЕМНЕЗЕМІВ З ДИЕТИЛЕНТРИАМІННИМИ ГРУПАМИ

Томіна В.В.¹, Столярчук Н.В.¹, Дударко О.А.¹, Мельник І.В.^{1,2}

¹Інститут хімії поверхні ім.О.О.Чуйка НАН України, w.w.tomina@gmail.com

²Інститут Геотехніки Словацької академії наук

Метали, що використовуються в хімічній, гальванічній, пігментній, високотехнологічній промисловостях, вважаються основними токсичними забруднювачами водних басейнів, і їх здатність до накопичування в живих організмах викликає занепокоєння екологічних служб у всьому світі. Окрім інших (As, Pb, Hg) до токсичних металів також відносять Cu і Ni, які акумулюючись в різних ланках харчового ланцюга, можуть завдавати шкоди людському організму. Для очистки води від домішок таких йонів добре вивчені та широко застосовуються аміновмістні кремнійорганічні сполуки завдяки комплексотвірним властивостям аміногруп. Значному поширенню в сорбційних технологіях ці матеріали завдячують розвиненій пористості та високому вмісту функціональних груп. Проте, як показали попередні наші дослідження, підвищення кількості аміно груп шляхом збільшення в реакційній суміші частки функціоналізуючого силану призводить до утворення непористих зразків і недоступності аміногруп до взаємодій [1]. Одним із шляхів вирішення є використання різних типів структуруючих та ускладнення будови функціоналізуючого агентів. Враховуючи попередні дослідження [2, 3] та з метою збільшення поверхневих центрів адсорбції було вирішено використати силан з диетилентриамінними функціональними групами, N1-(3-триметоксисилілпропіл)диетилентриамін ($\equiv\text{Si}(\text{CH}_2)_3\text{NH}(\text{CH}_2)_2\text{NH}(\text{CH}_2)_2\text{NH}_2$, ТМПДЕТА). Також іншими науковими групами було показано, що синтезовані темплатним методом матеріали типу SBA-15 з диетилентриамінними групами краще сорбують йони Cu(II) [4] та Hg(II) [5], ніж аналогічні матеріали з амінопропільными та етилендіамінними групами. Отже, метою нашого дослідження було одностадійно синтезувати непоруваті і поруваті кремнеземні сферичні частки з високим вмістом диетилентриамінних груп і встановити параметри, які впливають на адсорбцію йонів міді і нікелю цими матеріалами. Синтез здійснювали використовуючи модифікований метод Штобера в аміачному середовищі із застосуванням трьох різних структуруючих агентів. Зразок **STRA3_1** одержували на основі тетраетил ортосилікату (ТЕОС). Зразки **ETRA2_1** та **ETRA4_1** синтезовані на основі 1,2-біс(триетоксисиліл)етану (БТЕСЕ) та відрізняються кількістю місткового силана. **BTRA1_1**, **BTRA2_1** та **BTRA4_1** одержані зі структуруючим силаном 1,4-біс(триетоксисиліл)бенzenом (БТЕСБ) та співвідношенням 1/1, 2/1 та 4/1 (таблиця 1).

Таблиця 1

Характеристики синтезованих зразків

Назва зразку	Співвідношення силанів	$S_{\text{БЕТ}}$, м ² /г	C_{NHNHNH_2} ммоль/г	ССЕ Ni^{2+} , ммоль/г	ССЕ Cu^{2+} , ммоль/г
STRA3_1	3/1	5	2,44	0,56	0,48
ETRA2_1	2/1	3	1,91	0,30	1,86
ETRA4_1	4/1	3	2,08	0,88	1,24
BTRA1_1	1/1	2	2,34	0,30	1,45
BTRA2_1	2/1	397	1,51	0,97	0,70
BTRA4_1	4/1	438	1,35	0,34	0,69

$S_{\text{БЕТ}}$ – питома поверхня зразків розрахована на основі ізотерм низькотемпературної адсорбції-десорбції азоту виміряних на сорбтометрі Kelvin -1042 (Costech International).

C_{NHNHNH_2} – вміст функціональних груп на основі даних елементного аналізу на CHNS за допомогою аналізатора Vario MACRO cube (Elementar Analysensysteme GmbH, Німеччина)

Визначення статичної сорбційної ємності (ССЕ) зразків відносно йонів нікелю(II) та міді(II) з модельних водних розчинів $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ та $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ проводили в статичному

режимі ($m = 0,01 \pm 0,0005$ г; $V = 10$ мл; температура = 25°C , йонна сила 0,1), а концентрації металів визначали атомно-абсорбційним спектрометром Varian AA 240 FS.

За допомогою СЕМ досліджено, що одержані матеріали складаються з частинок розмір яких варіюється в діапазоні 60-120 нм (рис. 1).

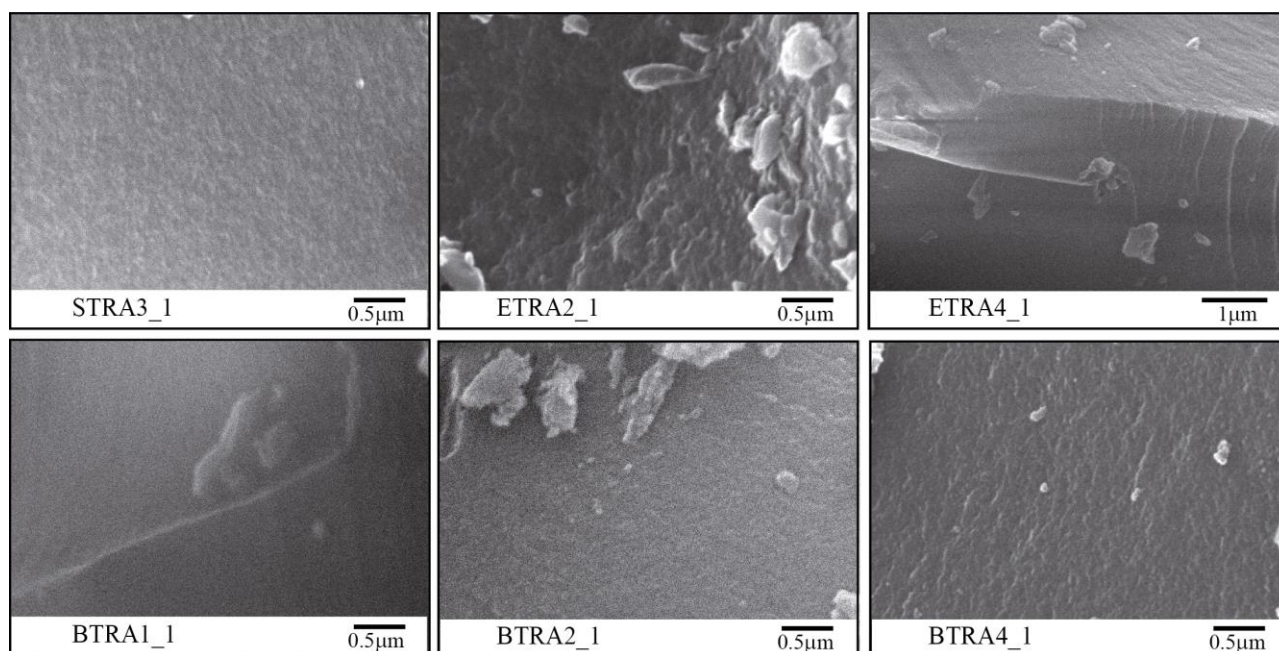


Рис. 1 Мікрофотографії зразків одержані за допомогою СЕМ з використанням електронного мікроскопа JSM 6060 LA (Jeol, Японія)

Зразки синтезовані на основі ТЕОС та БТЕСЕ є непористими, незалежно від співвідношення силанів, що часто буває при використанні функціоналізуючого силану з довгим радикалом. Зразки з БТЕСБ, що містять жорсткий органічний місток та одержані при співвідношенні 2/1 та 4/1 характеризуються високими значеннями питомої поверхні. Очевидно, збільшення кількості жорсткого структуруючого агента сприяє формуванню розвиненої поруватої структури. Ізотерми низькотемпературної адсорбції азоту для цих зразків (рис. 2) належать до IV типу згідно класифікації IUPAC [6]. Необхідно зазначити, що вони мають капілярно-конденсаційний гістерезис, що свідчить про наявність мезопор.

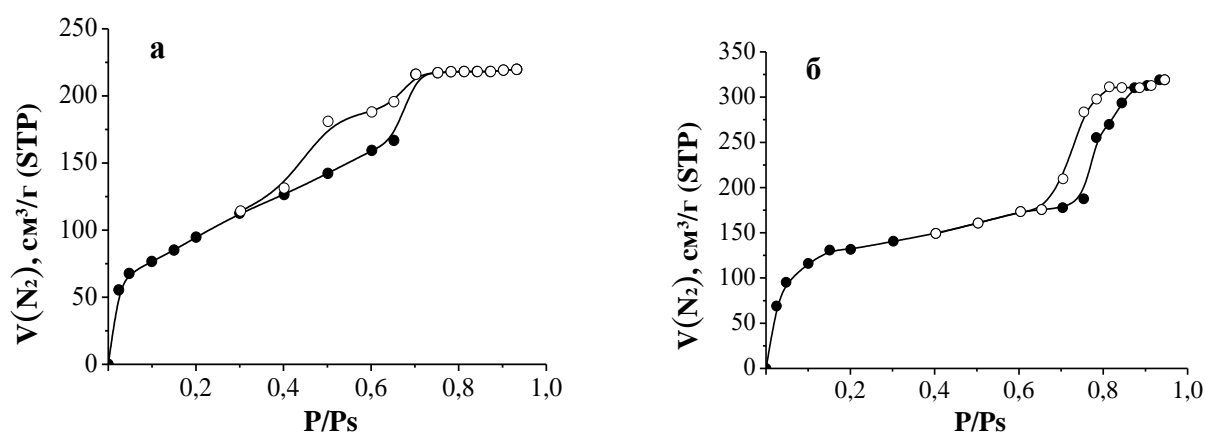


Рис. 2 Ізотерми низькотемпературної адсорбції-десорбції азоту зразків **BTRA2_1** (а) та **BTRA4_1** (б) виміряні на сорбтометрі “Kelvin -1042” (Costech International)

В ІЧ спектрах одержаних зразків (рис. 3) є інтенсивна смуга поглинання при 1030 - 1157 cm^{-1} , що належить до асиметричних валентних коливань $\nu_{\text{as}}(\text{Si-O-Si})$ каркасу. Дві смуги поглинання низької інтенсивності в області 3293 та 3352 cm^{-1} , характерні для валентних коливань $\nu_{\text{s,as}}(\text{NH})$ аміногруп, а смуга при 1461 cm^{-1} відноситься до $\delta(\text{NH}_2)$. Місткові силани в складі кремнеземного каркасу представлені етиленовим та феніленовим угрупованнями. Так, присутність $-\text{CH}_2-$ ланок в етиленовому спейсері та в складі диетилентриамінної групи, проявляється в ІЧ спектрах ксерогелів у вигляді групи смуг поглинання в області 2811-2935 cm^{-1} , які відповідають валентним симетричним та асиметричним коливанням C-H зв'язків та смугами при ~ 1271 та 1416 cm^{-1} , які можна віднести до їх деформаційних коливань. Присутність $-\text{C}_6\text{H}_4-$ містків, можна ідентифікувати за групою смуг в ІЧ спектрах в області 3008 і 3055 cm^{-1} та 1500-1925 cm^{-1} . Також, для спектрів фенілмісткових матеріалів, присутня смуга поглинання 3726 cm^{-1} , що відноситься до коливань $-\text{OH}$ груп.

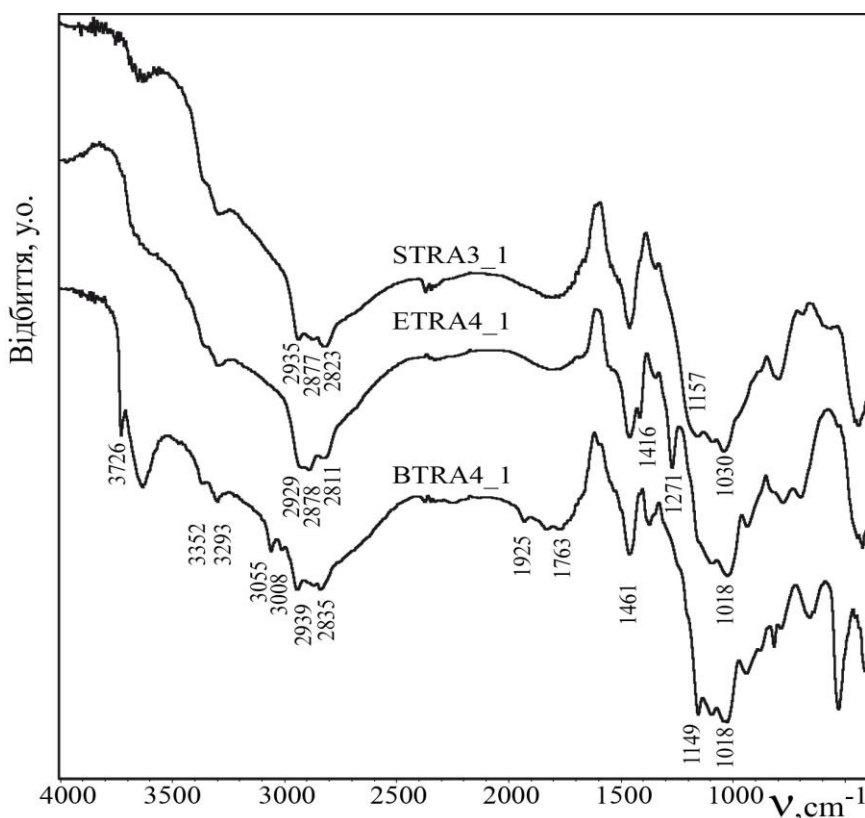


Рис. 3 ІЧ спектри синтезованих зразків на основі ТЕОС **STRA3_1**, з етиленовим **ETRA4_1** та феніленовим **BTRA4_1** містками записані при 200°C (Thermo Nicolet Nexus FTIR spectrometer)

Всі одержані зразки мають високий вміст функціональних груп 1,51-2,44 ммоль/г.

Значення сорбційної ємності кремнеземних часток з диетилентриамінними групами відносно йонів $\text{Cu}(\text{II})$ та $\text{Ni}(\text{II})$ наведені в табл. 1. Незважаючи на найвищий вміст диетилентриамінних груп, зразок на основі ТЕОС найгірше сорбує йони міді(II), що і раніше спостерігалось для амінопропільних груп [2]. Найвищі значення ССЄ відносно Cu^{2+} показали непористі кремнеземи з етиленовими (1,86 ммоль/г) та феніленовими (1,45 ммоль/г) містками в структурі, при чому немає прямої залежності кількість груп – сорбційна ємність. Однак, ці зразки найгірше сорбують йони $\text{Ni}(\text{II})$ – 0,3 ммоль/г. При цьому у кремнезема з етиленовими містками **ETRA2_1** більше 97 % груп задіяні в комплексоутворенні з Cu^{2+} і 16 % у взаємодії з Ni^{2+} . Найвища сорбція Ni^{2+} спостерігається для зразків **BTRA2_1** (0,97 ммоль/г) та **ETRA4_1** (0,88 ммоль/г), яка є високими показниками вилучення йонів нікелю з води порівняно з літературними.

Робота виконується в рамках Українсько-Індійського науково-дослідного проекту “Створення нових органо-неорганічних гібридних матеріалів як сорбентів для очищення стічних вод від іонів важких металів” 2019-2021 та проекту APVV-19-0302.

1. Stolyarchuk N.V., Barczak M., Melnyk IV, Zub Yu.L. (2016) Amine-functionalized nanospheres, synthesized using 1,2-bis(triethoxysilyl)ethane. In Fesenko O., Yatsenko L. (eds) Nanophysics, Nanophotonics, Surface Studies, and Applications, ISBN 978-3-319-30737-4, 183: 415–425
2. Tomina V.V., Furtat I.M., Stolyarchuk N.V., Zub Yu.L., Kanuchova M., Vaclavikova M., Melnyk I.V. Surface and structure design of aminosilica nanoparticles for multifunctional applications: adsorption and antimicrobial studies. In: Melnyk I.V., Vaclavikova M., Seisenbaeva G.A., Kessler V.G. (eds) Biocompatible Hybrid Oxide Nanoparticles for Human Health: From Synthesis to Applications, ISBN: 978-0-12-815875-3, Elsevier, 2019, 15–31
3. Melnyk I.V., Tomina V.V., Stolyarchuk N.V., Václavíková M. Sol-Gel Technique to Design Hybrid Materials and their Application in Water Purification. In: Petkov P., Achour M., Popov C. (eds) Nanoscience and Nanotechnology in Security and Protection against CBRN Threats. NATO Science for Peace and Security Series B: Physics and Biophysics. Springer, Dordrecht, 2020, 67–73 https://doi.org/10.1007/978-94-024-2018-0_5
4. Balintova M., Holub M., Singovszka E., Tesarcikova M. Application of low-cost adsorbents for copper removal from aquatic environment International Scientific Conference People, Buildings and Environment 2014 (PBE2014) 15-17 October, 2014, Kroměříž, Czech Republic, 510-516 https://www.fce.vutbr.cz/ekr/PBE/Proceedings/2014/051_14212.pdf
5. Zhang L., Yu C., Zhao W., Hua Z., Chen H., Li L., Shi J. Preparation of multi-amine-grafted mesoporous silicas and their application to heavy metal ions adsorption // Journal of NonCrystalline Solids. – 2007. – 353. – P. 4055–4061
6. Sing K.S.W., Everett D.H., Haul R.A.W., Moscou L., Pierotti R.A., Rouquérol J., Siemieniewska T. Reporting physisorption data for gas/solid systems with special reference to the determination of surface area and porosity (Recommendations 1984) // Pure Appl Chem. – 1985. – 57, № 4. – P. 603–619.

ВПЛИВ ЕТИЛЕНГЛІКОЛЮ НА ПРОЦЕС ХІМІЧНОГО РОЗЧИНЕННЯ МОНОКРИСТАЛІВ $Zn_xCd_{1-x}Te$

Черняк А.А.¹, Чайка М.В.¹, Денисюк Р.О.¹, Томашик В.М.²

¹Житомирський державний університет імені Івана Франка, Chernyak_99@ukr.net

²Інститут фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова НАН України

Механічна обробка монокристалів призводить до утворення приповерхневих порушених шарів, тому формування полірованої та структурно-досконалої поверхні є одним із найважливіших етапів обробки напівпровідникових матеріалів під час створення робочих елементів приладів сучасної електроніки на їх основі [1]. З метою вирішення цих технологічних задач потрібно розробляти різні методики травлення, серед яких однією з найдоступніших та простих є хімічно-динамічне полірування (ХДП).

Процес хімічного розчинення поверхні пластин відбувається внаслідок окислення структурних елементів напівпровідника та наступного розчинення утворених продуктів цієї взаємодії [2]. Швидкість травлення монокристалів залежить від наявності дефектів, дислокацій та механічних порушень їх поверхні. Окрім цього, визначальними чинниками є температура та концентраційне співвідношення компонентів травильних композицій, адже саме вони визначають їх вплив на стан поверхні напівпровідникових матеріалів [3].

Метою роботи є дослідження впливу в'язкого органічного розчинника – етиленгліколю (ЕГ) на основні закономірності процесу хімічного розчинення $Zn_xCd_{1-x}Te$ у травильних

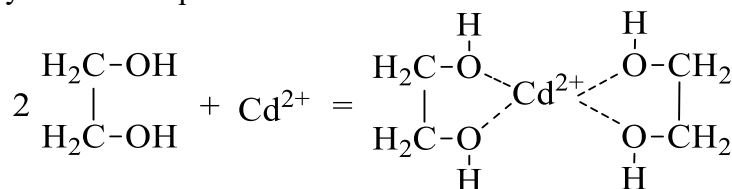
композиціях на основі водних розчинів $K_2Cr_2O_7 - HBr$ та оптимізація процесу травлення досліджуваних матеріалів.

Для досліджень використовувалися нелеговані вирощені методом Бріджмена пластини $Zn_{0,1}Cd_{0,9}Te$, а також отриманий з газової фази $Zn_{0,04}Cd_{0,96}Te$. Зразки площею $0,5 \text{ см}^2$ вирізали з вирощених монокристалічних злитків. Перед реалізацією процесу ХДП з поверхні кристалів, які попередньо шліфували та механічно полірували, видаляли порушений шар товщиною близько 100 мкм розчином на основі $HNO_3 - HBr - C_4H_6O_6$ зі швидкістю 35 мкм/хв . Стан поверхні зразків після кожного етапу обробки досліджували металографічним мікроскопом з цифровою камерою eTREK DCM800.

Вивчення закономірностей хімічної взаємодії монокристалів $Zn_xCd_{1-x}Te$ з водними розчинами $K_2Cr_2O_7 - HBr$, які додатково розводили етиленгліколем проводили на установці для ХДП методом диску, що обертається, адже саме він забезпечує стаціонарні відтворювані гідродинамічні умови [1]. Травильні суміші готували з $10,9 \%$ $K_2Cr_2O_7$ (х.ч.), 40% HBr (ос.ч.) та етиленгліколю (х.ч.). Перед виконанням ХДП приготовлені розчини витримували дві години, щоб встановилася рівновага реакції:



Розчин етиленгліколю використовували, як модифікатор в'язкості, крім того він був гарним комплексоутворювачем для збільшення розчинності продуктів взаємодії поверхні напівпровідникових кристалів з травильними сумішами [4]. Процес ймовірного утворення розчинник комплексів, що утворилися після реакції іонів Cd^{2+} з етиленгліколем можна схематично проілюструвати таким рівнянням:



Відомо, що іони Cd можуть мати координаційні числа 4 чи 6, тому припустимо, що Cd^{2+} формує з атомами O чотири донорно-акцепторних зв'язки, що утворюють вільні електронні пари атомів кисню [5].

Взаємодію кристалів $Zn_{0,1}Cd_{0,9}Te$ та $Zn_{0,04}Cd_{0,96}Te$ з травильними композиціями $K_2Cr_2O_7 - HBr - EG$ досліджували при вмісті (в %): $(20-50) K_2Cr_2O_7$; $(20-80) HBr$; $(0-60) EG$ при $T = 293 \text{ K}$ та $\gamma = 82 \text{ хв}^{-1}$. Встановлено залежність швидкості ХДП напівпровідників від концентрації травника, його температури та природи досліджуваних матеріалу. Виявлено, що шляхом додавання EG до складу травильних розчинів можна суттєво зменшити швидкість травлення – з $8-9$ до $0,5-1 \text{ мкм/хв}$. Припускаємо, це може бути обумовлено як збільшенням в'язкості водних розчинів, так і зменшенням вмісту активного компоненту травника, тобто утворюваного броду, в травильних композиціях. Встановлено, що області поліруючих травників формуються в основному інтервалі досліджуваних складів розчинів, а швидкості ХДП при цьому перебувають в межах $2-7 \text{ мкм/хв}$ для $Zn_{0,04}Cd_{0,96}Te$ та $2,5-8 \text{ мкм/хв}$ для $Zn_{0,1}Cd_{0,9}Te$. Виявлено, що процес хімічного розчинення монокристалів у цих травниках визначають стадії дифузії, адже розраховані з температурної залежності значення E_a становлять $24-26 \text{ кДж/моль}$, тобто не перевищують 30 кДж/моль . Це свідчить про лімітування процесу розчинення пластин з переважанням дифузійних стадій [6].

Виявлено закономірність зміни швидкості ХДП монокристалів $Zn_xCd_{1-x}Te$ від складу твердих розчинів: збільшенням вмісту Zn в напівпровіднику призводить до зростання швидкості розчинення та покращення якості полірованої поверхні.

Встановлено, що розведення водних розчинів $K_2Cr_2O_7 - HBr$ етиленгліколем є перспективними для практичного використання, оскільки додавання модифікатора в'язкості сприяє зменшенню швидкості розчинення монокристалів до $0,5 \text{ мкм/хв}$, збільшенню діапазону полірувальних розчинів та покращенню їх властивостей.

1. Луфт Б.Д. Физико-химические методы обработки поверхности полупроводников // Б.Д. Луфт, В.А. Перевошиков, Л.Н. Возмилова, и др. – М. : Радио и связь, 1982. – 136 с.
2. Репинский С.М. О кинетике и механизме реакций окисления и растворения полупроводников / С.М. Репинский // Успехи химии. – 1983. – № 6. – С. 922-935.
3. Сангвал К. Травление кристаллов. Теория, эксперимент, применение // К. Сангвал. – М. : Мир, 1990. – 496 с.
4. Чайка М.В. Вплив природи органічного компонента на хімічне розчинення монокристалів CdTe та $Zn_xCd_{1-x}Te$ у водних розчинах $K_2Cr_2O_7 - HBr$ – розчинник / М.В. Чайка, З.Ф. Томашик, В.М. Томашик, Д.Ю. Панасюк // Всеукр. наук. конф. “Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи” – 2017. – С. 125-128
5. Chayka M.V. Optimization of bromine-emerging etching compositions $K_2Cr_2O_7-HBr$ -ethylene glycol for forming a polished surface of CdTe, $Zn_xCd_{1-x}Te$ and $Cd_xHg_{1-x}Te$ / M.V. Chayka, Z.F. Tomashyk, V.M. Tomashyk, et al. // Functional Materials. –2019. –Vol. 26, No. 1. – P. 189-196.
6. Поп С.С. Фізична електроніка.– Л.: Євросвіт, 2001. – 250 с.

ПІДВИЩЕННЯ ВОГНЕСТІЙКОСТІ ЕПОКСИДНИХ ПОКРИТТІВ СПОЛУКАМИ ІНТЕРКАЛЬОВАНОГО ГРАФІТУ

Шологон В.І., Калафат К.В., Вахімова Л.М., Таран Н.А.

Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАН України,
konstantinkalafat@gmail.com

Інтумесцентні вогнезахисні покриття, що застосовуються в умовах вуглеводневої пожежі, повинні забезпечувати утворення більш ефективного та стійкого коксового шару ніж покриття, що призначені для захисту від целюлозної пожежі [1]. Тому оптимізація вогнезахисної ефективності інтумесцентної системи (поліфосфат амонію (ПФА)/меламін (МА)/пентаеритрит (ПЕ)/епоксидна смола (ЕР) шляхом домішок речовин, які збільшують масу коксового залишку покриття в умовах високих температур є актуальним завданням сучасного вогнезахисту [2].

Метою даного дослідження є вивчення впливу кількості інтеркаланту в нітраті окису графіту (НОГ) на масу коксового залишку інтумесцентного покриття ПФА/МА/ПЕ/ЕР/ TiO_2 в умовах температурного впливу 200-800 °С.

Зразки НОГ (із вмістом інтеркаланту 2,3-29,6 %) отримували окисленням природного лускатого графіту димлячою азотною кислотою. Продукт – нітрат окису графіту витримували при 20-30 °С до досягнення постійної ваги. За результатами рентгенофазового та термогравіметричного аналізу, ІЧ-спектроскопії було встановлено, що утворені структури містять графенові ґратки, що функціоналізовані кисневовмісними групами і заповненні інтеркалятом – молекулами HNO_3 з включеннями одностінних вуглецевих нанотрубок.

На рисунку наведені результати впливу вмісту інтеркаланту в НОГ на масу коксового залишку інтумесцентного покриття при 800 °С.

Встановлено, що присутність НОГ у складі інтумесцентного епоксидного покриття обумовлює зростання маси коксового залишку при 800 °С майже у 3,5 рази. При цьому оптимальна кількість інтеркаланту у графіті має відповідати інтервалу 5-22 %.

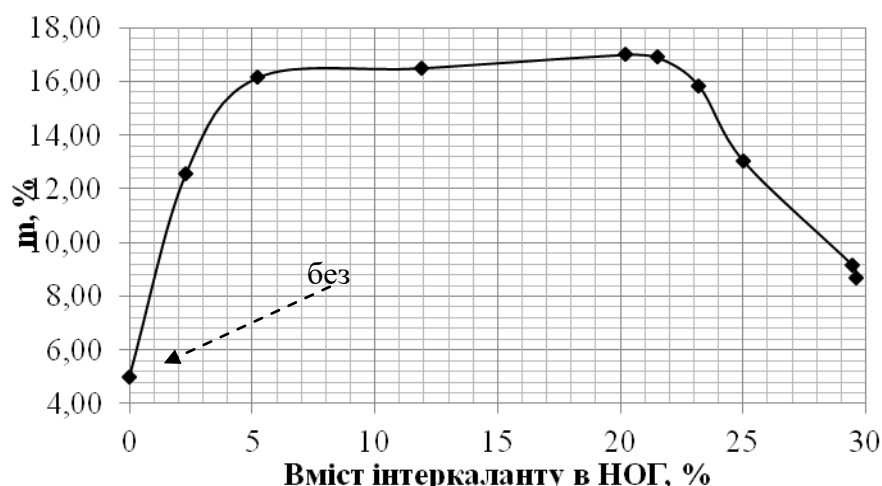


Рис. Залежність маси коксових залишків інтумесцентного покриття від вмісту інтеркаланта в НОГ

1. Petukhovskaia I. Passive fire protection methods of load-bearing structures in case of hydrocarbon fire: Thesis // Saimaa University of Applied Sciences. – 2018. – 36 p.
2. Ucanus G. et al. Methods for preparation of nanocomposites in environmental remediation // New Polymer Nanocomposites for Environmental Remediation. – 2018. – P. 1-28.

ФАЗОВІ РІВНОВАГИ В СИСТЕМІ $\text{CeO}_2\text{--Ln}_2\text{O}_3$ ПРИ ТЕМПЕРАТУРІ 1500 °С

Юшкевич С.В., Биков О.І., Корнієнко О.А.

Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України,
mars970909@gmail.com

Дослідження фазових рівноваг в системах $\text{CeO}_2\text{--Ln}_2\text{O}_3$ має як практичний, так і науковий інтерес. Матеріали на основі оксидів церію та РЗЕ перспективні для використання в медицині, енергетиці та машинобудуванні у зв'язку з унікальністю їхніх властивостей [1–9]. Діаграми стану вказаних систем є фізико-хімічною основою для створення таких матеріалів, як тверді електроліти для паливних комірок, кисневі газові датчики, носії катализаторів, захисні покриття на сплави та інше. Тверді розчини на основі діоксиду церію найбільш перспективні електроліти, що працюють при помірних температурах, оскільки їх іонна провідність та чутливість до парціального тиску кисню значно вища, ніж у ZrO_2 стабілізованого Y_2O_3 (YSZ) [1, 2, 4]. Системи $\text{CeO}_2\text{--Ln}_2\text{O}_3$ спроможні задовольнити вимоги в ядерній енергетиці для розробки безпечних та надійних технологій утилізації відходів атомної промисловості та розвитку нової генерації реакторів [3, 9]. У сучасний період ведеться активний пошук матеріалів щодо отримання інертної матриці для іммобілізації плутонію. Матеріал інертної матриці повинен відповідати жорстким умовам: відзначатись високим коефіцієнтом поглинення нейтронів, низькими теплопровідністю та коефіцієнтом термічного розширення, відсутністю фазових перетворень і стабільністю при високих температурах. Крім того, вище перелічені властивості є необхідними для високотемпературної конструкційної кераміки: теплоізоляційних матеріалів, складових частин ядерних реакторів. Керамічна матриця може бути використана для фіксації трансуранових елементів, тому що характеризується високою термодинамічною стабільністю та не зазнає змін на протязі тривалого часу. Системи з оксидом церію знаходять застосування в медицині в якості біомаркерів і біоінертних керамічних матеріалів [7, 8].

Для дослідження фазових рівноваг використовували азотнокислу сіль церію $\text{CeO}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ та Ho_2O_3 . Оксид гольмію перед зважуванням просушували в муфелі при 1200 °С (2 год). Отримані наважки розчиняли у HNO_3 (1:1) випарювали та прожарювали при

800 °C протягом 2 год. Хімічний склад зразків змінювався з кроком 5 мол. %. Порошки отриманих сумішей пресували в таблетки діаметром 5 і висотою 4 мм одностороннім пресуванням у сталеві пресформи без зв'язки під тиском 10–30 МПа. Випал отриманих зразків проводили на повітрі при температурі 1500 °C протягом 80 годин.

Дослідження фазового складу проводили з використанням дифрактометру ДРОН-3 при кімнатній температурі. Зйомку проводили від 10 до 100° (2θ), крок сканування – 0.05–0.1 град, експозиція 4. Для обробки отриманих результатів РФА була використана база даних Міжнародного комітету порошкових стандартів (JSPSDS International Center for Diffraction Data 1999).

Встановлено, що температурі 1500 °C в системі $\text{CeO}_2\text{--Ho}_2\text{O}_3$ утворюються тверді розчини кубічної структури: F- CeO_2 та C- Ho_2O_3 , що розділені широкою гетерогенною областю (C+F). В дослідженій системі утворення нових фаз не спостерігалось.

Межі областей гомогенності твердих розчинів на основі F- CeO_2 і C- Ho_2O_3 визначені складами, що містять 20–25 мол. % Ho_2O_3 і 60–65 мол. % Ho_2O_3 , відповідно. За результатами рентгенофазового аналізу встановлено, що періоди ґратки F- CeO_2 зменшуються від $a=0.5409$ нм для чистого CeO_2 до $a=0.5378$ нм для зразка, що містить 25 мол. % Ho_2O_3 (1500 °C).

На основі отриманих результатів та літературних даних [10–12] встановлено, що подвійні системи на основі діоксиду церію легованого оксидами РЗЕ (ітрієвої підгрупи) мають подібну будову.

1. Kharton V. V., Figueiredo F. M., Navarro L., Naumovich E. N. et al Ceria-based materials for solid oxide fuel cells // *J. Mater. Sci.* – 2001. – Vol. 36. – P. 1105-1117.
2. Sato K., Yugami H., Hashida T. Effect of rare-earth oxides on fracture properties of ceria ceramics // *J. of Materials Science.* – 2004. - Vol. 39. – P. 5765-5770.
3. Zhu B., Tahara Y., Yasunaga K., Matsui T., Hori F., Iwase A. Study on analysis crystal structure in CeO_2 doped with Er_2O_3 or Gd_2O_3 // *J. of Rare Earths.* – 2010. – Vol. 28. – P. 164-167.
4. Kimpton J., Randle T. H., Drennan J. Investigation of electrical conductivity as f function of dopant-ion radius in the systems $\text{Zr}_{0.75}\text{Ce}_{0.08}\text{M}_{0.17}\text{O}_{1.92}$ (M = Nd, Sm, Gd, Dy, Ho, Y, Er, Yb, Sc) // *Solid State Ionics.* – 2002. - Vol. 149. – P. 89-98.
5. Andrievska O. R., Kornienko O. A., Bykov O. I., Sameliuk A. V., Bohatyriova Z. D. Interaction of ceria and erbia in air within temperature range 1500 – 600 °C // *Journal of the European Ceramic Society* – 2020 – Vol. 40 – P.3098-3103..
6. Zhu B., Ohno H., Kosugi S., Hori F., Yasunaga K., Ishikawa N., Iwase A. Effects of swift heavy ion irradiation on the structure of Er_2O_3 -doped CeO_2 // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research.* – 2010. –Vol. 268, B – P. 3199-3202.
7. Garrido Pedrosa A M. et al Synthesis and optical investigation of systems involving mixed Ce and Er oxides // *Journal of Alloys and Compounds.* – 2004. - Vol. 374. – P. 223-225.
8. Maschio S., Aneggi E., Trovarelli A., Sergio V. Influence of erbia or europia doping on crystal structure and microstructure of ceria-zirconia (CZ) solid solutions // *Ceramics International.* – 2008. - Vol. 34. – P. 1327-1333.
9. Ito T., Yoshino M., Iwasaki K., Matsui T., Nagasaki T. Photoluminescence of Er-containing metal oxide in U-band // *Proceedings of International Symposium on Eco Topia Science.* – 2007. – ISETS07. – P. 128-130.
10. Kornienko O. A., Andrievskaya O. R. Phase equilibria in the Systems with ZrO_2 , CeO_2 and Dy_2O_3 Innovative scientific researches: European development trends and regional aspect. – 4th ed. – Riga, Latvia : “Baltija Publishing”, 2020. – 260 p.
11. Andrievskaya E. R., Kornienko O.A., Sameljuk A.V., Bykov A.I. Interaction of ceria and ytterbia in air with in temperature range 1500 – 600°C // *Journal of the European Ceramic Society,* – Vol. 39(9). – P. 2930-2935.
12. Andrievskaya E.R., Kornienko O.A., Sameljuk A.V. Phase Relation Studies in the $\text{CeO}_2\text{--Er}_2\text{O}_3$ System at 600 to 1500 °C // *Journal of the European Ceramic Society.* – 2020. – Vol. 40, 8. – P. 3098-3103.

**НЕОРГАНІЧНА
ТА ФІЗИЧНА ХІМІЯ**

SINGLE CRYSTAL STUDY OF $\text{ErFe}_{1-x}\text{Si}_2$, $x = 0.59$

*Babizhetskyy V.*¹, *Levytskyi V.*²

¹ Ivan Franko National University of Lviv, Ukraine, volodymyr.babizhetskyy@lnu.edu.ua

²Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, Germany

Several ternary compounds $RT_{1-x}\text{Si}_2$ (R – rare earth, T – transition element) have been reported for the last decades. The crystal structures of them are characterized by a stacking of BaAl_4 and AlB_2 slabs. The early rare earth manganese $\text{RMn}_{1-x}\text{Si}_2$ ($R = \text{La-Sm}$) and iron silicides $\text{RFe}_{1-x}\text{Si}_2$ ($R = \text{La-Nd, Gd-Lu}$) are known to crystallize in the TbFeSi_2 -type structure, a structure closely related to that of CeNiSi_2 -type structure, and characterized by site exchange between transition-metal and main-group elements within the BaAl_4 block; whereas the stoichiometric RFeSi_2 ($R = \text{Nd, Sm, Gd, Tb}$) crystallize in the NdRuSi_2 -type structure ([1, 2] and references therein).

The crystal structure of $\text{ErFe}_{1-x}\text{Si}_2$, $x = 0.59(1)$ has been determined from X-ray single crystal data. Intensity data were collected at room temperature using the Bruker D8 Quest diffractometer equipped with Mo-anode X-ray tube and Photon CCD detector. From the EDX analysis of the annealed sample Er_3FeSi_6 the composition $\text{Er}_{29.7(3)}\text{Fe}_{12.3(3)}\text{Si}_{58.0(3)}$ was deduced, being in good accordance with the results obtained from the crystal structure refinement. $\text{ErFe}_{1-x}\text{Si}_2$ crystallizes in the CeNiSi_2 structure type, orthorhombic space group $Cmcm$, Pearson symbol $oC16$, $a = 3.9863(1)$, $b = 15.5738(5)$, $c = 3.8664(1)$ Å, $R1=0.018$ ($wR2=0.041$ for 389 reflections with $I_o \geq 2\sigma(I_o)$). In the crystal structure of $\text{ErFe}_{1-x}\text{Si}_2$ all atoms are in Wyckoff positions $4(c) - 0 y 1/4$: Er ($y = 0.39721(2)$, $U_{\text{eq}} = 0.0070(1)$), Fe ($y = 0.1959(2)$, $U_{\text{eq}} = 0.0163(7)$), Si1 ($y = 0.0471(2)$, $U_{\text{eq}} = 0.009(1)$), Si2 ($y = 0.7508(2)$, $U_{\text{eq}} = 0.031(1)$). The refined Fe site occupancy is $G = 0.41(1)$. The structure contains the zigzag chains of Si1 and planar nets of Si2 atoms. The latter show shortened interatomic distances to Fe atoms.

Electronic structure calculations performed for a hypothetical lowered symmetry (space group $Cm2m$) $\text{ErFe}_{0.5}\text{Si}_2$ (Fig. 1a) results in the characteristic for metals density of state (DOS) diagram (Fig. 1b) with high mixing of Er, Fe and Si states near the Fermi level (set to zero eV) and predicting high temperature melting point.

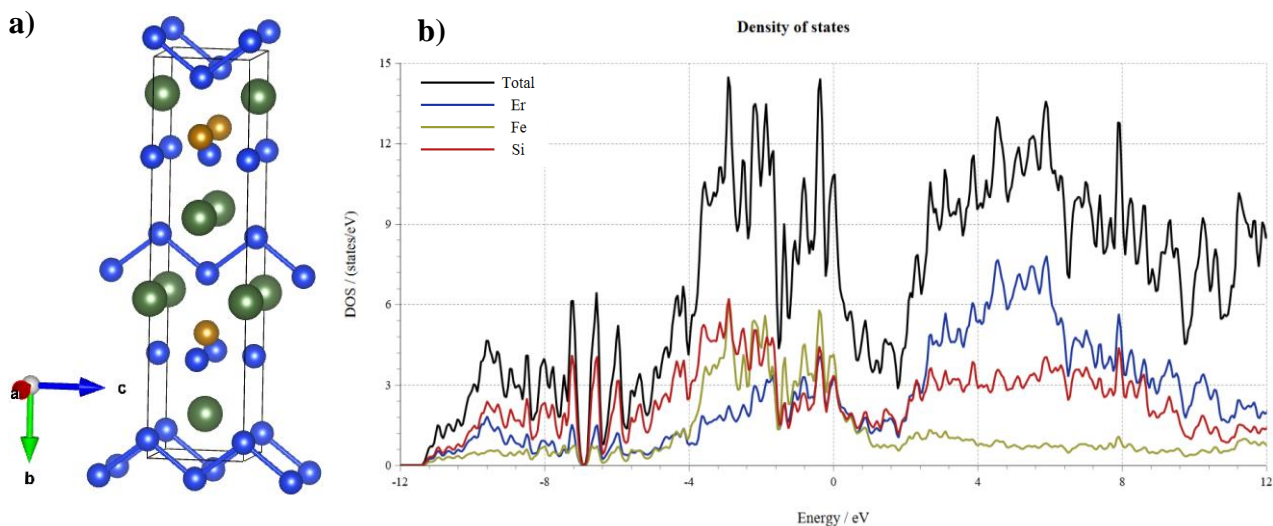


Fig. 1 a) Unit cell and **b)** DOS diagram for the $\text{ErFe}_{0.5}\text{Si}_2$

1. Babizhetskyy V., Köhler J., Tyvanchuk Y., Zheng C. A new ternary silicide $\text{GdFe}_{1-x}\text{Si}_2$ ($x=0.32$): preparation, crystal and electronic structure // *Z. Naturforsch.* –2020. –V.75b. – P. 217–223.
2. Ijjaali I., Venturini G., Malaman B. New NdRuSi_2 -type $\text{NdCo}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}_2$ ($0 < x \leq 1$) and RFeSi_2 compounds ($R=\text{Nd, Sm, Gd, Tb}$) // *J. Alloys Compd.* –1999. –V. 282. – P. 153-157.

PILLARED CLAYS – CATALYSTS FOR PETROCHEMICAL PROCESSES

Butenko E. O.

Priazovskiy State Technical University, butenko_e_o@pstu.edu

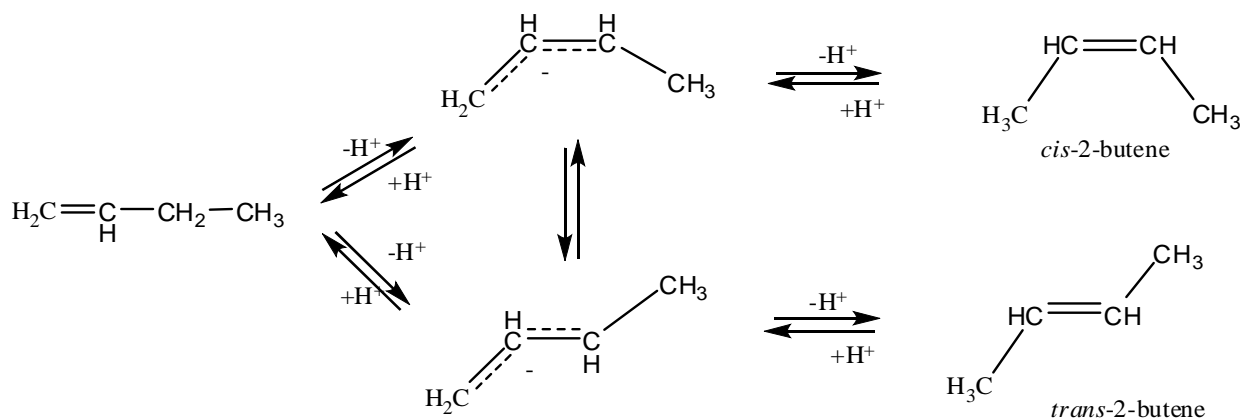
*The motto of a modern chemical production is "the best solvent is the absence of the solvent".
And these problems can be solved with the use of heterogeneous catalysts.*

Девіз сучасного хімічного виробництва - "найкращим розчинником є відсутність розчинника". І ці проблеми можна вирішити за допомогою гетерогенних каталізаторів.

However there is a huge group of a processes carried out under the conditions of the basic catalysts, for example condensation, alkylation ethoxylation and many others. The attempts to replace homogeneous bases with solid ion-exchange resins appeared unsuccessful, since they are unstable at elevated temperature and synergistic degradation is observed under the influence of temperature and reaction medium.

Layered Double Hydroxides is a class of inorganic compounds consisting of positively charged layers of metal hydroxides, as well as anions and solvent molecules in the interplanar space. Hydroxides form a system of octahedral cavities, statistically filled with cations of metals of different valencies. LDHs have the ability to capture and exchange both organic and inorganic anions and cations, and these properties make these catalysts unique [1].

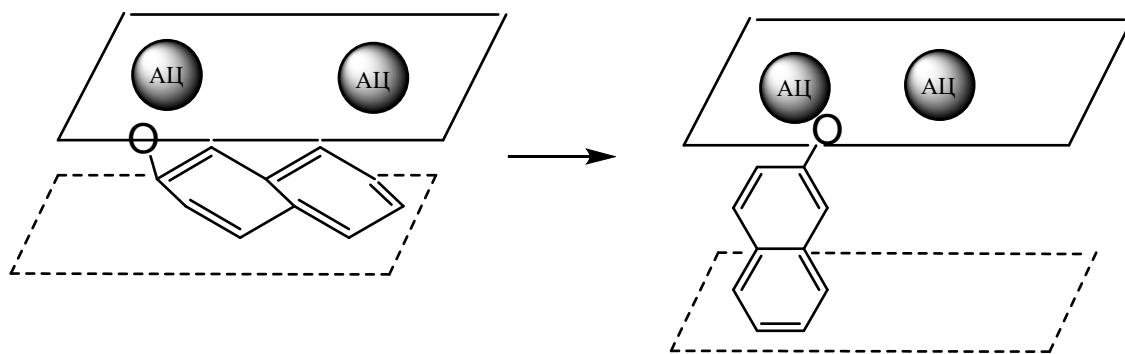
The most important property, thanks to which LDH surpasses all other basic catalysts, is the ability to control the pore size. This allows to create structures corresponding to the sizes of molecules, that is, to create narrow-selective catalysts. Pillared clays are two-dimensional LDHs with a given size of interlayered distances. Creating columns fixed the distance between layers.



Pillared LDHs allow to development of catalysts that are selective for different isomers. For example we can obtain 1,4-product at hydrogenation of conjugated dienes. Or we can obtain selectively *cis*-butene by changing the inner space in LDH during isomerization 1-butene to 2-butene.

Located in the inner space of LDHs molecules change their orientation, releasing the blocked active sites. We compare the sorption of β -naphthol and naphthalene. After sorption, the specific surface was determined and the interplanar distances were measured.

The interplanar distance in LDHs is about 7 Å. This value is comparable to the "thickness" of the aromatic ring of about 3 Å, whereas the diameter of the benzene molecule is 7 Å. And for β -naphthol, the plane-parallel arrangement is observed only in the initial stage of ion exchange.



When the aromatic rings of naphthalene are arranged parallel to the inorganic layers, the interplanar distance is 9 Å, and at perpendicular position is 19 Å

1. Timofeeva M.N., Butenko E.O., Kapustin A., Panchenko V.N., Krupskaya V. V., Gil A., Vicente M.A. Synthetic and natural materials with the brucite-like layers as highactive catalyst for synthesis of 1-methoxy-2-propanol from methanol and propylene oxide // *Journal of Molecular Catalysis A : Chemical*. – 2016. – Vol. 423, November. – P. 22–30.

2. Butenko E.O. Kapustin A. E. Mercarbide Catalyst for Alcohol Ethoxylation // *Journal of Siberian Federal University. Chemistry*. – 2020. – 13(3): 330-339

SPECTRAL-LUMINESCENT PROPERTIES OF Zr AND Hf PHTHALOCYANINES WITH DECANOATE-ALKYLAMINO- β -KETOENOLATE LIGANDS

Chernii S.V.^{1,2}, *Losytskyy M.Yu.*^{1,2}, *Tretyakova I.M.*¹, *Pekhnyo V.I.*¹, *Starukhin A.S.*³,
*Gorski A.V.*⁴, *Chernii V.Ya.*¹

¹V.I. Vernadskii Institute of General and Inorganic Chemistry NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine, chernii.sv@gmail.com

²Institute of Molecular Biology and Genetics NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

³B. I. Stepanov Institute of Physics NAS of Belarus, Minsk, Belarus

⁴Institute of Physical Chemistry, Polish Academy of Sciences, Warsaw, Poland

Phthalocyanines are among the most interesting organic materials due to their aromatic 18- π -electron system, closely related to natural hem and porphyrin rings. Phthalocyanines have a wide range of applications. They are suitable for creating new materials for catalysis, sensors, optoelectronics. Besides, phthalocyanines also have many biological applications. Namely, they are used in photodynamic therapy, inhibit amyloid aggregation of proteins, and have anticancer properties. Structural modification of phthalocyanines allows influencing their solubility, spectral-luminescent properties, and biological activity.

The new series of Zr and Hf phthalocyanines bearing decanoate and alkylamino- β -ketoenolates as out-of-plane ligands were synthesized, and their spectral-luminescent properties were studied. The absorption of both Zr and Hf complexes and fluorescence emission spectra of Zr complexes were studied in chloroform. In the absorption spectra of studied phthalocyanines, bands corresponding to the absorption of the phthalocyanine fragment (Soret band with a maximum at 341-344 nm and Q-band with a maximum at 687-688 nm) are observed. The absorption band of the alkylamino- β -ketoenole out-of-plane ligand was also detected in the phthalocyanine complexes spectra (about 437-472 nm depending on the ligand type).

The absorption and fluorescence spectra of the Zr phthalocyanine in toluene are presented in Fig. 1. The fluorescence is characterized by a maximum close to 700 nm, which corresponds to the phthalocyanine macrocycle emission, while the fluorescence of alkylamino- β -ketoenole ligand was not observed.

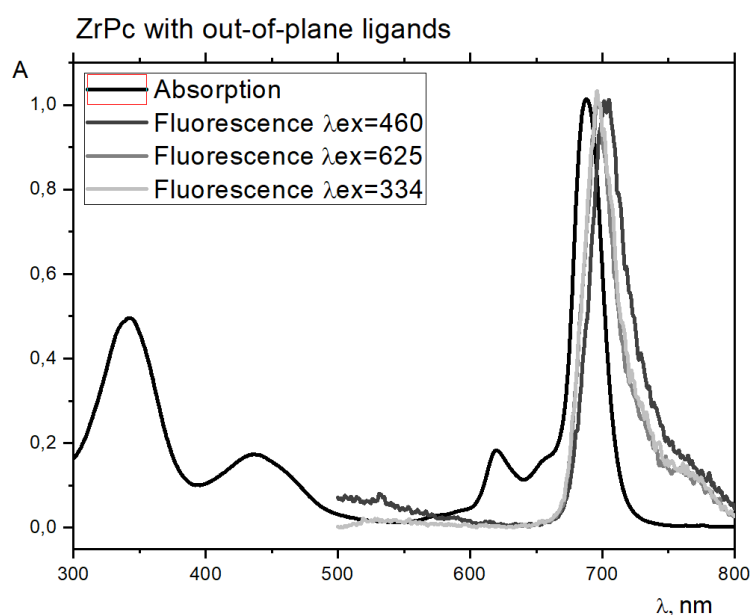


Fig. 1 Absorption and fluorescence emission spectra of decanoate-alkylamino- β -ketoenolate complex of Zr phthalocyanine in chloroform. All spectra are normalized to 1

This project has received funding from the Joint competition of scientific projects of NAS Ukraine and NAS of Belarus "Multichromophore phthalocyanine complexes for use as photosensitizers and efficient photoconverters" N 07-03-20/21.

NEW ORTHOROMBIC MgFe₆Ga₆ PHASE

Pavlyuk N., Dmytriv G., Pavlyuk V.

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

nazar.pavlyuk@gmail.com

The Mg-based intermetallic compounds are widely investigated now due to the very well hydrogen storage and electrochemical properties. During the systematic study of Mg–Fe–Ga alloys a new orthorhombic MgFe₆Ga₆ was detected, that is isostructural to MgT₆Ga₆ (T=Ni, Pd) compounds (results will be published soon).

The MgFe₆Ga₆ ternary compound was prepared in a tantalum crucible in a resistance furnace with a thermocouple controller. Metallic crystals were selected using a conventional light microscope.

The single crystal of MgFe₆Ga₆ was investigated by means Oxford Diffraction Xcalibur3 diffractometer with CCD detector. The crystal structure of MgNi₆Ga₆ compound was successfully solved by direct methods and refined in space group *Immm*. The refined lattice parameters are: $a=5.030(1)$ Å, $b=8.499(2)$ Å, $c=8.695(3)$ Å. The starting atomic parameters were taken from an automatic interpretation of direct methods followed by difference Fourier syntheses using SHELX-97 package programs. Finally, all parameters are refined to $R_1 = 0.036$ and $wR_2 = 0.085$ using 244 independent reflections with $I > 2\sigma(I)$.

The electronic structure of the MgFe₆Ga₆ was calculated by means of TB-LMTO-ASA. The data of electronic structure calculations and crystal chemical analysis suggests that gallium and nickel (or palladium) form negatively charged $n[\text{Fe}_6\text{Ga}_6]^{m-}$ polyanions, which are compensated by positively charged $n[\text{Mg}]^{m+}$ cations.

EXPERIMENTAL STUDY OF THE TB-CU-SN TERNARY SYSTEM

Romaka L., Konyk M., Stadnyk Yu.

Ivan Franko L'viv National University, Ukraine, lyubov.romaka@gmail.com

Study of the metallic systems by isothermal sections at selected temperatures reveals information on the formation, stability, homogeneity range and crystal structure of the intermetallics. The R-Cu-Sn (R- rare earths) systems were studied for the most rare earths [1,2] except Eu, Tb, and Tm. The phase relations in the Tb-Cu-Sn system were studied at 670 K using X-ray diffractometry and Scanning Electron Microscopy. According to performed X-ray and EPM analyses the Tb-Cu-Sn system at 670 K is characterized by formation of five ternary compounds (Fig. 1, Table). SEM-pictures of some alloys are shown in Fig. 2. The interstitial-type of the solid solution $TbCu_xSn_2$ based on the $TbSn_2$ (ZrSi₂-type) binary was observed up to 4 at.% Cu ($a = 0.4397(4)$, $b = 1.6211(2)$, $c = 0.4326(3)$ nm for $Tb_{32}Cu_4Sn_{64}$). Solubility of Sn in the $TbCu_5$ binary (AuBe₅-type) extends up to 5 at.%. Significant solubility of the third component in the other binaries was not observed under used conditions.

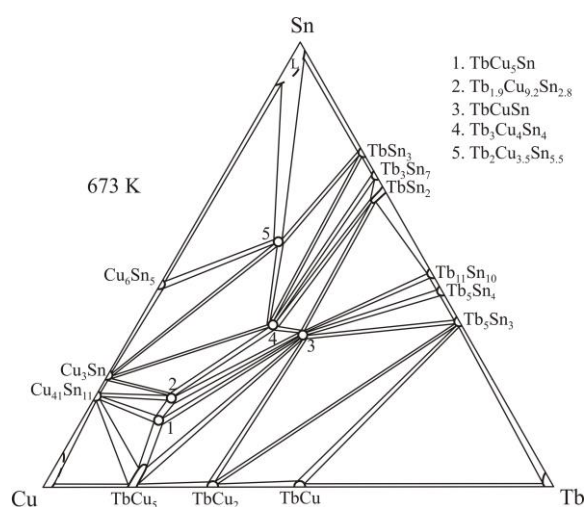


Fig. 1 Isothermal section of the Tb–Cu–Sn system at 670 K

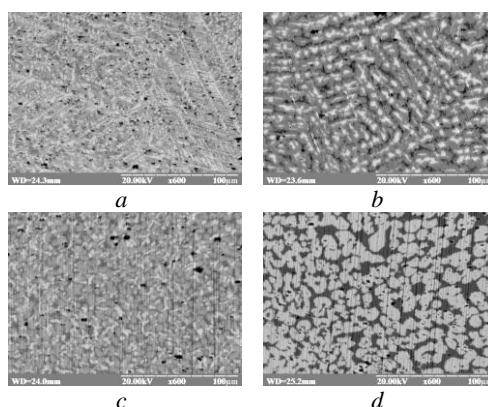


Fig. 2 SEM pictures of the Tb-Cu-Sn alloys: *a*) $Tb_{50}Cu_{40}Sn_{10}$ ($TbCu$ –grey phase, $TbCu_2$ –dark phase, Tb_5Sn_3 –light phase); *b*) $Tb_{17}Cu_{66}Sn_{17}$ ($TbCu_5Sn$ –grey phase, $TbCuSn$ –light phase, $Tb_{1.9}Cu_{9.2}Sn_{2.8}$ – dark phase); *c*) $Tb_{35}Cu_{45}Sn_{20}$ ($TbCuSn$ – grey phase, Tb_5Sn_3 – light phase, $TbCu_2$ – dark phase); *d*) $Tb_{13}Cu_{57}Sn_{30}$ ($Tb_3Cu_4Sn_4$ – light phase, Cu_3Sn – dark phase).

Table

Crystallographic characteristics of the ternary compounds in the Tb-Cu-Sn system

Compounds	Structure type	Lattice parameters, nm		
		<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>
TbCu ₅ Sn	CeCu ₅ Au	0.82205(1)	0.4978(3)	1.0576(6)
Tb _{1.9} Cu _{9.2} Sn _{2.8}	Dy _{1.9} Cu _{9.2} Sn _{2.8}	0.50355(9)	-	2.0414(6)
TbCuSn	LiGaGe	0.4517(2)	-	0.7272(3)
Tb ₃ Cu ₄ Sn ₄	Gd ₃ Cu ₄ Ge ₄	0.4421(3)	0.6939(3)	1.4547(5)
Tb ₂ Cu _{3.5} Sn _{5.5}	Sm ₂ Cu ₄ Sn ₅	0.4404(4)	-	2.5854(3)

The investigated Tb-Cu-Sn and previously studied R-Cu-Sn systems with heavy rare earths showed a close analogy in stoichiometry and crystal structure of the most formed ternary compounds (except Yb-Cu-Sn system). Similarity of the all systems is demonstrated by the formation of the compounds RCuSn, R₃Cu₄Sn₄, R_{1.9}Cu_{9.2}Sn_{2.8} and RCu₅Sn. The stannides with Sm₂Cu₄Sn₅ structure type realize in the systems with Gd, Tb and Dy.

1. Skolozdra R.V.: in: K.A. Gschneidner, Jr. and L. Eyring (Eds.), Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths, – 1997. – Vol. 24.
2. Romaka V.V., Romaka L.P., Krajovskyj V.Ya., Stadnyk Yu.V. Stannides of rare earth and transition metals. Lviv Polytech. Univ. – 2015. – 221 p.

FUTURE DEVELOPMENT BACTERICIDAL CERAMIC GLAZES FOR CERAMIC TILES

Savvova O.V., Fesenko O.I., Voronov H.K., Molchanova K.I.

O.M. Beketov National University of Urban Economy in Kharkiv , Oleksii.Fesenko@kname.edu.ua

Today, a significant problem of mankind is the spread of pathogenic microorganisms and viruses, which are constantly mutate, which reduces or completely loses their sensitivity to a wide range of antiviral or antimicrobial substances [1].

Given the spread of epidemics of various etiologies, it is especially important to provide antibacterial protection for public places where the risk of spread is greatest. Such places include: hospitals (infectious and maternity wards; resuscitation and operating units; medical pharmaceutical and microbiological laboratories), catering facilities (kitchens and food distribution areas), subways (walls and floors of stations and crossings), sanitary facilities of hotels and hostels (showers, toilets, personal hygiene rooms), premises of state administrations and public protection services (halls, general meeting rooms, administrative offices).

Therefore, an important direction in the development of methods for combating pathogenic bacteria and viruses, in places where a large number of people congregate, is the creation of effective means of suppressing them, which will provide long-term antibacterial protection.

Depending on the decorative and functional purpose, ceramic tiles are traditionally used for decoration and sanitary and hygienic protection of premises. It is characterized by high performance properties, but does not exhibit antibacterial properties against a wide range of pathogenic microorganisms. Achievement of these properties can be realized through the development of antibacterial glazes for ceramic tiles with prolonged action. Ensuring the effectiveness of such ceramic glazes requires the use of alternative antimicrobial agents that are characterized by high bactericidal and fungicidal activity against a wide range of pathogenic microorganisms and fungi, and do not have negative side effects on human body.

At present, the main means of combating bioinfections is the treatment of ceramic materials and coatings with biocides containing preparations [2]. A review of scientific and technical

literature and patent studies have shown that the most effective are polymeric antimicrobial substances, namely, compounds containing free nitrogen in their structure. An increase in the fungicidal resistance of building materials based on binding composites on glass cullet base [3], can be realized by their impregnation or surface treatment with liquids with biocidal additives containing guanidine [4]. Although guanidine is non-toxic to humans and is virtually non-corrosive to most materials, its use is limited by the need to reprocess the materials and adhere to surfaces that are treated with it.

Increasing the biological stability of silicate facade materials can be realized by reducing the amount of moisture that can be adsorbed in their structure or on the surface by adjusting the properties of materials. For example, ensuring low water absorption of materials – with an increase in the degree of sintering of the mass or a decrease in the surface water affinity due to an increase in its roughness [5]. The effectiveness of this method is ensured by a decrease in the intensity of attachment of filamentous fungi in the pores of silicate materials.

However, this method is not effective for glass materials, in particular for ceramic glazes. It is known that the immobilization of pathogenic microorganisms to the surface of glass materials is realized by covalent binding of the enzyme to the material. Therefore, to provide antibacterial and / or fungicidal properties of glass materials, various types of bactericidal and / or fungicidal fillers are introduced into their composition.

Bactericidal glazes for ceramic tiles are capable of providing reliable long-term antibacterial protection, preventing the development of infectious diseases, which will generally increase the level of sanitary services for the population, and also significantly reduce the funds needed for sterilization and disinfection of public occupancy spaces. The analysis of domestic and foreign literature and patent data has shown that the most common way of imparting an antibacterial effect to glass materials, in particular, glazed ceramic tiles, is to use the properties of silver ions.

Biocera Co., Ltd (USA) developed antibacterial ceramic powders based on calcium phosphates, alumina and quartz with silver ions [6]. The product has a FDA safety certificate, as a non-toxic material, it is characterized by a high antibacterial and antifungal effects (99%) and a prolonged action.

The German company *Zahna Fliesen GmbH* offers high quality and aesthetic Silverzanit® ceramic tiles that are treated with an antibacterial ceramic glaze [7]. Silverzanit® antibacterial ceramics actively prevent bacterial contamination of tiles and reduce the risk of microbial contamination for the whole environment. It prevents the development of the four essential strains of microorganisms *Staphylococcus aureus*, *Escherichia coli* (*E. Coli*), *Candida albicans* and *Pseudomonas aeruginosa* with a guaranteed reliability of 99.9 %.

The Japanese company *Sumitomo Osaka Cement Co., Ltd* [8] has developed antibacterial additives that are capable of imparting antibacterial properties to cements and ceramic products, such as sanitary ware and tiles. The developed additive AM15 consists of an inorganic composition that also includes silver compounds.

One of the innovative approaches to simultaneously improve the mechanical properties and corrosion resistance of ceramics is the addition of nanomaterials to the ceramic glaze. The authors of [9] investigated the characteristics of anatase, which was mixed with glaze and applied to ceramic tiles by flow coating. Nanosized crystals of anatase, in comparison with crystals of micron size, exhibit several times higher antibacterial properties due to their greater reactivity. The authors of [10] investigated the effect of the introduction of nano-sized compositions Ag/ZnO on the hardness, whiteness and structure of the glaze. The results showed that this nanocomposite significantly increases the performance properties of glazes, and its amount determines their bactericidal effect.

However, studies of the effect of silver on living organisms ambiguously indicate the presence of a cumulative effect for it, which consists in the complicated removal of this element from the body even at low concentrations. In addition, silver is selectively active against pathogens of various diseases.

The use of anatase as a bactericidal agent is effective only if the photocatalysis process is possible on the surface of the material [11]. This fact may indicate a decrease in the effectiveness of

the use of antibacterial coatings containing anatase in places with low natural light. The authors [12] found that to provide bactericidal properties to glass materials and coatings with their simultaneous protection from biocorrosion, the use of combined active fillers of biocidal agents, including zinc and tin oxides, is effective.

Due to the lack of data on the possibility of using ceramic products in areas of high risk of infection with pathogenic microorganisms, it is necessary to develop resourceful bactericidal glass-composite glazes for ceramic tiles with a prolonged action and the use of inexpensive and environmentally friendly biocides in their composition.

The aim of this work is to identify promising directions for the development of bactericidal glazes for ceramic tiles with prolonged action against a wide range of microorganisms.

The process of developing innovative bactericidal glazes for ceramic tiles can theoretically be divided into several stages, each of which will have its own characteristics: the choice of bactericidal agents and scalpers; determination of the effect of the filler on the physicochemical, operational and technological properties of the glaze; analysis of standards for microbiological assessment of the effectiveness of the inhibitory action of bactericidal glass coatings and determination of their bactericidal action. Let's consider in more detail each of the stages.

In general, the following requirements are imposed on modern biocidal materials [13]:

- high activity against harmful bacteria and microorganisms (bactericidal and / or bacteriostatic properties of the powder);
- safety in use (lack of toxic effects on the human body);
- hygienic (no negative impact on the environment);
- availability and low cost;
- inertness (no effect on physicochemical, mechanical and other properties of materials).

According to their biocidal action, powders are divided into 3 groups (Table 1). Evaluation of the bactericidal action can be carried out using two methods. The first method is a delay in the growth of colonies of forming units (CFU), which provides for the determination of a decrease in the number of CFU of microorganisms in a nutrient medium in the presence of test samples relative to the number of CFU of only a test culture. The second method is behind the zone of growth retardation of the test culture, which involves measuring the distance from the center of the test material to the growth boundary of the test culture. To carry out these studies, flat round samples with a diameter of 10 mm are formed from the experimental compositions.

Table

Classification of bactericidal powders by biocidal action

Indicators	Efficiency level		
	low	medium	high
CFU growth retardation, %	1÷20	20÷50	50÷100
Culture growth retardation zone, mm	10÷15	15÷20	more than 20

For biocidal powders, technical and economic requirements for expediency and environmental friendliness associated with the features of glass materials are also presented: powder dispersion – 0,1÷100 microns; filler content – 1÷5 wt. % per 100 wt. % ceramic frit; powder color – depending on the opacity and color of the glass.

The choice of biocidal agents should be realized taking into account the constantly growing anthropogenic pollution of the environment with heavy metals, their toxicity and impact on living organisms.

The toxicity of metals as bactericidal agents can be determined by different classifications and indicators. The most common of which are:

1. The degree of toxicity with the introduction of heavy metal compounds (DL50 is the average dose of a substance that causes the death of half of the members of the research group), which can be calculated on the basis of the ionization potential of the atoms of the element, its electronegativity, the work function of an electron or atomic radius;

2. Biological activity or the role of an element in the natural functioning of the body (essential macro- and microelements, conditionally essential, non-essential and toxic);
3. By the molar mass of elements (elements with a molar mass of more than 200 Da are toxic).

Considering the above indicators and the possibility of using metals in the composition of the glaze, essential biocidal components are effective: macroelements – Ca, Mg and microelements – Cu, Cr, Mn, Ni, Zn, Te, Se. Taking into account the requirements for biocidal powders that are used as inhibiting agents in glass coatings, it is possible to recommend the introduction of these elements into the composition of glazes in the form of oxides (oxides of titanium, calcium, magnesium, zinc, tin and antimony) or salts (zinc titanate, zinc phosphate, copper phosphate and others).

To obtain biocidal glass coatings on ceramics, the glass matrix must meet the following set of requirements:

- 1) its own bacteriostatic effect, which makes it impossible for microbes to multiply on it;
- 2) the ability to finely dispersed bulk crystallization with the formation of bactericidal agents under conditions of glass melting and coating firing;
- 3) "relatively" high chemical resistance to inorganic and organic solvents (it must provide both high resistance of ceramic tiles to solvents and sufficient solubility for the release of cations of bactericidal agents).

To ensure a set of requirements, it is effective to introduce zinc and titanium oxides into the irrigation composition, which enhance the crystallization ability, and can also be released from the glassy melt in the form of ganite, willemite, zinc titanates and, along with ensuring their bactericidal properties, ensure their chemical resistance and wear resistance. It is also expedient to introduce phosphorus oxide, which in the structure of glass ceramics, both the glass-forming and the phase-forming component, can act as a biological filter containing heavy metal ions in its structure.

In accordance with world standards, the parameters of the performance properties of biocidal coatings, they must exhibit a prolonged bactericidal effect against pathogenic microorganisms:

- biocidal effect (destruction of at least 10 % of microbes after 24 hours of exposure) according to GOST 9.049-91 [14];
- biostatic effect (slowing down the growth of microbes after 24 hours of exposure by $1 \div 10$ %) for ASTM Standards Designation: E 2149-01 and E 2196-02 [15, 16].

Methods for assessing the bactericidal action should be adapted in accordance with the operating conditions of glass coatings in accordance with the current sanitary standards [17, 18]. Considering that ceramic tiles are used in the premises of sanitary services, educational and medical institutions, it is necessary to establish the number of colonies of the forming organisms (CFU) of the E. coli culture in the aquatic environment, in washes from surfaces and in the air. When establishing the limits of permissible values of CFU/g of microorganisms, it is also necessary to take into account the composition of the human intestinal microflora.

To simulate infectious contamination of glass coatings, it is recommended to use a qualitative diffusion method for migrating compounds and quantitative methods (aerosol or counting) for covalently fixed biocidal preparations with a CFU index of microorganisms of $10^3 \div 10^7$ cells/ml, including when the epidemic threshold is exceeded.

The existing standards for determining the biocidal properties of various types of materials by a quantitative method are not effective for evaluating glass coatings. It should be noted that standardized methods for the determination of bioprotective properties have certain limitations. First, they provide for the determination of indicators for microorganisms after 24 hours after bioassay, characterizing a short-term biocidal effect. This makes it impossible to assess the dynamics of changes in the bio-protective properties of coatings. However, such data are very valuable information, since they allow predicting the period of effective biocidal action of materials. Therefore, it is advisable to increase the exposure period and determine indicators at various stages of research (for example, 1, 7 and 14 days).

The relevance of the development of antibacterial glazes for ceramic tiles in terms of increasing social protection of the population and environmental safety has been determined. The main directions of development of biostable ceramic materials and the main methods of ensuring

bactericidal properties are analyzed. It was determined that the most promising compounds, as fillers for glazes, are oxides and / or metal salts, which belong to essential macro- (Ca, Mg) and microelements (Cu, Cr, Mn, Ni, Zn, Te, Se). The need for step-by-step studies of bactericidal properties of antibacterial glazes by diffuse and quantitative methods with an CFU of microorganisms $10^3 \div 10^7$ cells/ml.

The use of bactericidal components in the composition of irrigation, both specially introduced fillers and by directional crystallization, will provide reliable prolonged protection of the environment from pathogenic microorganisms under conditions of anthropogenic stress and epidemiological threats, expand the range of ceramic products and increase their competitiveness.

1. Savvova O.V., Bragina L.L. Antibacterial composite glass coatings for protecting special-purpose steel panels // *Glass and Ceramics*. – 2010. – Vol. 67, Iss. 3-4. – P. 123-125.
2. Lysak V.V. *Microbiology: [Tutorial]* / V.V. Lysak. – Minsk: BSU, 2007. – 426 p.
3. Erofeev V.T. Glass-based building materials / V.T. Erofeev, A.D. Bogatov, S.N. Bogatova, [et.al] // *Bulletin of the Mordovian University*. – 2008. – Vol. 3. – P. 70-79. [in Russian].
4. Svetlov D.A. Biocidal preparations based on polyhexamethylene-guanidine derivatives / D.A. Svetlov // *Life and safety*. – 2005. – № 3. P. 46-48 [in Russian].
5. Koss L.S. Modern diagnostic methods and technological principles of fabrication of bioresistant ceramic materials / L.S. Koss, E.Yu. Fedorenko, N.F. Lesnyh [et.al] // *Voprosy Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii*. – Iss. 1. – 2018. – P. 78-86.
6. Biocera-nano-silver. URL: <https://www.biocera.com/antimicrobial-biocera-nano-silver-agent> (date of visit 23.03.2021).
7. Zahna-fliesen. Zf industrie. Silverzanit-antibacterial ceramics. URL: <https://www.zahna-fliesen.de/en/download.html> (date of visit 23.03.2021).
8. Advanced material. Technical Report. Properties of Antibacterial Additive for Pottery. URL: <https://www.soc.co.jp> (date of visit 15.02.2021).
9. Hasmaliza M. Anatase as antibacterial material in ceramic tiles / M. Hasmaliza, H.S. Foo, K. Mohd // *Procedia Chemistry*. – 2016. – Vol. 19– P. 828-834.
10. Qian Zhang Improvement of mechanical properties, microscopic structures, and antibacterial activity by Ag/ZnO nanocomposite powder for glaze-decorated ceramic / Qian Zhang, Lv Si Xu, Xiaoyan Guo // *Journal of Advanced Ceramics*. – 2017. – Vol. 6. – P. 269-278.
11. Savvova O.V., Bragina L.L. Use of titanium dioxide for the development of antibacterial glass enamel coatings // *Glass and Ceramics*. – 2010. – Vol. 67, Iss. 5-6. – P. 184-186.
12. Savvova O.V. Effect of zinc and tin oxides on the bactericidal properties of glass enamel coatings / O.V. Savvova // *Glass and Ceramics*. – 2014. – Vol. 71, Iss. 7-8. – P. 254-257.
13. Pekhtasheva E.A. Biodeterioration and protection of non-food products: [Tutorial]. / E.A. Pekhtasheva. – Moscow: Masterstvo, 2002. – 224 p. [in Russian].
14. Unified system of corrosion and ageing protection. Polymer materials and their components. Methods of laboratory tests for mould resistance.: ISO 846-78: HOST 9.049-91. – Moscow: Standart. – 1991. – 15 p. [in Russian].
15. Standard test method for determining the antimicrobial activity of immobilized antimicrobial agents: ASTM E2149-13a. URL: <https://www.astm.org/Standards/E2149.htm>.
16. Standard test method for quantification of a Pseudomonas Aeruginosa biofilm grown with shear and continuous flow using a rotating disk reactor: ASTM E 2562-19. URL: <https://www.astm.org/Standards/E2871.htm>.
17. Fine ceramics (advanced ceramics, advanced technical ceramics) – Test method for antibacterial activity of semiconducting photocatalytic materials ISO 27447:2009. URL: <https://www.iso.org/standard/44156.html>
18. Ceramic tiles. Technological mind: EN 14411:2006, NEQ: DSTU B.2.7-282:2011. – Kiev: National Standard of Ukraine. – 2012. – 73 p.

ASSOCIATION WITH THE PARTICIPATION OF DYES IN SOLUTIONS: EQUILIBRIUM CHARACTERISTICS OF NANOSYSTEMS

Shapovalov S. A.

V. N. Karazin Kharkiv National University, Ukraine, serghey.a.shapovalov@karazin.ua

Cyanine dyes are advantageous in that they are intensely colored and possess appropriate protolytic properties ensuring the existence of the desired ionic species in aqueous solution in a wide pH range [1–3]. However, to take full advantage of the properties of ion association species in chemical analysis, it is necessary to know the association mechanism. This is the reason why the association of the singly charged cations quinaldine blue (QB) and quinaldine red (QR⁺) with anions of sulfonephthalein dyes and the effects of ionic surfactants on the resulting association species were made the subject of a special study. Singly or doubly charged anions of bromothymol blue (BT) were examined.

Data demonstrated that the singly and doubly charged sulfonephthalein anions are the most appropriate counterions for the above cyanines since they are well soluble and stable and their absorption bands are fairly resolvable. Examination of association species with different compositions is pertinent to gain insight into the effect of the counterion structure and charge on association, and kinetic study of the decomposing effect of various types of surfactant is expected to refine the mechanism of association.

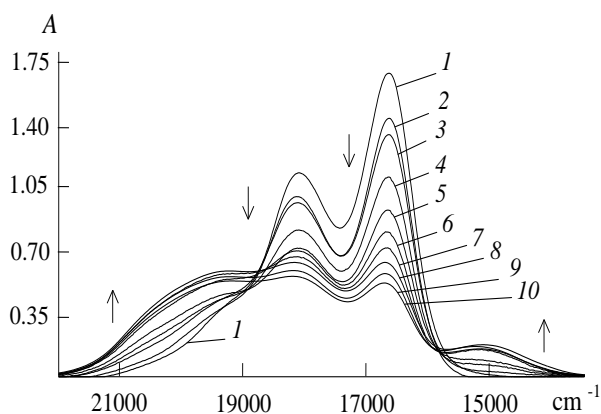


Fig. 1 Absorption spectra of “QB + BT” mixtures. Concentrations: of QB: $4.93 \cdot 10^{-6} \text{ mol} \cdot \text{l}^{-1}$ (1–10); of BTB: 0 (1), $4.98 \cdot 10^{-7} \dots 2.49 \cdot 10^{-5}$ (2–10). pH 9.6. Optical path length is 5.00 cm. Blank solutions are QB-free solutions with the same BT concentrations

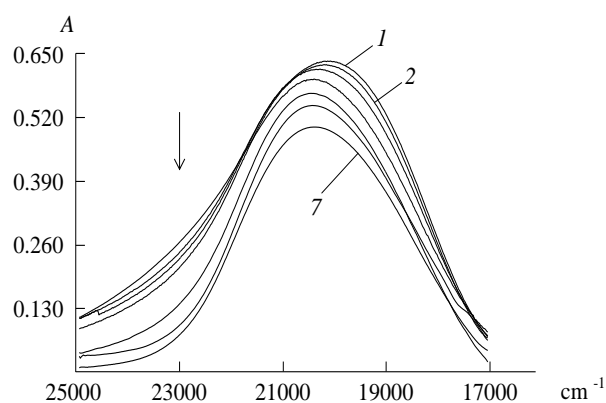


Fig. 2 Absorption spectra of “QR + BT” mixtures. Concentrations, $\text{mol} \cdot \text{l}^{-1}$: of QR: $2.05 \cdot 10^{-5}$ (1–7); of BT: 0 (1), $5.9 \cdot 10^{-6} \dots 1.3 \cdot 10^{-4}$ (2–7). pH 9.6. Optical path length is 1.00 cm. Blank solutions are QR-free solutions with the same BT concentrations

The following research tasks were formulated:

1) to analyze the spectral data (Figures 1, 2) on the heteroassociation between cyanine (QB, QR) and sulfonephthalein (BT); 2) to determine the structure and energetics of the formation of associates using spectral and quantum chemical methods; 3) to study the thermodynamics and kinetics of intermolecular interactions, taking into account the peculiarities of the chemical composition and stoichiometry of the associates.

1. Shapovalov S.A. Cation-anionic association of organic dyes in aqueous solutions: Structure and properties of associates//Modern Org. Chem.Res.–2017. – Vol. 2, № 4. – P. 195–203.

2. Shapovalov S.A. Association of quinaldine red cation in an aqueous solution: The interaction with anionic dyes // AASCIT J. Nanosci. – 2017. – Vol. 3, № 6. – P. 35 – 40.

3. Shapovalov S.A., Svishchova Y.A. Heteroassociates of pinacyanol cation in aqueous solutions: formation and their interaction with organic multiply charged anions // French-Ukrainian J. Chem. – 2018. – Vol. 6, № 1. – P. 21 – 30.

PHOSPHORITE WASTE TREATMENT WITH LOW CONCENTRATIONS OF SULFURIC ACID

Tagaev I.A.¹, Andriyko L.S.², Doniyarov N.A.¹, Murodov I.N.¹, Asrorov A.A.¹

¹Navoi State Mining Institute, 170 Galaba ave., Navoi, 210100, Uzbekistan

²Chuiko Institute of Surface Chemistry, NAS of Ukraine, Ukraine

andriykolyuda@gmail.com

In Uzbekistan, great attention is paid to the integrated processing and extraction of the maximum amount of useful components from mineral resources and the creation of cost-effective technologies for the processing of technology-related waste, the maximum increase in the degree of waste processing and the reduction of production costs, the development and implementation of promising export-oriented new technologies [1-2]. Yearly, the demand for phosphorus-containing fertilizers is growing, and the quantity and quality of currently mined easily-concentrating phosphorite ores is deteriorating. In this regard, it becomes necessary to involve in the processing of the worst quality ore and to search for effective ways of their enrichment.

At the Kyzylkum phosphorite plant (KFP), after the phosphorite ore washing, fine slime waste is released, containing from 12 to 16% of the important component of P_2O_5 . The chemical and mineralogical composition of the outwashing fine fractions is fundamentally identical to that of phosphorite ore, in which calcite cement and clay aluminosilicates are concentrated. The mineralogical composition of phosphorite slimes is represented by the complex mineral francolite (up to 56%). Francolite may contain not only P_2O_5 (> 70%), but also compounds of uranium and rare earth elements. In micrographs, francolite is mainly imaged by irregularly shaped particles of brown and light brown color. The mineral calcite takes the second place (22.5%). Micrographs of phosphorite particles were made on a binocular microscope of the NLCD-307B brand with digital modeling and a monitor based on android OS «Ningbo optics» (PRC).

Measurements of the pH medium showed a slight deviation from the neutral level. The main reason for the stable pH value was the decomposition of calcium carbonates and the $Ca(OH)_2$ hydroxides formation. In mixing reactors, the slime was treated with low concentrations of sulfuric acid (2, 4, 6 and 8 g/l) in the ratio $S : L = 1 : 10$, and after stirring for 30 minutes the mass moved to thickeners, in which liquid and solid phase were separated. Analysis of the quantitative P_2O_5 content demonstrated that low concentrations of sulfuric acid did not lead to significant dissolution of P_2O_5 . During sulfuric acid treatment (2 and 4 g/l), this component released into solution in the range of 0.09-0.22 %. The enhancing of sulfuric acid concentrations till 6-8 g/l allowed to increase the P_2O_5 content by 4%.

It was also found that when processing with concentrations of 2 and 4 g/l, the initial mass (100 g) decreased to 98.5-99.14 g. Further, at a concentration of 6 g/l, the mass levels out and becomes 100.98 g and from 8 g/l, there is a steady increase in the mass of the sediment till 103.3 g, which indicates the gradual formation of gypsum and phosphogypsum. In a quantitative ratio, the balance of the compounds that have passed into the liquid phase, is: calcium compounds (62.10%), sodium compounds (17.63%) and magnesium (9.74). The amount of other compounds in the solution is insignificant, however, this result will play an important role in the slime enrichment. However, uranium compounds (59 g/tonn in the initial slime) begin to dissolve even at low concentrations of sulfuric acid, and especially at concentrations of 6 and 8 g/l H_2SO_4 , 49 g/tonn was released into the solution, then 59 g/tonn, i.e. all the uranium completely passed into liquid phase. It is known that when uranium is mined by the borehole method, weak concentrations of sulfuric acid dissolve 6-valence uranium. This means that the phosphorite slimes contained mainly 6-valent uranium. Oxidation of 4-valence uranium to 6-valence state in phosphorites is apparently due to the presence of phosphorite in near-surface layers at a depth of 15-25 m, into which oxygen may easily penetrate. Thus, the important fact of the uranium separation from P_2O_5 in phosphorite slimes during sulfuric acid treatment has been noted.

Microscopic analysis of the initial sample at 100-fold magnification showed the presence of a large number of small, shapeless, angular, brown francolite grains, bordered on all sides by light

gray, translucent calcite crystals (Fig. 1a). Francolite grains have well-formed edges. Their size varies from 500 to 1200-1500 μm . The calcite grain size is significantly smaller and range from 20 to 60 μm .

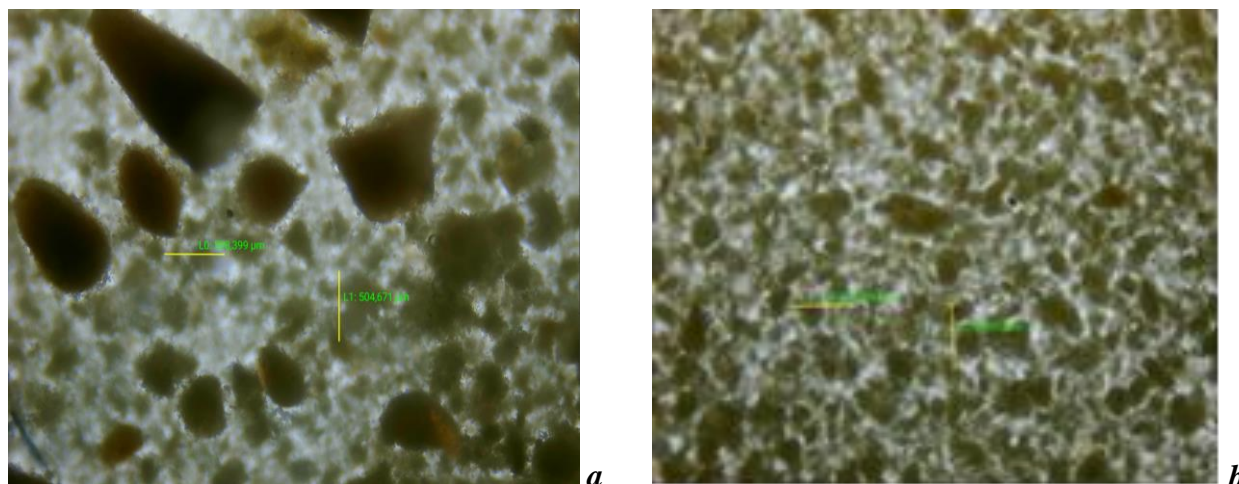


Fig. 1 Images of mineral components of phosphorite slime: *a*) initial; *b*) after treatment with sulfuric acid 8 g/l (10x10 magnification)

The most effective variant after sulfuric acid treatment with the concentration of 8 g/l was selected, where a significant decrease in the size of francolite grains was noted on microscopic images at 100-fold magnification (Fig. 1b). Images demonstrate dissolution of small francolite grains, and large francolite grains became loose, swollen and acquired a light brown tint. The size of the francolite grains is in the range from 40 to 160 μm . The number of semitransparent calcite crystals increase significantly and they acquire an irregular shape, covering the francolite grains with a light gray bloom.

Thus, the treatment with low concentrations of sulfuric acid, made it possible to get rid of a large amount of such interfering impurities as salts of alkali and alkaline earth metals, uranium, and others but the important component remains in the sediment – P_2O_5 . Consequently, the slime fraction enriched by this method is superior in quality to high-quality phosphorite ore. The application of this method in practice will make it possible to utilize slimes and use them as an additional product.

1. Tagaev I., Doniyarov N., Asrorov A., Murodov I., Usanbaev N.KH., Temirov U. Distinctive IR-Spectroscopic Features of Functional Groups of Low Grade Phosphorites After Microbiological and Acid Processing. // Land Science. – 2020. – V. 2, N 1. - P. 43-54. <https://doi.org/10.30560/ls.v2n1p43>.

2. Murodov I.N., Tagaev I.A. The central Kysylkum phosphorites' origin character and conditions of determination of rare earth elements and uranium in them. XVI International FORUM-CONTEST of students and young researchers “Topical issues of rational use of natural resources”. Under the auspices of UNESCO. 17-19 June 2020 // Scientific Conferens Abstracts. V. 1. Saint-Petersburg. – 2020. – P. 250-251.

COORDINATION COMPOUNDS CONTAINING MEDICINAL SUBSTANCES

Zhorzholiani N.B.¹, Amirkhanashvili K.D.¹, Molodinashvili Z.F.¹, Khmaladze L.I.²

¹Petre Melikishvili Institute of Physical and Organic Chemistry of Ivane Javakhishvili Tbilisi State University, Tbilisi, Georgia

²Department of Medicine, School of Health Sciences. University of Georgia

Actuality of synthesis and study of new coordination compounds containing various safe organic ligands is conditioned by their diverse application. Nowadays, the bioinorganic chemists target the heterocyclic ligands and their metal complexes to study their pharmacology as the main focus of research. The introduction of metal ions or metal ion binding components into a biological system for the treatment of diseases is one of the main subdivisions in the field of bioinorganic chemistry [1-5]. We pursue to resolve one part of this big problem: to obtain and study coordination compounds of transitional- and bio-metals with local anesthetics or sulfa drugs.

Coordination compounds of Zn(II) and Mn(II) with general formula $(LidH)_2[MeX_4] \cdot nH_2O$, $(NovH)_2[MeX_4] \cdot nH_2O$, $Me(SA)_2X_2$, where $X = Br^{-1}, NCS^{-1}$, $n=0-2$, Lid- Lidocaine, Nov-Novocaine, SA- Anesthezine have been synthesized in water or acetone-methanol solutions and characterized by elemental analysis, IR spectra, thermoanalytical TG-DTG/DTA and single-crystal X-ray diffraction methods. IR-spectroscopic researches of complexes indicate that Zn(II) and Mn(II) coordinate directly with acidoligands ($Me-Br^{-1}, Me-NCS^{-1}$ bond). The evidence of that is existence of just one adsorption band of 425 and 430 cm^{-1} in the IR-spectra of complexes. Molecule of Lidocaine as cation forms outer sphere as a result of protonating (3410 and 3446 cm^{-1}) of trio nitrogen atom. Studying the spectra of compounds does not make it possible to conclude that the connection between the metal and Novocaine or Lidocaine occurs. Here, the ligand is protonated and acts as a cation and the vibration band in the 140-400 cm^{-1} region corresponds to the stretching vibrations of the tetrahedral anion $[M(NCS)_4]^{2-}$. Thermal decomposition of each complex proceeds stepwise. Similarly, complexes of the composition $Me(SF)_2X_2$ and $(SFH)_2[MeX_4]$ were obtained from methanol-acetone solutions, where Me-Mn(II), Zn(II), Cd(II); SF-neutral and SFH-protonated sulfonamide molecules: Sulfapyridazine(SP), Sulfadimethoxine(SD), Etazole(Eta), $X = NCS^{-1}$. Complexation in water-acetone (1:1) solutions of compounds SP, SD, Eta was studied by potentiometric method. The thiocyanate complex formation function shows that \bar{n} reaches two, which suggests the presence of $Me(SF)X_2$ and $Me(SF)_2X_2$ in solution, that is, two ligand molecules gradually attach to $Me(NCS)_2$.

The structure of the compounds is proposed based on infrared absorption spectrum analysis, X-ray diffraction analyses and the literature data; $(LidH)_2[ZnCl_4]$ crystallizes in the monoclinic space group $P2_1/c$ with $a = 8.8921(2)$, $b = 19.2650(3)$, $c = 19.3211(3)$ Å, and $Z = 4$, $D_c = 1.366$ Mg/m^3 , and consists of the $ZnCl_4^{2-}$ slightly distorted tetrahedral anion and two protonated cations of lidocaine $LidH^+$ in an outer coordination field [6].

Metal chelation and its relationship with various biological processes, a great way to expand research to develop novel therapeutic methodologies. On coordination, ligands can improve their bioactivity profile and the character of the organic moiety.

1. Guerra W., Silva-Caldeira P.P., Tezenzi H., Pereira-Maia E.C.. Review. Impact of metal coordination on the antibiotic and non-antibiotic activities of tetracycline-based drugs // J. Coordination Chemistry Reviews. – 2016. – pp. 188-18

2. Motahar Hossain, Abul Bashar, Nuruzzaman Khan, Pijust Kanti Roy, Siddir Ali, Alhter Farooque, Preparation, Physical Characterization and Antibacterial Activity of Ni(II), Co(II), Cd(II), Zn(II) and Cr(III) Schiff Base Complex Compounds. Bangladesh // Science Journal of Chemistry. – 2018. – 6(2). – pp.17-23.

3. Beshkenadze I.A., Zhorzholiani N.B., Tsitsishvili V.G., Urotadze S. L. et al. Patent U 1956 „The Use of Chelating Zinc (II) in Vermicultivation”. National Center for Intellectual Property of Georgia, Tbilisi, 28 December. – 2017.

4. Tabrizi L., McArdle P., Erxleben Andrea, Chiniforoshan H. „Ni(II) and Co(II) complexes of lidocaine: Synthesis, structure and comparative in vitro evaluations of biological perspectives”. // European Journal of Medicinal Chemistry. – 2015. – 103. – pp. 516-529.

5. Ketan S. Patel, Jiten C. Patel, Hitesh R. Dholariya, Vishal K. Patel, Kanuprasad D. Patel. Synthesis of Cu(II), Ni(II), Co(II), and Mn(II) Complexes with Ciprofloxacin and Their Evaluation of Antimicrobial, Antioxidant and Anti-Tubercular Activity // India. Journal Scientific. – 2012. – 2 (3). – p.49-59.

6. Amirkhanashvili K., Sobolev A., Zhorzholiani N., Tsitsishvili V. Re-refinement of Crystal Structure of Bis(Lidocaine) Diaquatetrathiocyanato Nickelate(II) // Chemistry Journal Of Moldova. General, Industrial and Ecological Chemistry. – 2020. – 15(1). – pp. 67-74.

ПРО СКЛАД ПРОДУКТІВ ВЗАЄМОДІЇ МАГНІЮ ГІДРОКСОКАРБОНАТУ З ФОСФАТНИМИ КИСЛОТАМИ РІЗНОГО АНІОННОГО СКЛАДУ

Антрапцева Н. М.¹, Біла Г. М.², Дьомін Д. М.¹

¹Національний університет біоресурсів і природокористування України,

²Національний університет харчових технологій

aspirant_nubipu@ukr.net

Полімерні фосфати двовалентних металів найчастіше одержують термообробкою відповідних кристалогідратів або осадженням з водних розчинів солей (сульфатів, хлоридів, нітратів ін.) розчинами дифосфатів калію (натрію або амонію). Такі дослідження описані досить повно в [1,2]. Відомості про їх одержання взаємодією поліфосфатних кислот із гідроксикарбонатами в літературі практично відсутні.

Мета даної роботи – дослідити умови взаємодії магнію гідроксикарбонату з фосфатними кислотами різного аніонного складу з конкретизацією складу одержаних продуктів.

Для вивчення умов взаємодії і складу фосфатів, що утворюються, були синтезовані поліфосфатні кислоти (ПФК) різного аніонного складу, включаючи ди-, три- і тетрафосфатну кислоти з вмістом P_2O_5 від 73.50 до 76.04 % мас.

Оптимальні параметри процесу обирали за результатами дослідження в окремих серіях дослідів впливу на склад продуктів взаємодії таких факторів: -температура; -співвідношення $K=P_2O_5/MgO$ у складі вихідних реагентів; -норми і в'язкості ПФК; -складу та кількості органічного розріджувача; -тривалості взаємодії.

Вплив температури на склад фосфатів досліджували при 20–70 °С, використовуючи кислоту із загальним вмістом P_2O_5 73.50 % мас., що відповідає вмісту P_2O_5 у вигляді моно- (56.23 %) і ди- (17.27%) фосфатних кислот. $K=P_2O_5/MgO$ змінювали від 1.00 до 2.80.

Ідентифікацію твердої фази виконували за допомогою комплексу хімічних і фізико-хімічних методів аналізу: рентгенофазового аналізу (дифрактометр ДРОН-4-М, Cu K_{α} , внутрішній стандарт NaCl), ІЧ спектроскопії (спектрометр Nexus – 470, діапазон частот 400 – 4000 cm^{-1} , пресування фіксованої наважки (0.05 %) в матрицю калію броміду). Аніонний склад фосфатів визначали методом кількісної паперової хроматографії, аналогічно описаному в [2].

Відповідно до одержаних результатів, значимими параметрами процесу взаємодії ПФК із магній гідроксикарбонатом є: температурний режим 20–25 °С; розріджувач – ацетон у відношенні до ПФК=1:1; значення $K=P_2O_5/MgO$ залежить від аніонного складу ПФК і збільшується із зростанням загального вмісту P_2O_5 у складі ПФК ($1.76 \leq K \leq 1.81$ для кислоти з вмістом P_2O_5 до 73.50 % мас.; $2.00 < K < 2.75$ – із вмістом P_2O_5 76.04 % мас.).

За результатами комплексного аналізу фосфатів, що утворюються за вказаних умов визначено, що на основі поліфосфатних кислот із загальним вмістом P_2O_5 у межах 72.18–76.04 % мас. (вміст $H_4P_2O_7$ – 14.87–31.18 %, $H_5P_3O_{10}$ –5.57%) утворюється гетерофазна суміш

двох кристалічних фаз, ідентифікованих як монофосфати складу $Mg(H_2PO_4)_2 \cdot 2H_2O$ і дифосфати (протоновані $MgH_2P_2O_7$ та середні $MgP_2O_7 \cdot 2H_2O$);

Кількісні співвідношення моно- і дифосфатів залежать від складу ПФК: із збільшенням вмісту $H_4P_2O_7$ у складі ПФК з 14.87 % до 31.18 % кількість дифосфатів зростає з 6.0–7.0 % до 25.0–27.00 % (у перерахунку на P_2O_5). Максимальна кількість дифосфату (27.39%) утворюється на основі ПФК із загальним вмістом P_2O_5 74.06 % при використанні розріджувача (ацетон).

Із збільшенням у складі ПФК загального вмісту P_2O_5 і, відповідно, вмісту поліфосфатних аніонів тривалість утворення кристалічних магній фосфатів зростає (із 70–75 днів при P_2O_5 72,18–73,50 % до 125–135 днів при P_2O_5 74,06 %).

Утворення кристалічних магнію трифосфатів із використанням ПФК, що містять $H_5P_3O_{10}$ до 5.60 %, в умовах даного експерименту не відбувається.

Визначені умови взаємодії магнію гідроксокарбонату з поліфосфатних кислот різного аніонного складу використані для синтезу моно- і дифосфатів магнію.

1. Acton A.Q. Phosphates – advances in research and application / A. Q. Acton. – Atlanta, Georgia: Scholarly Editions, 2013. – 374 p.

2. Антрапцева Н.М., Солод Н.В. Тверді розчини фосфатів мікроелементів: Монографія. – К. : ЦП КОМПРИНТ, 2017. – 200 с.

ВЗАЄМОДІЯ В СИСТЕМІ $MgSO_4-CoSO_4-K_4P_2O_7-H_2O$

Антрапцева Н.М., Обломей С.О., Василенко І.М.

Національний університет біоресурсів і природокористування України,
aspirant_nubipu@ukr.net

Дифосфати магнію і кобальту широко використовують як основу для створення різноманітних неорганічних матеріалів: люмінофорів, каталізаторів, інгібіторів корозії, мастильних матеріалів тощо [1-3]. Застосування з цією метою твердих розчинів дифосфатів магнію і кобальту(II), які у своєму складі містять одночасно обидва ці катіони, дозволить створювати матеріали з прогнозованим комплексом покращених фізико-хімічних та експлуатаційних характеристик.

Для практичної реалізації синтезу твердого розчину гідратованих дифосфатів магнію і кобальту заданого складу необхідне знання кореляцій між умовами його одержання, складом і властивостями. Індивідуальні гідратовані дифосфати магнію і кобальту одержані як один з продуктів взаємодії в системах $MgCl_2-K_4P_2O_7-H_2O$ і $CoSO_4-K_4P_2O_7-H_2O$ [3]. Будь-які дані про тверді розчини гідратованих дифосфатів магнію і кобальту(II) в літературі відсутні.

Мета даної роботи – встановити склад та хімічну природу продуктів взаємодії в системі $MgSO_4-CoSO_4-K_4P_2O_7-H_2O$.

В якості вихідних реагентів використовували водні розчини сульфатів $MgSO_4 \cdot 7H_2O$ і $CoSO_4 \cdot 7H_2O$ та калію дифосфату $K_4P_2O_7$ марки “ч.д.а.”. Взаємодію в системі $MgSO_4-CoSO_4-K_4P_2O_7-H_2O$ вивчали з використанням методу залишкових концентрацій. Співвідношення осаджувача та йонів Mg^{2+} і Co^{2+} ($n = P/M^{II}$) на відміну від класичного застосування даного методу фіксували, змінювали лише співвідношення між катіонами, що осаджуються, зберігаючи постійною їх сумарну концентрацію.

Враховуючи дані, одержані під час конкретизації умов взаємодії у системах $MgCl_2-K_4P_2O_7-H_2O$ і $CoSO_4-K_4P_2O_7-H_2O$, як параметри, що забезпечують спільне осадження катіонів Mg^{2+} і Co^{2+} в системі $MgSO_4-CoSO_4-K_4P_2O_7-H_2O$ визначено такі: співвідношення у складі вихідних розчинів $n = P_2O_7^{4-}/\Sigma Mg^{2+}, Co^{2+} = 0.4$, $K = Mg/Co = 0.11 \div 19.00$; початкова концентрація вихідних розчинів – $C = 0,1$ моль/л; контакту твердої фази з маточним розчином – за досягнення рівноваги; температурний інтервал взаємодії – 293-298 К.

Досягнення стану рівноваги фіксували за встановленням постійного значення рН маточних розчинів при кожному конкретному значенні $K = \text{Mg}^{2+}/\text{Co}^{2+}$ з інтервалу, що вивчався (0,11÷19,00).

В складі маточних розчинів і кристалічної твердої фази визначали загальний вміст фосфору (гравіметричний хінолін-молібдатний метод), вміст катіонів Mg^{2+} і Co^{2+} (комплексометричний метод). Вміст води у твердій фазі визначали за втратою маси при нагріванні до 1073 К, аніонний склад – за допомогою кількісної паперової хроматографії.

Для ідентифікації твердої фази та вивчення дифосфатів використовували метод рентгенофазового аналізу (дифрактометр ДРОН-4-М, $\text{Cu K}\alpha$, внутрішній стандарт NaCl), методи коливальної спектроскопії (ІЧ спектроскопії – спектрометр Nexus – 470, діапазон частот 400 – 4000 cm^{-1} , пресування фіксованої наважки (0.05 %) в матрицю калію броміду; комбінаційного розсіювання – спектрометр ДФС-52, діапазон частот 200–1700 cm^{-1}).

Результати потенціометричних досліджень маточних розчинів, виконані з метою встановлення тривалості досягнення рівноваги між твердою фазою і маточним розчином під час спільного осадження катіонів Mg^{2+} , Co^{2+} дифосфат-йоном $\text{P}_2\text{O}_7^{4-}$, свідчать про те, що значення рН на цьому добу лишаються практично незмінними, характеризуючи досягнення в системі рівноваги за всіх значень K .

Хімічний аналіз твердої фази, що осаджується при всіх значеннях K , свідчить про те, що відношення $\text{P}/\Sigma\text{M}(\text{Mg}, \text{Co})$ відповідає відомому для дифосфатів (1,00). Склад дифосфату, що утворюється у разі відсутності у вихідних розчинах Co^{2+} , відповідає розрахунковому для $\text{Mg}_2\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$. Хімічний склад дифосфату, одержаного у разі відсутності Mg^{2+} , узгоджується із розрахунковим для $\text{Co}_2\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$. Вміст Mg , Co , P , H_2O у складі дифосфатів, що утворюються при значеннях $0.11 \leq K \leq 19.00$, закономірно змінюється в залежності від складу вихідних розчинів.

Рентгенограма дифосфату, одержаного за умов $9.00 < K \leq 19.00$ подібна до отриманої для $\text{Mg}_2\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$. За результатами хімічного аналізу цей дифосфат крім магнію (12.50 % мас.) містить до 2.03 % мас. кобальту(II), що свідчить про утворення твердого розчину на основі структури $\text{Mg}_2\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$. Склад насиченого твердого розчину відповідає дифосфату $\text{Mg}_{1.89}\text{Co}_{0.11}\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$, загальна формула має вигляд $\text{Mg}_{2-x}\text{Co}_x\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ ($0 \leq x \leq 0.11$).

Гідратовані дифосфати, одержані за умов $0.11 \leq K \leq 0.33$, поряд із кобальтом(II) містять до 4,01% мас. магнію. Вони ідентифіковані як обмежений твердий розчин із загальною формулою $\text{Co}_{2-y}\text{Mg}_y\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ із структурою $\text{Co}_2\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$. Визначені за результатами хімічного аналізу області гомогенності твердого розчину становлять $0 \leq y \leq 0.61$. Насиченим твердим розчином є дифосфат складу $\text{Co}_{1.39}\text{Mg}_{0.61}\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$.

Спільне осадження катіонів Mg^{2+} і Co^{2+} за значень K в межах $0.43 \leq K \leq 9.00$ призводить до утворення механічної суміші двох кристалічних фаз різних структур – $\text{Co}_2\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ і $\text{Mg}_2\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$.

Отже, у разі спільного осадження катіонів магнію і кобальту(II) дифосфат-йоном залежно від складу вихідних розчинів утворюються два обмежених твердих розчини заміщення з принципово відмінними структурами. Один з них, із загальною формулою $\text{Mg}_{2-x}\text{Co}_x\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ ($0 < x \leq 0.11$), утворюється на основі структури дифосфату-матриці $\text{Mg}_2\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ (при $9.00 < K \leq 19.00$), другий – складу $\text{Co}_{2-y}\text{Mg}_y\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ($0 < y \leq 0.61$) – на основі структури дифосфату-матриці $\text{Co}_2\text{P}_2\text{O}_7 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (при $0.11 \leq K \leq 0.33$).

1. Acton A.Q. Phosphates – advances in research and application / A. Q. Acton. – Atlanta, Georgia : Scholarly Editions, 2013. – 374 p.

2. Robertson L. Etude de pigments thermochromes autour du cobalt II. Material chemistry / L. Robertson. – Bordeaux : Universite Sciences et Technologies, 2010. – 312 p.

3. Антрапцева Н.М., Солод Н.В. Тверді розчини фосфатів мікроелементів: Монографія. – К. : ЦП КОМПРИНТ, 2017. – 200 с.

ТЕРМОАНАЛІТИЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ЦИНК-МАГНІЙ ДИГІДРОГЕНФОСФАТІВ ДИГІДРАТІВ

Антрапцева Н.М., Шилін Б.С.

Національний університет біоресурсів і природокористування України,
aspirant_nubipu@ukr.net

Термообробка гідратованих солей є одним з найбільш технологічних і раціональних способів одержання полімерних фосфатів, які широко використовують для створення на їх основі різноманітних неорганічних матеріалів для потреб сучасної науки і техніки [1].

Для практичної реалізації їх синтезу зневодненням гідратованих солей та керування цим процесом необхідні надійні дані про склад продуктів часткового і повного зневоднення, температурні інтервали їх утворення і термічної стабільності, про термічні твердофазні перетворення, що відбуваються під час зневоднення кристалогідратів.

Стосовно термолізу твердого розчину цинк і магній дигідрогенфосфатів дигідратів складу $Zn_{1-x}Mg_x(H_2PO_4)_2 \cdot 2H_2O$ такі дані одержані за зневоднення його в динамічних умовах нагрівання [2]. Зокрема встановлено, що його термообробка супроводжується складними фізико-хімічними і структурними перетвореннями, внаслідок яких в проміжних продуктах утворюються конденсовані фосфати і вільна фосфатна кислота. Утворення кінцевого продукту – результат їх твердофазної взаємодії. Однак, більшість практичних технологічних процесів випалювання кристалогідратів здійснюють в ізотермічних умовах за витримання їх певний час при заданій температурі. Такі дані про $Zn_{1-x}Mg_x(H_2PO_4)_2 \cdot 2H_2O$ в літературі відсутні.

Мета цієї роботи – визначити склад, температурні інтервали утворення та термічної стабільності полімерних продуктів часткового і повного зневоднення $Zn_{1-x}Mg_x(H_2PO_4)_2 \cdot 2H_2O$ ($0 \leq x \leq 1.0$) в ізотермічних умовах нагрівання.

В якості основних об'єктів дослідження використовували дигідрогенфосфати різного катіонного складу – $Zn_{0.75}Mg_{0.25}(H_2PO_4)_2 \cdot 2H_2O$, $Zn_{0.5}Mg_{0.5}(H_2PO_4)_2 \cdot 2H_2O$ і $Zn_{0.25}Mg_{0.55}(H_2PO_4)_2 \cdot 2H_2O$.

Термообробку їх виконували в інтервалі температур 100–350 °C (± 5), витримуючи зразок при заданій температурі протягом 0.5, 1.5, 3.0, 5.0 і 7.0 годин. В продуктах часткового і повного зневоднення визначали загальний вміст і аніонний склад сольового і кислотного компонентів (у перерахунку на P_2O_5) з кількісною оцінкою кожного з конденсованих аніонів. Для цього їх розділяли за допомогою хроматографії на папері і визначали вміст фосфору ваговим хінолінмолібдатним методом. Фосфатні кислоти попередньо екстрагували органічним розчинником. Методична частина роботи аналогічна описаній в [3].

Аналіз одержаних експериментальних даних свідчить про те, що термообробка $Zn_{0.5}Mg_{0.5}(H_2PO_4)_2 \cdot 2H_2O$ при 100 °C протягом 0.5–7 годин супроводжується втратою маси, яка відповідає видаленню 0.65–1.2 моль H_2O . Продукти часткового зневоднення, одержані за цих умов, являють собою гетерофазну суміш твердої і рідкої фаз, що містять лише монофосфатний аніон. Конденсація монофосфатного аніона починається при нагріванні вихідного кристалогідрату до 150 °C. У разі його термообробки при 150 °C протягом 0.5 годин у твердій фазі утворюється 12.6 % ди- і 1.2% трифосфату. Збільшення тривалості випалу до 7 годин сприяє збільшенню ступеня поліконденсації до $n = 4$. Зразок, витриманий протягом 7 годин при 225 °C, являє собою найбільш складну суміш полімерних фосфатів з лінійною будовою аніона (ступінь поліконденсації n досягає 9).

Утворення фосфату з циклічною будовою аніона – циклотетрафосфату (до 5.8% P_2O_5) відбувається за витримання $Zn_{0.5}Mg_{0.5}(H_2PO_4)_2 \cdot 2H_2O$ при 275 °C протягом 3 години. У разі збільшення тривалості термообробки за цієї температури до 7 годин 86 % від загального вмісту P_2O_5 солі перебуває у вигляді фосфату з циклічною будовою аніона. При 350 °C тверда фаза представлена практично одним конденсованим фосфатом, надійно ідентифікованим як безводний циклотетрафосфат складу $ZnMgP_4O_{12}$. Незначна кількість низькомолекулярних

фосфатів, що реєструються на хроматограмах, є наслідком часткового гідролізу циклотетрафосфату під час підготовки його до аналізу.

Визначення загального вмісту вільних фосфатних кислот показало, що він максимальний у разі термообробки $Zn_{0.5}Mg_{0.5}(H_2PO_4)_2 \cdot 2H_2O$ при $150\text{ }^\circ\text{C}$ протягом 0.5 годин і складає 8.78 % P_2O_5 кисл. у вигляді монофосфатної кислоти. За збільшення тривалості до 1.5 годин поряд із зменшенням загального вмісту фосфору розпочинаються процеси аніонної конденсації. У складі кислотного компоненту крім моно- утворюється дифосфатна кислота, вміст якої становить до 6 % від загального P_2O_5 кисл..

Аналогічний характер змін як загального вмісту фосфору, так і аніонного складу кислотного компоненту зберігається за умов термообробки зразка в інтервалі $150\text{--}185\text{ }^\circ\text{C}$. За подальшого підвищення температури до $350\text{ }^\circ\text{C}$, поряд із зменшенням загального змісту вільних фосфатних кислот, відбувається спрощення їхнього аніонного складу. У продуктах зневоднення $Zn_{0.5}Mg_{0.5}(H_2PO_4)_2 \cdot 2H_2O$ при $350\text{ }^\circ\text{C}$ дифосфатна кислота відсутня. Невисокий вміст $H_4P_2O_7$, що утворюється внаслідок конденсації монофосфатної кислоти, пояснюється її більшою активністю ніж H_3PO_4 . Завдяки чому $H_4P_2O_7$ швидше витрачається на вторинні взаємодії з конденсованими фосфатами, що утворюються як проміжні продукти зневоднення.

Результати кількісної характеристики аніонного складу продуктів зневоднення $Zn_{0.5}Mg_{0.5}(H_2PO_4)_2 \cdot 2H_2O$ в ізотермічних умовах знаходяться у повній відповідності з одержаними за умов динамічного нагрівання [3]. Вони підтверджують багатостадійність термічних і структурних твердофазних перетворень, що передують утворенню кінцевого полімерного продукту термолізу $Zn_{0.5}Mg_{0.5}(H_2PO_4)_2 \cdot 2H_2O$ – твердого розчину цинк і магній циклотетрафосфату складу $ZnMgP_4O_{12}$.

Узагальнення одержаних результатів дозволяє простежити утворення, накопичення, перерозподіл і участь кожного з полімерних фосфатів і вільних фосфатних кислот у складних фізико-хімічних процесах, що відбуваються під час термообробки $Zn_{1-x}Mg_x(H_2PO_4)_2 \cdot 2H_2O$ ($0 \leq x \leq 1.0$). Це особливо важливо для їх коректної інтерпретації та оптимізації умов одержання різних за складом і будовою аніона полімерних продуктів термообробки твердого розчину цинк і магній дигідрогенфосфатів дигідратів.

1. Acton A.Q. Phosphates – advances in research and application / A. Q. Acton. – Atlanta, Georgia : Scholarly Editions, 2013. – 374 p.

2. Антрапцева Н.М. Тверді розчини та подвійні фосфати двовалентних металів: Монографія. – К. : ДП "ЕКСПО-ДРУК", 2018. – 300 с.

3. Antraptseva N.M., Solod N.V., Koval L.B. Thermal solid-phase transformations of the hydrated Zn-Co(II) diphosphates // Chemistry of Metals and Alloys. – 2014. – V. 7, № 1/2. – P. 9 – 14.

ЕЛЕКТРОХІМІЧНА ПОВЕДІНКА ПЛАЗМОВИХ ПОКРИТТІВ НА ОСНОВІ Fe-Al

Борисов Ю.С., Янцевич К.В.

Інститут електрозварювання ім. Є.О. Патона НАН України,

ycarolin@ukr.net

Плазмові покриття товщиною 500 мкм були нанесені з суміші порошків Al та Fe, які були отримані методом механохімічного синтезу (МХС)[1]. Корозійні іспити проводили у розчинах 3% NaCl та у 5% H₂SO₄.

Електрохімічні дослідження зразків зі сталі СтЗсп та СтЗсп з плазмовими покриттями на основі Fe – Al проводили на потенціостаті П5827 М зі швидкістю розгортки 0,2 мВ/с. Стаціонарні потенціали вимірювали відносно хлор – срібного електрода порівняння. Дослідження кінетики електродних потенціалів вибраних покриттів дозволили встановити, що значення електродного потенціалу стабілізується через 15-40 хвилин при зануренні у нього зразків з покриттям. Стаціонарні потенціали *Ест* досліджених покриттів у розчинах 5% H₂SO₄ та у 3% NaCl складала – (-0,5...-0,64) В.

Проведені електрохімічні дослідження показали, що нанесення плазмових покриттів на основі Fe – Al на вуглецеві сталі призводить до зменшення швидкості її корозії в досліджених розчинах та викликає зміну кінетичних характеристик парціальних реакцій корозійного процесу. Покриття незначно знижують перенапругу виділення водню на сталі у розчині 5% H₂SO₄ та гальмують процес відновлення кисню у розчині 3% NaCl.

Додатково підвищити корозійну стійкість покриттів можливо за рахунок введення легуючих елементів, а саме титану та магнію.

Так, введення у систему Fe – Al легуючого елементу титану підвищує корозійну стійкість у розчинах 3% NaCl та 5% H₂SO₄ у 2-3 рази. Така поведінка покриттів може бути пов'язана з тим, що основними електрохімічними реакціями на аноді для покриттів складу

Fe -TiAl можуть бути утворення крім плівки Al₂O₃, ще і TiO₂. Ведення в систему Fe – Al легуючого елементу Mg в 1,8 – 2,3 рази погіршує закисні властивості покриття внаслідок утворення в процесі корозійних випробувань гальванічної пари Fe – Mg. Під час електрохімічних іспитів на поверхні електроду відбувається порушення цілісності плівки в наслідок чого відбувається розчинення магнію, що призводить до зменшення захисних властивостей покриття.

1. Борисов Ю.С., Борисова А.Л., Вігілянська Н.В., Грищенко О.П., Коломицев М.В. Покриття на основі інтерметалідів Fe –Al, які отримані методами плазмового і надзвукового повітряно-газового плазмового напилення // Автоматичне зварювання.- 2020.– № 7.– С.32-40.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОСНОВНЫХ ЦЕНТРОВ НА УГЛЕРОДНОЙ ПОВЕРХНОСТИ С ПОМОЩЬЮ ИНДИКАТОРОВ ГАММЕТТА

Бутенко Э.О.

ГВУЗ «Приазовский государственный технический университет», butenko_e_o@pstu.edu

Активированные угли, получаемые из различного сырья, в том числе лигнина, находят широкое применение как сорбенты и носители катализаторов. Однако активированные угли могут быть использованы не только в качестве носителей, но и непосредственно в качестве кислотно-основных катализаторов. Их каталитическая активность обусловлена наличием на поверхности кислородных комплексов. Дополнительная окислительная активизация поверхности приводит, как правило, к существенному увеличению активности. Окислительная обработка активированных углей приводит к образованию на поверхности целого спектра кислородсодержащих групп, среди которых основное место занимают карбоксильные, лактоновые, фенольные, спиртовые, карбонильные [1]. Лигнин является отличным сырьем для производства активированных углей, несмотря на то, что имеет непостоянный химический состав и свойства, присутствующие в нем минеральные вещества требуют дополнительной очистки. Однако, активированные угли на основе технического лигнина обладают высокими сорбционными свойствами и развитой поверхностью. Основные центры на поверхности углерода, определяются пиринообразными структурами с двумя атомами кислорода, делокализованными по различным ароматическим кольцам, а также делокализованными р-электронами, графитовых слоев [2]. Наличие основных групп на поверхности углерода еще не говорит о его активности в основнокаталитических реакциях. Прежде всего, это вызвано внутренней нейтрализацией присутствующими карбоксильными группами. Каталитическая активность определяется не только числом, но силой основных центров. Важной характеристикой катализаторов, используемых в основно-каталитических процессах, является число основных центров на поверхности и распределение центров по силе, наиболее важным является не определение типа поверхностной группы, а определение общего числа основных центров и их силы.

Целью работы было исследование возможности применения метода титрования в присутствии индикаторов Гаммета для определения кислотно-основных свойств углеродных материалов.

Исходным сырьем для получения активированных углей служил гидролизный лигнин. Лигнин отмывался дистиллированной водой от минеральных примесей (их присутствие приводит к существенному повышению основностей углей после термообработки из-за возникновения основных оксидов). Затем образцы лигнина сушили, карбонизировали при температуре от 300 до 800 °С, а затем активировали при температуре 800 °С перегретым паром в присутствии 1 % кислорода. Полученные образцы углей фракционировали, эксперименты проводили с образцами 0,1-0,5 мм. Для изучения кислотно-основных свойств титрованием в присутствии индикаторов Гаммета в стеклянный стаканчик объемом 20 мл, установленный на магнитной мешалке, помещался образец угля и магнитный размешиватель, и стаканчик заполнялся бензолом. Затем в стаканчик помещался стеклянный цилиндр, разделенный пористой перегородкой, на котором находился стандартный образец. В бензол добавлялся индикатор Гаммета, при этом на поверхности стандартного образца можно было наблюдать изменение окраски. Использовались индикаторы: бромтимоловый синий ($pK_a = 7,2$), 2-хлор-4-нитроанилин ($pK_a = 17,2$), 4-хлоранилин ($pK_a = 26,5$); 2,4,6-тринитроанилин ($pK_a = 12,2$), 2,4-динитроанилин ($pK_a = 15,0$), 4-нитроанилин ($pK_a = 18,4$). До начала количественных измерений два образца угля помещают в бензол и к ним добавляют по каплям индикаторы бромтимоловый синий и нейтральный красный. В контрольных опытах определяют наличие на поверхности катализатора соответственно основных и кислых центров. При незначительном количестве активных центров на поверхности катализатора время установления равновесия и появления идентифицирующей окраски возрастает и практически варьирует от 3 ч до 1 суток. При положительном результате

одинаковое количество катализатора (0,01 – 0,5 г) загружают в мерные колбы объемом 5 – 50 мл, которые затем заполняют бензолом. После введения одинакового количества индикатора и выдерживания в течение определенного времени (не менее 3 ч) в колбы добавляют различные объемы раствора бензойной кислоты в бензоле (концентрация 0,001 – 1 н.) и после выдерживания не менее 3 ч (лучше 1 сутки) определяют переход титрования. Затем вся процедура повторяется с уменьшенным шагом по бензойной кислоте. При определении количества не основных, а кислых центров на поверхности катализатора вместо раствора бензойной кислоты используется раствор бутиламина в бензоле. Следует избегать контакта с воздухом, так как сильные центры отравляются парами воды и углекислым газом. До начала экспериментов следует определить распределение центров на образце сравнения, в качестве которого используется прокаленный MgO.

Для полной оценки основности углеродных материалов следует применять несколько операций: определение общей основности, установление бренстедовской основности, исследование распределения основных центров по силе индикаторным методом, изучение распределения льюисовских основных центров индикаторным методом, определение распределения бренстедовских основных центров по силе из баланса.

Если твердое основание имеет белую окраску, то первые заметные изменения цвета появляются тогда, когда концентрация основной формы индикатора составляет примерно 10 % [3]. При титровании темных образцов в присутствии белых образцов сравнения следует учитывать, что происходит одновременное оттитровывание центров обоих твердых тел.

С помощью последовательной адсорбции на свежем образце катализатора индикаторов с различным значением pK_a можно качественно установить характер распределения основности. Для количественного определения концентрации основных центров используют титрование твердого основания в неполярном растворителе раствором кислоты. В качестве растворителя – бензол. Предварительно на образце адсорбируют индикатор. После добавления кислоты и установления равновесия индикатор переходит в кислотную или основную форму, а количество кислоты, необходимое для перехода индикатора в кислотную форму, соответствует числу центров, основная сила которых меньше, чем pK_a индикатора, используемого при титровании. Пользуясь набором индикаторов, можно получить распределение количества центров по основной силе. Главным недостатком индикаторного метода считается то, что основность определяется в какой-то конкретной среде, а при изменении условий концентрация и распределение основных центров могут существенно меняться. Существенным недостатком индикаторного метода считается невозможность проникновения крупных молекул индикаторов в центры, находящиеся внутри пор. Это ограничение не столь существенно, так как более важно, чтобы основные центры были доступны для титрующего агента – молекулам кислоты, а для наблюдения перехода индикатора вполне достаточно его количества, адсорбированного на внешней поверхности. В качестве объектов исследования были выбраны образцы карбонизованного активированного лигнина, дополнительно подвергнутые окислению. Все найденные на поверхности углей основные центры относятся к льюисовскому типу.

Полученные результаты показывают, что метод титрования углеродных материалов в присутствии индикаторов Гаммета дает результаты, близкие к получаемым методом парциального отравления. Это говорит о том, что метод индикаторного титрования может служить хорошей основой для предсказания каталитических свойств окисленных углей.

1. Bansal R.C., Donnet J.-B, Stoeckli F. Active carbon.– NY: Marcel Dekker, 1988.–328 p.
2. Kapustina E. Determination of carbon surface basic sites by Hammett indicators// CarboCat-2004. - International Symposium on Carbon for Catalysis. - July 18-20. – 2004 – Lausanne. - p. 77-78
3. Hattori H. Heterogeneous Basic Catalysis // Chem. Rev. – 1995. – V. 95. – N 3. – P. 537-558.

ФАЗОВІ РІВНОВАГИ НА ПЕРЕРІЗАХ $\text{Cu}_2\text{SiS}(\text{Se})_3\text{-ZnS}(\text{Se})$

Величко О.В., Піскач Л.В.

Волинський національний університет ім. Лесі Українки, xolishax411@gmail.com

В літературі є відомості про існування алмазоподібних напівпровідникових тетраарних сполук складу $\text{Cu}_2\text{ZnSiS}(\text{Se})_4$. Купрум(І)цинксіліцій(ІV) тетрасульфід та тетраселенід кристалізуються в ромбічній структурі (ПГ $Pmn2_1$) та проявляють перспективні властивості для застосування [1-7]. Однак, відсутня інформація про спосіб їх утворення.

Ці тетраарні сполуки $\text{Cu}_2\text{ZnSiS}(\text{Se})_4$ утворюються на перерізах $\text{Cu}_2\text{SiS}(\text{Se})_3\text{-ZnS}(\text{Se})$.

Саме прості речовини чистотою вище 99,99 ваг.% основної речовини були використаними для того, щоб синтезувати сплави досліджуваних систем. Перед тим, як використовуватися, Сірка та Селен були очищені вакуумним дистилуванням. Саме синтезування проводилося за допомогою одно- та двотемпературних методів у кварцових контейнерах, що були вакуумовані до залишкового тиску, що становив 10^{-3} Па. Поступово, із швидкістю не більшою, ніж 20-30 К/год. була піднята температура у печі. При синтезі максимально температура піднімалася для сплавів обох систем до 1320 К. Із швидкістю 10-20 К/год було проведено охолодження до температури 670 К (гомогенізуючого відпалу). При даній температурі ці сплави, які досліджувалися, були витримані 250-300 год, а сплави, що відпалювалися, були загартовані у 25%-у водному розчині Натрій Хлориду.

Рентгенофазовий, диференційно-термічний і мікроструктурний методи фізико-хімічного аналізу використовувалися при дослідженнях. Диференційно-термічний аналіз був проведений на дериватографі системи F. Paulik, I. Paulik, L. Erdey і на установці, складеній з печі регульованого нагріву "Термодент" (Pt/Pt-Rh термопара) і двокоординатного самописця Н307/1. Саме рентгендифракційні відбиття, які були одержані на дифрактометрі ДРОН4-13 (Ni-фільтр, $\text{CuK}\alpha$ -випромінювання). Вивчення мікроструктури проводилося на мікротвердометрі Leica VMHT Auto з максимальним збільшенням $\times 3811$.

$\text{Cu}_2\text{ZnSiS}(\text{Se})_4$ утворюються інконгруентно за перитектичними процесами $L_p + \beta \leftrightarrow \text{Cu}_2\text{ZnSiS}(\text{Se})_4$ при 1413 К ($\text{Cu}_2\text{ZnSiS}_4$) і 1257 К ($\text{Cu}_2\text{ZnSiSe}_4$) (β – тверді розчини на основі цинк халькогенідів). Групи ефектів при 1337 К (в сульфідній системі) та при 1177 К (в селенідній системі) інтерпретовані як такі, що відповідають поліморфному перетворенням тетраарних сполук. Між $\text{Cu}_2\text{SiS}(\text{Se})_3$ і $\text{Cu}_2\text{ZnSiS}(\text{Se})_4$ протікає евтектична взаємодія.

1. Schäfer W., Nitsche R. Tetrahedral quaternary chalcogenides of the type $\text{Cu}_2\text{-II-IV-S}_4(\text{Se}_4)$ // Mater. Res. Bull. – 1974. – V. 9. – P. 645–654.
2. Rosmus K.A., Aitken J.A. $\text{Cu}_2\text{ZnSiS}_4$. Acta Crystallogr. Sect E. – 2011. – 67(Pt 4). – i28.
3. Guc M., Levchenko S., Izquierdo-Roca V. at all. Polarized Raman scattering analysis of $\text{Cu}_2\text{ZnSiS}_4$ and $\text{Cu}_2\text{ZnSiSe}_4$ single crystals // J. of Appl. Phys.– 2013. – V. 114. – P. 173507.
4. Rosmus K.A., Brant J.A., Wisneski S.D. at all. Optical Nonlinearity in $\text{Cu}_2\text{CdSnS}_4$ and $\alpha/\beta\text{-Cu}_2\text{ZnSiS}_4$: Diamond-like Semiconductors with High Laser-Damage Thresholds // Inorg. Chem. – 2014. – V. 53(15). – P. 7809–7811.
5. Zhang X., Chen D., Deng K., Lu R. Band engineering of wurtzite-derived semiconductors $\text{Cu}_2\text{ZnSiS}_4$ and $\text{Cu}_2\text{ZnSiSe}_4$ // J. of Alloys and Comp. – 2016. – V. 656. – P. 196-199.
6. Syrбу N.N., Zalamai V., Guc M. at all. Birefringence of $\text{Cu}_2\text{ZnSiSe}_4$ single crystals // J. of Alloys and Comp. – 2015. – V. 635. – P. 188-193.
7. Litvinchuk A.P., Dzhagan V.M., Yukhymchuk V.O. at all. Lattice dynamics of $\text{Cu}_2\text{ZnSiSe}_4$ quaternary semiconductor: experiment and theory // Phys. Stat. Sol. B. – 2016. – V. 253. – P. 1808-1815.

ПОВІЛЬНІ СТАДІЇ РЕАКЦІЙ *n*-АЛКАНІВ У СІРЧАНОКИСЛИХ РОЗЧИНАХ КОМПЛЕКСІВ МЕТАЛІВ

Волкова Л. К.¹, Онейда Й. О.^{2,3}

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

²Відділення фізико-хімії горючих копалин ІнФОВ НАНУ, м. Львів, Україна

³Донецький національний університет імені Василя Стуса, м. Вінниця, Україна

Досліджено повільні стадії у реакціях *n*-алканів (*n*-AlkH) з марганцем(III), хромом(VI) і платиною(III) у розчинах концентрованої H₂SO₄. У табл.1 наведено електронні характеристики (ЕХ) *n*-алканів – кількість вторинних (*втор.*) зв'язків С–Н, $n(\text{CH})_{\text{sec}}$; їх відношення до кількості всіх зв'язків С–Н, $n(\text{CH})_{\text{sec}}/n(\text{CH})_{\text{all}}$, позначено $n_{\text{sec}}/n_{\text{all}}$; та потенціали іонізації, *I*, а також субстратні селективності $k_{\text{відн.}}$ (відношення вимірених констант швидкості (*k*) для *n*-AlkH до *k* для *n*-октану, $k_{\text{відн.}}(n\text{-C}_8\text{H}_{18})=1$) у реакціях з металокомплексами Mn³⁺, Cr⁶⁺ і Pt³⁺. Для Mn³⁺ виміряна константа для етану. Для визначення природи повільної стадії перевірені тести – лінійні кореляції $k_{\text{відн.}}$ або $\lg k_{\text{відн.}}$ з $n(\text{CH})_{\text{sec}}$ або з *I*. У разі кращого виконання кореляції з $n(\text{CH})_{\text{sec}}$, маємо гомолітичний розрив зв'язку С–Н; з *I*, маємо домінуючим відрив електрона. У випадку низької селективності $k(\text{C}_3\text{H}_8)/k(\text{C}_2\text{H}_6)$, що дозволяє виміряти константу швидкості для етану, можна припустити повільну стадію гомолізу С–Н, оскільки енергія *перв*-С–Н (420±2) кДж/моль мало відрізняється від (412±2) для *втор*-С–Н. При високій селективності $k(\text{C}_3\text{H}_8)/k(\text{C}_2\text{H}_6)$ повільна стадія відбувається вірогідніше як перенос електрона. Потенціал іонізації етану на 60 кДж/моль є вищим, ніж пропану. В реакціях з трьома металокомплексами низька субстратна селективність (табл.1), особливо у Mn³⁺, що дозволяє припустити повільну стадію гомоліза С–Н. Враховуючи принцип адитивності для гомолізу С–Н маємо:

$$k_{\text{відн.}} = k(\text{C}_2\text{H}_6)_{\text{відн.}} + k(\text{S})_{\text{відн.}}, \quad \text{тоді} \quad k(\text{S})_{\text{відн.}} = k_{\text{відн.}} - k(\text{C}_2\text{H}_6)_{\text{відн.}}, \quad (1)$$

де $k(\text{S})_{\text{відн.}}$ – відносна константа, яка обумовлена *втор.* зв'язками С–Н, для етану $k(\text{S})_{\text{відн.}}=0$.

Таблиця 1

Величини *k* і $k_{\text{відн.}}$, $k(\text{S})_{\text{відн.}}$ для реакцій *n*-алканів ряду C₂–C₈ у розчинах Mn(III)–90% H₂SO₄ і Pt(III)–93% H₂SO₄ при 90°C та Cr(VI)–60% H₂SO₄ при 25°C; а також електронні характеристики для *n*-алканів, потенціали іонізації *I* в кДж/моль

<i>n</i> -AlkH	n_{sec}	$n_{\text{sec}}/n_{\text{all}}$	<i>I</i>	k_1, c^{-1} *			Mn ³⁺		$k_2(\text{AlkH})/k_2(\text{C}_8\text{H}_{18})$	
				Mn ³⁺	Cr ⁶⁺	Pt ³⁺	$k_{\text{відн.}}$	$k(\text{S})_{\text{відн.}}$	Cr ⁶⁺	Pt ³⁺
C ₂ H ₆	0	0	1115,5	0,31	<0,002	–	0,103	0,00	<0,001	–
C ₃ H ₈	2	0,25	1051,8	–	0,11	–	–	–	0,07	–
C ₄ H ₁₀	4	0,40	1016	–	0,28	–	–	–	0,18	–
C ₅ H ₁₂	6	0,50	986	1,4	0,58	0,028	0,47	0,37	0,36	0,47
C ₆ H ₁₄	8	0,57	977,5	1,7	0,87	0,040	0,57	0,47	0,54	0,67
C ₇ H ₁₆	10	0,62	958	2,3	1,1	0,045	0,77	0,67	0,69	0,75
C ₈ H ₁₈	12	0,67	945,7	3,0	1,6	0,060	1	0,9	1	1

* Дані Рудакова Є.С., Луцика О.І., Тищенко М.А.

Між електронними характеристиками *n*-AlkH з високою величиною коефіцієнту детермінації (R²) відтворюються кореляції:

$$n(\text{CH})_{\text{sec}}/n(\text{CH})_{\text{all}} = 0,233 \cdot \ln(n(\text{CH})_{\text{sec}}) + 0,084 \quad (\text{a}), \quad n(\text{CH})_{\text{sec}} = 0,6975e^{4,2860(n_{\text{sec}}/n_{\text{all}})} \quad (\text{б}) \quad (2)$$

логарифмічна (а), або експоненціальна (б) з R² = 0,999 у ряду алканів C₃–C₁₀;

$$I = -59,3 \cdot \ln(n(\text{CH})_{\text{sec}}) + 1095,0, \quad (\text{a}), \quad I = -253,2 \cdot (n(\text{CH})_{\text{sec}}/n(\text{CH})_{\text{all}}) + 1115,8 \quad (\text{б}) \quad (3)$$

логарифмічна (а) для C₃–C₁₀, R²=0,995 і лінійна (б) для (C₂–C₁₀), R²=0,998.

При розгляді залежності *I*– $n(\text{CH})_{\text{sec}}$, як лінійної, найбільше відхилення від лінійності в усьому ряду C₂–C₁₀ (R²=0,879). Зі зменшенням ділянки R² збільшується від 0,928 для C₃–C₁₀ до 0,979 у ряду C₅–C₈. Дві ділянки C₂–C₄ і C₅–C₁₀ мають максимальні R² =0,974 і R² =0,971 відповідно. Чим ближче для кореляції (*I*– $n(\text{CH})_{\text{sec}}$) величина R² до 1, тим важче розділити

вплив на реакційну здатність *n*-алканів кількості втор-С–Н або потенціалу іонізації та визначити природу лімітуючої стадії. Відмітимо, що в ряду C₅–C₈ лінійні залежності $I-n(\text{CH})_{\text{sec}}$ виконуються найбільш точно, $R^2=0,979$, тоді як $I-n_{\text{sec}}/n_{\text{all}}$ – найменш точно, $R^2=0,949$. Це треба враховувати при виборі повільної стадії між відривом Н-атома або електрона.

У табл. 2 наведено параметри кореляцій субстратних селективностей від електронних параметрів *n*-алканів, що найбільш точно описують дані реакцій серед перевірених лінійної, експоненціальної й логарифмічної залежностей.

Таблиця 2

Величини нахилу (а) й коефіцієнта R^2 для лінійної, R^2 – для експоненціальної й логарифмічної залежностей $k_{\text{відн}}$, $k(\text{S})_{\text{відн}}$ і $\lg k_{\text{відн}}$, $\lg k(\text{S})_{\text{відн}}$ від електронних характеристик *n*-алканів у їх реакціях з металокомплексами (Me) у сірчаній кислоті

Me	$k_{\text{відн}}$ ($k(\text{S})_{\text{відн}}$, 2-й ряд у Mn^{3+}) – EX						$\lg k_{\text{відн}}$ ($\lg k(\text{S})_{\text{відн}}$, 2-й ряд у Mn^{3+}) – EX					
	$n(\text{CH})_{\text{sec}}$		I		$n_{\text{sec}}/n_{\text{all}}$		$n(\text{CH})_{\text{sec}}$		I		$n_{\text{sec}}/n_{\text{all}}$	
	a	R^2	-a	R^2	a	R^2	a	R^2	-a	R^2	a	R^2
Mn^{3+}	0,07	0,971	2)	0,990	2)	0,987	0,082	0,969	0,006	0,990	1,4	0,987
	0,07	0,971	2)	0,994	2)	0,970	0,07	0,995	0,009	0,994	2,4	0,970
Cr^{6+}	0,09	0,979	2)	0,992	2)	0,997	3)	0,997	0,011	0,992	2,8	0,997
Pt^{3+}	0,08	0,968	3)	0,913	2)	0,972	3)	0,974	0,007	0,900	1,8	0,972

На рис. 1а показано виконання лінійних залежностей $k_{\text{відн}}-n(\text{CH})_{\text{sec}}$. Точність лінійної кореляції для хрому(VI) суттєво вища, ніж експоненціальної $R^2=0,937$; для платини(III) величина $R^2=0,9683$ практично дорівнює $R^2=0,9680$ для експоненціальної залежності, а для марганцю – не суттєво перевищує експоненціальну $R^2=0,969$. Обробка даних для Mn^{3+} без реакції з етаном у тому самому ряду алканів C₅–C₈, що і для Pt^{3+} , показує значне зростання точності експоненціальної залежності $R^2=0,993$ і майже незмінність лінійної 0,971. Точність кореляції з $n(\text{CH})_{\text{sec}}$ не змінюється при переході від $k_{\text{відн}}$ до $k(\text{S})_{\text{відн}}$ і значно зростає – від $\lg k_{\text{відн}}$ до $\lg k(\text{S})_{\text{відн}}$, що разом з квантово-хімічними розрахунками термохімії можливих стадій свідчить про лімітуючу стадію – відрив Н-атома.

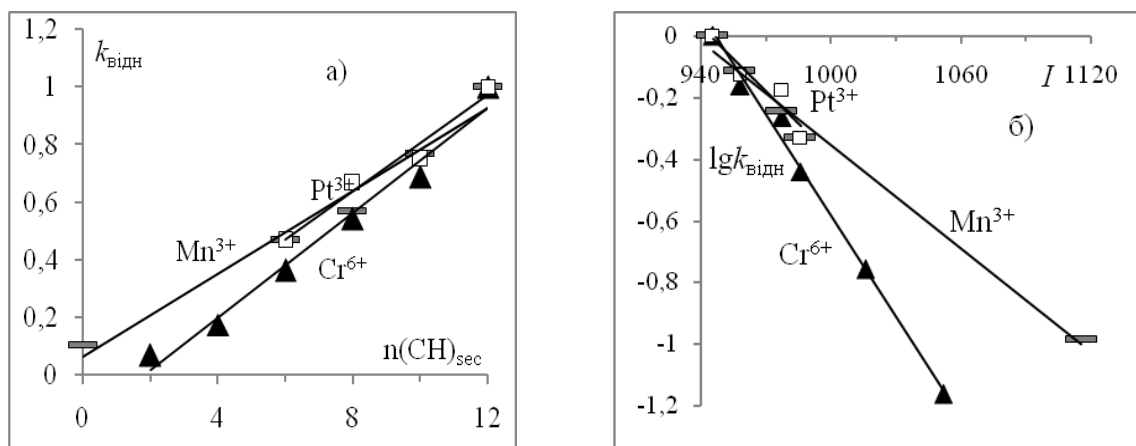


Рис. 1 Лінійні залежності $k_{\text{відн}}$ від $n(\text{CH})_{\text{sec}}$ (а) і $\lg k_{\text{відн}}$ від I (кДж/моль) (б) в реакціях *n*-алканів у сірчаноокислих розчинах Mn^{3+} , Cr^{6+} і Pt^{3+}

Для Mn^{3+} і Cr^{6+} лінійні кореляції $\lg k_{\text{відн}} = a \cdot I + b$ (рис.1б, табл.2) і $\lg k_{\text{відн}} = a \cdot (n_{\text{sec}}/n_{\text{all}}) + b$ описують дані з більш високою точністю, ніж експоненціальна або логарифмічна, що дозволяє припустити у цих реакціях присутність повільної стадії переносу електрона. Для Pt^{3+} кореляція з $n_{\text{sec}}/n_{\text{all}}$ виконується значно краще, ніж із I (табл.2).

Добре виконання кореляцій $k_{\text{відн}}-n(\text{CH})_{\text{sec}}$ і $\lg k_{\text{відн}}-I$ для Mn^{3+} і Cr^{6+} можна пояснити конкуренцією двох повільних стадій, гомоліза і переносу електрона. Невисока точність виконання лінійної залежності $\lg k_{\text{відн}}-I$ для Pt^{3+} при значно більшій точності $k_{\text{відн}}-n(\text{CH})_{\text{sec}}$ може бути обумовлена домінуванням гомоліза над переносом електрона.

ДОСЛІДЖЕННЯ НАПІВПРОВІДНИКОВОГО ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ

TiCo_{1-x}Mn_xSb

Горинь А.М.¹, Ромака Л.П.¹, Стадник Ю.В.¹, Ромака В.А.², Романів І.М.¹, Пашкевич В.З.²

¹ Львівський національний університет імені Івана Франка, andriy.horyn@lnu.edu.ua

² Національний університет «Львівська політехніка»

Наведено результати досліджень нового напівпровідникового термоелектричного матеріалу TiCo_{1-x}Mn_xSb, $x=0.01-0.10$, отриманого легуванням напівпровідника TiCoSb (стр. тип MgAgAs, пр. група) атомами Mn ($3d^5 4s^2$) шляхом заміщення атомів Co ($3d^7 4s^2$).

Зважаючи на меншу кількість d -електронів Mn у порівнянні з атомами Co, очікувалось, що заміщення атомів Co на Mn генеруватиме у напівпровіднику TiCo_{1-x}Mn_xSb структурні дефекти акцепторної природи, що впливає на зміну значень питомої електропровідності, коефіцієнтів термо-ерс і теплопровідності.

Зразки твердого розчину TiCo_{1-x}Mn_xSb ($x=0-0.10$) синтезовано методом електродугового плавлення з наступною гомогенізацією сплавів за температури 1073 К. Рентгенівський фазовий аналіз засвідчив однофазність отриманих зразків. Температурні та концентраційні залежності питомого електроопору (ρ) (двзондовий метод) та коефіцієнта термо-ерс (α) відносно міді зразків твердого розчину TiCo_{1-x}Mn_xSb вимірювали у діапазонах $T=80-400$ К.

Структурні дослідження TiCo_{1-x}Mn_xSb виявили складний характер входження атомів Mn у матрицю напівпровідника. Оскільки атомний радіус Mn ($r_{Mn}=0.130$ нм) є більшим за такий у Co ($r_{Co}=0.125$ нм), то логічним є збільшення значень періоду елементарної комірки $a(x)$ TiCo_{1-x}Mn_xSb на ділянці концентрацій $x=0-0.05$ (рис. 1а). Така поведінка періоду ґратки $a(x)$ TiCo_{1-x}Mn_xSb може свідчити про реалізацію твердого розчину заміщення, коли в кристалографічній позиції 4с атомів Co генеруються структурні дефекти акцепторної природи. При цьому у забороненій зоні ϵ_g має утворитися домішкова акцепторна зона ϵ_A^{Mn} .

Однак поява екстремуму на залежності $a(x)$ TiCo_{1-x}Mn_xSb за $x=0.05$ та наступне зменшення значень періоду елементарної комірки $a(x)$ за $x>0.05$ не вкладаються у логіку утворення твердого розчину заміщення, коли атоми Co заміщаються атомами Mn. Якщо б концентрація атомів Mn за $x=0.05$ була межею існування твердого розчину заміщення, то значення періоду елементарної комірки $a(x)$ не зазнавало б суттєвих змін. У той же час зменшення значень $a(x)$ TiCo_{1-x}Mn_xSb за $x>0.05$ вказує на існування твердого розчину заміщення, але тепер атоми Mn займають іншу кристалографічну позицію.

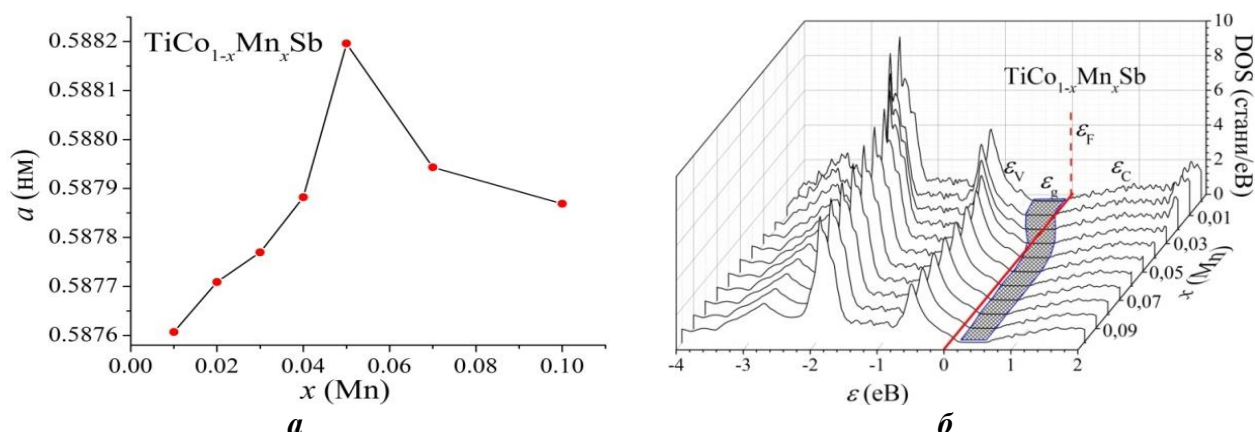


Рис.1 Зміна значень періоду елементарної комірки $a(x)$ (а) та розрахунок розподілу густини електронних станів DOS (б) для TiCo_{1-x}Mn_xSb

Оскільки атомний радіус Mn є менший за такий у Ti ($r_{Ti}=0.146$ нм), найбільш ймовірним є зайняття атомами Mn позиції 4а атомів Ti за $x>0.05$, що приведе до зменшення значень $a(x)$. При цьому у позиції 4а генеруватимуться структурні дефекти донорної природи

(атоми Mn володіють більшим числом $3d$ -електронів, ніж Ti), а в забороненій зоні ϵ_g напівпровідника повинна утворитися домішкова донорна зона ϵ_D^{Mn} .

Для прогнозування поведінки рівня Фермі ϵ_F , ширини забороненої зони ϵ_g та електрокінетичних характеристик напівпровідника $TiCo_{1-x}Mn_xSb$ розраховано розподіл густини електронних станів (DOS) (рис. 1б) для упорядкованого варіанту структури. Оскільки заміщення атомів Co на Mn генерує структурні дефекти акцепторної природи, то вже за концентрації $TiCo_{0.99}Mn_{0.01}Sb$ рівень Фермі ϵ_F буде дрейфувати від зони провідності ϵ_C і займе позицію у середині забороненої зони ϵ_g . За більших концентрацій Mn збільшиться концентрація акцепторів, а рівень Фермі ϵ_F перетне рівень протікання валентної зони ϵ_V : відбудеться перехід провідності діелектрик-метал [1].

Температурні залежності питомого електроопору $\ln(\rho(1/T))$ та коефіцієнта термо-ерс $\alpha(1/T)$ $TiCo_{1-x}Mn_xSb$ наведено на рис. 2. Наявність на залежності $\ln(\rho(1/T))$ для $TiCo_{0.99}Mn_{0.01}Sb$ високотемпературної активаційної ділянки свідчить про розташування рівня Фермі ϵ_F у забороненій зоні ϵ_g , а від'ємні значення $\alpha(T,x)$ уточнюють його положення – біля зони провідності. Однак, і за усіх інших концентрацій домішкових атомів Mn знак коефіцієнта термо-ерс $\alpha(T,x)$ $TiCo_{1-x}Mn_xSb$ залишається від'ємним (рис. 2б).

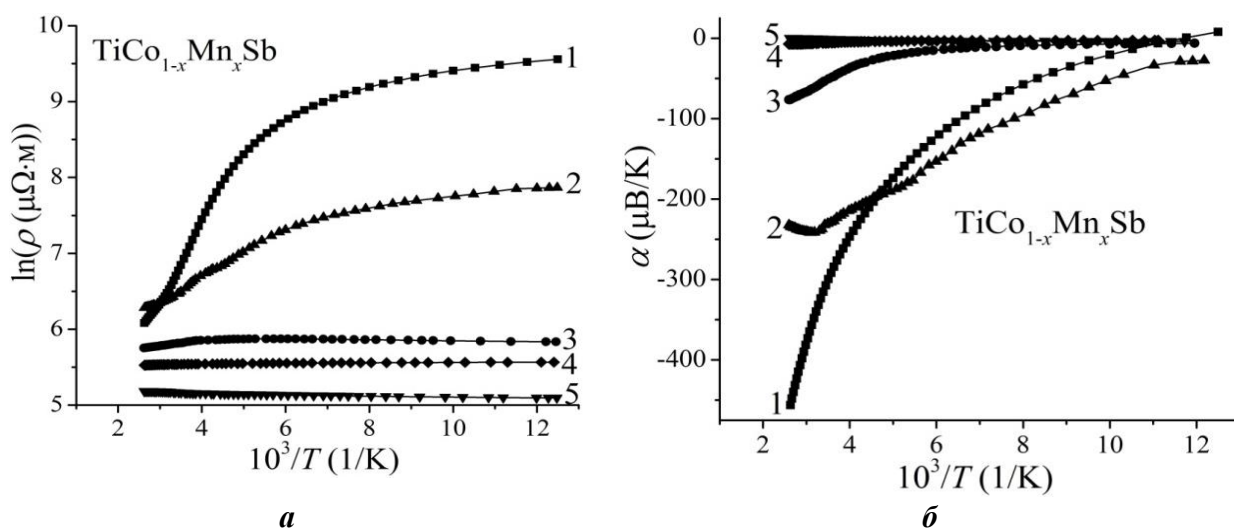


Рис. 2 Температурні залежності питомого електроопору $\ln(\rho(1/T))$ (а) та коефіцієнта термо-ерс $\alpha(1/T)$ (б) для $TiCo_{1-x}Mn_xSb$: 1 – $x=0$, 2 – $x=0.02$, 3 – $x=0.01$, 4 – $x=0.10$, 5 – $x=0.05$

Описаний експериментальний результат не відповідає розрахункам електронної структури $TiCo_{1-x}Mn_xSb$ (рис. 1б). При заміщенні у $TiCo_{1-x}Mn_xSb$ атомів Co ($3d^74s^2$) мають генеруватися акцептори, які за концентрації $x \approx 0.02$ захоплюють всі вільні електрони. Цей процес не повинен супроводжуватися зміною знаку коефіцієнта термо-ерс α , а вільні дірки мають бути основними носіями. Структурні дослідження показали, що у $TiCo_{1-x}Mn_xSb$ відбуваються складніші структурні зміни, ніж заміщення атомів Co на Mn. Уведення в неупорядковану структуру базового напівпровідника $TiCoSb$ домішкових атомів Mn супроводжується її упорядкуванням. Це означає, що зникають вакансії у позиції $4a$ атомів Ti, а також відповідна акцепторна зона ϵ_A . Натомість атоми Ti, які займають вакансії у позиції $4a$, є джерелом електронів, що породжує донорну зону ϵ_D^1 . Механізмом генерування іншої донорної зони ϵ_D^2 є часткове зайняття атомами Mn тетраедричних пустот структури.

1. Ромака В.А., Стадник Ю.В., Крайовський В.Я., Ромака Л.П., Гук О.П., Ромака В.В., Микийчук М.М., Горинь А.М. Новітні термочутливі матеріали та перетворювачі температури. – Львів: Видавництво Львівської політехніки, 2020. – 612 с.

СОРБЦІЙНІ ВЛАСТИВОСТІ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ ПРИРОДНИХ ГЛИНИСТИХ МІНЕРАЛІВ

Дзязько Ю. С.¹, Рождественська Л. М.¹, Пономарьова Л. М.², Коломієць Є. О.¹, Яценко Т. В.

¹Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В. І. Вернадського НАН України,

²Сумський державний університет

dzyazko@gmail.com

Для видалення токсичних та цінних компонентів із водних розчинів в Інституті загальної та неорганічної хімії НАН України розроблено композити на основі іонообмінних смол [1, 2], а також кристалічних [3] і аморфних оксидів та гідрофосфатів багатовалентних металів [4, 5], які містять Li-Ti або Li-Ti-Mn шпінель [3], графеноподібні матеріали [4] та гексаціаноферат(II) кобальту [5]. У порівнянні з цими сорбентами та іншими синтетичними матеріалами, перевагою сорбентів природного походження та їх похідними є доступність та дешевизна вихідної сировини. В даній роботі розглянуто сорбенти на основі природних цеолітів.

Використовували цеоліт наступного складу (мас. %): Al (6.9), Si (35.9), K (3.8), Na (1), Cu (1.3), Ca (2), Fe (1.1), Zn (0.58). Вихідний цеоліт (зразок Z-0) активували кислотою, таким чином отримували зразок Z-A. На цьому зразку осаджували гідратований оксид феруму (III) (зразок Z-AFe). Як видно із СЕМ зображень, що ілюструють шарувату структуру зразків, при переході від вихідного зразка до активованого збільшується рельєфність поверхні. Для композиту поверхня виглядає більш згладженою.

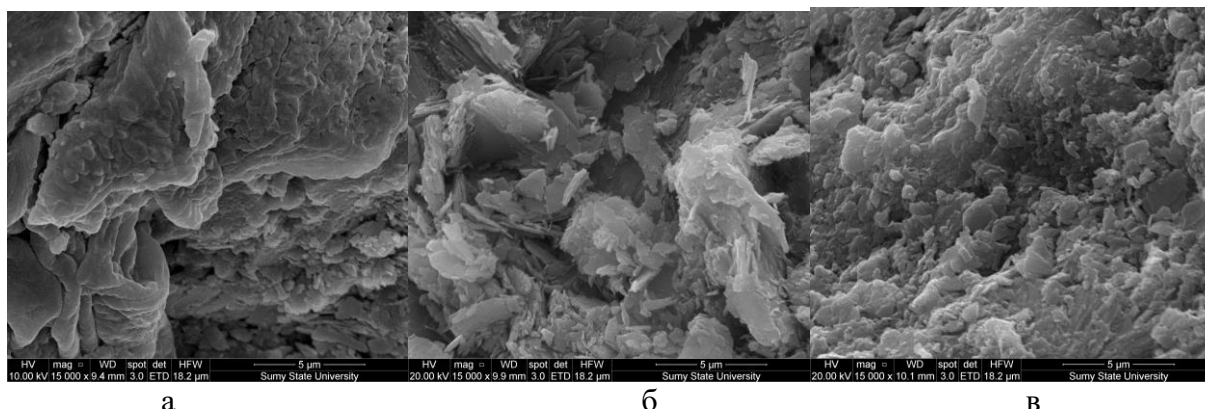


Рис. 1 СЕМ зображення зразків Z-0 (а), Z-A (б), Z-AFe (в)

Вельми показовою є зміна хімічного складу зразків при хімічній обробці (табл. 1). Запропонований спосіб хімічної активації не призводить до суттєвого зниження вмісту феруму, а також Al за рахунок часткового руйнування алюмосилікату з утворенням сорбційно інертного SiO₂. Для композиту закономірно спостерігається збільшення кількості феруму.

Для тестування отриманих матеріалів проведено сорбційні дослідження у статичному режимі. Передусім використовували багатокомпонентний розчин, який містив іони Pb²⁺, Mn²⁺, Ni²⁺, Cd²⁺, Co²⁺, Cu²⁺, концентрація кожного компоненту становила 0.1 ммоль дм⁻³. Розчин містив також іони Ca²⁺ (0.5 ммоль дм⁻³). Знайдено, що зразки Z-A та Z-AFe найбільш повно видаляють з розчину іони Pb²⁺ та Ca²⁺ порівняно з вихідним цеолітом (рис. 2). Для іонів Pb²⁺ ступень вилучення досягає 95 % (композит) при дозуванні сорбенту 10 г дм⁻³. При дозуванні 20 г дм⁻³ остаточний вміст іонів Pb²⁺ у розчині знижується до рівня ГДК для водойм (0.1 мг дм⁻³). Для вихідного цеоліту необхідне дозування становить 40 г дм⁻³.

При дослідженні сорбції іонів Pb²⁺ з однокомпонентних розчинів встановлено, що ізотерми моделюються рівнянням Фрейндліха (рис. 3, див також табл. 1):

$$A = kC^n,$$

де k та n – константи ($n < 1$, цей параметр характеризує енергетичну неоднорідність поверхні). Як видно з таблиці, активація посилює неоднорідність, а подальше модифікування робить поверхню більш енергетично однорідною. У цьому випадку константа n є близькою до 1, а залежність сорбційної ємності від рівноважної концентрації розчину максимально наближується до ізотерми Генрі.

Таблиця

Склад природних глинистих мінералів та сорбція іонів Pb^{2+}

Зразок	Хімічний склад		Застосування моделі Фрейндліха	
	Співвідношення Al/Si	Вміст Fe (мас. %)	n	R^2
Z-0	0.20	1.3	0.94	0.99
Z-A	0.19	1.1	0.84	0.99
Z-Fe	0.19	1.8	0.99	0.98

Отримані експериментальні дані свідчать про те, що композит Z-AFe може бути рекомендований для видалення іонів Pb^{2+} з розчинів, що містять домішки іонів інших кольорових металів.

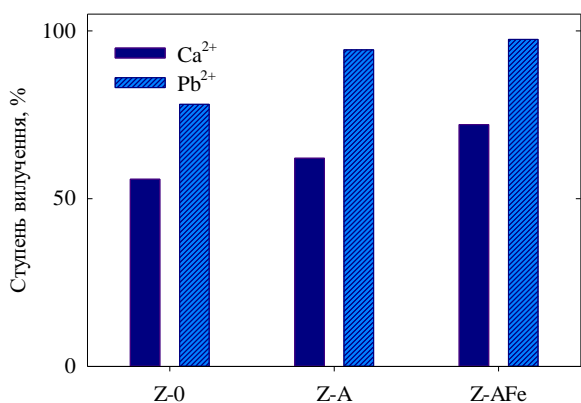


Рис. 2 Ступень вилучення іонів Ca^{2+} та Pb^{2+} із комбінованого розчину природними глинистими матеріалами

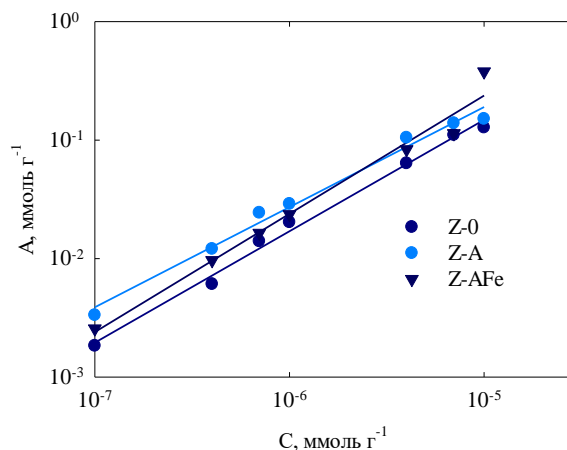


Рис. 3 Застосування моделі Фрейндліха до сорбції іонів Pb^{2+} на природних глинистих мінералах

1. Ponomarova L., Dzyazko Yu., Volkovich Yu., Sosnkin V., Scherbakov S. Effect of Incorporated Inorganic Nanoparticles on Porous Structure and Functional Properties of Strongly and Weakly Acidic Ion Exchangers // Springer Proc. Phys. – 2018. – V. 214. – P. 63-77.
2. Maltseva T.V., Kolomiets E.O., Dzyazko Yu. S., Scherbakov S. Composite anion-exchangers modified with nanoparticles of hydrated oxides of multivalent metals // Appl. Nanosci. – 2019. – V.9, N 5. – P. 997-1004.
3. Chaban M.O., Rozhdestvenska. L.M., Palchyk O.V., Dzyazko Y.S., Dzyazko O. G. Structural characteristics and sorption properties of lithium-selective composite materials based on TiO_2 and MnO_2 // Appl. Nanosci. – 2019. – V.9, N 5. – P. 1037-1045.
4. Perlova O.V., Dzyazko Yu.S., Palchik O.V., Martovyi I.S. Hydrated titanium dioxide modified with potassium cobalt hexacyanoferrate (II) for sorption of cationic and anionic complexes of uranium (VI) // Appl. Nanosci. – 2021. – <https://doi.org/10.1007/s13204-021-01721-x>
5. Perlova O.V., Dzyazko Yu.S., Palchik A.V., Ivanova I.S., Perlova N.O., Danilov M.O., Rusetskii I.A., Kolbasov G.Ya., Dzyazko A.G. Composites based on zirconium dioxide and zirconium hydrophosphate containing graphene-like additions for removal of U (VI) compounds from water // Appl. Nanosci. – 2020. – V. 10, N 12. – P. 4591–4602.

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА СПОЛУКИ NdAu_{0,55}In_{1,45}

Домінюк Н.І., Ничипорук Г.П., Муць І.Р., Заремба В.І.

Львівський національний університет ім. І. Франка, nataliya.dominyuk@gmail.com

Потрійні системи РЗМ–*d*-метал–In вивчають впродовж багатьох років. Для значної кількості таких систем проведені систематичні дослідження, частину (серед них і система Nd–Au–In) вивчено лише на предмет існування тернарних сполук окремих складів, ізоструктурних до відомих структурних типів ІМС. Існування сполуки NdAu_{0,55}In_{1,45} встановили під час пошуку ізоструктурної сполуки до Nd₃₉Ir_{10,98}In_{36,02} [1].

Зразок складу Nd₃₉Au₁₁In₃₆ синтезували методом електродугової плавки. Проте, якісних кристалів для структурних досліджень у ньому не виявили. Тому провели спеціальну термічну обробку: сплав у танталовому контейнері вакуумували у кварцову ампулу і помістили у муфельну піч з автоматичним регулюванням температури. Зразок нагріли до 1275 К протягом 5 год., витримали за цієї температури 5 год., тоді поступово охолодили зі швидкістю 5 К/год до 1000 К, потім – зі швидкістю 15 К/год до 700 К, і – до кімнатної температури протягом 10 год. Після синтезу зразок легко відокремили від контейнера. Взаємодії між зразком та матеріалом контейнера не простежували. Монокристали у вигляді пластинок неправильної форми протестували методом Лауе і встановили їхню гексагональну сингонію.

Масив експериментальних даних отримано на монокристальному дифрактометрі Stoe IPDS-II (Mo K α -випромінювання). Кристалічну структуру нової сполуки розв’язано в рамках моделі структурного типу CaIn₂ [2] з використанням комплексу програм SHELXL-97 [3] і уточнено в анізотропному наближенні до складу NdAu_{0,55}In_{1,45} (ПГ *P6₃/mmc*, *a* = 0,48215(7) нм, *c* = 0,75755(15) нм, *wR2* = 0,0479, 138 незалежних відбить *hkl*, 8 уточнених параметрів). Уточнений склад сполуки добре корелює з даними EDX аналізу (електронний скануючий мікроскоп Leica 420i).

У таблиці наведено координати та параметри теплового коливання атомів, а на рисунку зображено укладку тригональних призм у структурі сполуки NdAu_{0,55}In_{1,45} навколо атомів статистичної суміші (Au,In).

Таблиця

Координати та параметри теплового коливання атомів
у структурі сполуки NdAu_{0,55}In_{1,45}

Атом	ПСТ	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> _{екв.} · 10 ² , нм ²
Nd	2 <i>b</i>	0	0	1/4	0,0091(3)
<i>M</i> *	4 <i>f</i>	2/3	1/3	0,04228(9)	0,0127(2)
Атом		<i>U</i> ₁₁	<i>U</i> ₂₂	<i>U</i> ₃₃	<i>U</i> ₁₂
Nd		0,0096(3)	0,0096(3)	0,0080(4)	0,0048(2)
<i>M</i> *		0,0083(2)	0,0083(2)	0,0216(4)	0,0041(2)
<i>M</i> * = 0,73(1) In + 0,27(1) Au; ** <i>U</i> ₁₃ = <i>U</i> ₂₃ = 0					

Координаційними многогранниками атомів неодиму є гексагональні призми з атомів статистичної суміші з центрованими основами (КЧ = 14). Атоми статистичної суміші (Au,In) знаходяться всередині тригональних призм з атомів неодиму з центрованими бічними гранями і основою (КЧ = 10).

У структурі сполуки NdAu_{0,55}In_{1,45} віддалі між атомами статистичної суміші становлять 0,285 нм і є меншими за суму атомних радіусів Au та In (*r*_{Au} + *r*_{In} = 0,307 нм [4]), що свідчить про певну взаємодію між атомами в цих парах.

Сполука NdAu_{0,55}In_{1,45} доповнює ряди ізоструктурних тернарних індивідів зі структурою типу CaIn₂: *RZnIn*, *RCdIn*, *R₂AgIn₃*.

Частина роботи виконана в рамках дослідницької стипендії фонду DAAD (Німеччина).

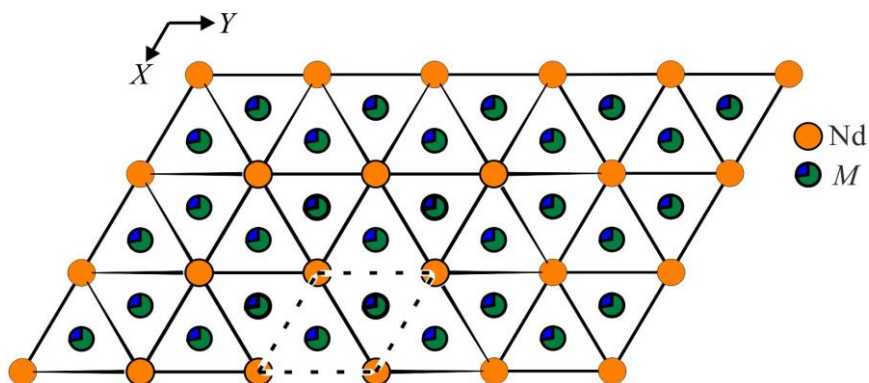


Рис. Укладка тригональних призм навколо атомів статистичної суміші $M = 0,73(1) \text{ In} + 0,27(1) \text{ Au}$ вздовж напрямку Z структури сполуки $\text{NdAu}_{0,55}\text{In}_{1,45}$

1 Dominyuk N., Zaremba V.I., Rodewald U. Ch., Pöttgen R. $\text{Nd}_{39}\text{Ir}_{10,98}\text{In}_{36,02}$ – A complex intergrowth structure with CsCl- and AlB_2 -related slabs // *Z. Naturforsch.* – 2015. – Vol. 70(7)b. – P. 497–503.

2 Iandelli A. MX_2 -Verbindungen der Erdalkali – und Seltenen Erdmetalle mit Gallium, Indium und Thallium // *Z. Anorg. Allg. Chem.* –1964. –Vol. 330. –P. 221–232.

3 Sheldrick G.M., SHELX-97: Program for Crystal Structure Refinement. University of Göttingen, Germany, –1997.

4 Эмсли Дж. Элементы // М.: Мир, 1993. – 256 с.

ДОСЛІДЖЕННЯ УМОВ ОДЕРЖАННЯ І ВЛАСТИВОСТЕЙ ПОДВІЙНОГО ГІДРАТОВАНОГО КАЛІЙДІАМОНІЙФОСФАТУ

Жуляк І.Д.¹, Копілевич В.А.², Давискиба В.В.³

¹ Уманський національний університет садівництва, Zhilyak@i.ua

² Національний університет біоресурсів і природокористування України

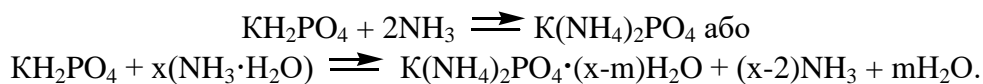
³ Уманський державний педагогічний університет ім. Павла Тичини

Ортофосфати калію та амонію мають практичне значення в нікелевій обробці металів для запобігання утворення окалини, як складовий компонент флюсів-розчинників оксидів металів, для зниження жорсткості води та запобігання утворення накипі в котлах, в якості вихідних реагентів для одержання конденсованих полі- та метафосфатів, а також для синтезу нових технічних матеріалів типу люмінофорів, провідних композитів, кераміки.

Азотовмісні фосфати калію широко використовуються в якості ефективних мінеральних добрив з високим ступенем засвоєння при вирощуванні сільськогосподарських культур. Важливою характеристикою азотовмісних фосфатів калію як мінеральних добрив є їх висока розчинність у воді та наявність одночасно високого вмісту макроелементів живлення рослин калію, азоту та фосфору, а тому також можливе їх використання у якості біологічно активних речовин для фертигації рослин.

Метою даної роботи є вивчення умов одержання та дослідження хімічними і фізико-хімічними методами аналізу подвійного гідратованого калійдіамонійфосфату $\text{K}(\text{NH}_4)_2\text{PO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

Подвійний калійдіамонійфосфат $\text{K}(\text{NH}_4)_2\text{PO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ одержували відповідно до методики [1] при змішуванні розчину KH_2PO_4 з концентрованим водним розчином аміаку при температурі $0 - 5^\circ\text{C}$ і витриманням реакційної суміші протягом 24 годин до повного осадження цільового продукту. Утворення продукту індивідуального складу відбувається за схемою реакції:



Як вихідні реактиви для синтезу використовували KH_2PO_4 кваліфікації (ч.д.а.), а також концентрований водний розчин аміаку (23÷25% мас.) (ч.д.а.).

За хімічним складом продукт відповідав брутто-формулі $\text{K}_2\text{O} \cdot \text{P}_2\text{O}_5 \cdot 4\text{NH}_3 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, молекулярна формула $\text{K}(\text{NH}_4)_2\text{PO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

За даними ІЧ-спектроскопії в спектрі подвійного калійдіамонійфосфату в області $3300\text{-}2800\text{ см}^{-1}$ спостерігається сильна широка смуга поглинання, яка відноситься до валентних коливань води та іона амонію груп ($-\text{OH}$ і $-\text{NH}$). В області $2250\text{-}1945\text{ см}^{-1}$ присутні смуги поглинання, які можливо можна віднести до валентних коливань $-\text{OH}$ групи води, які утворюють водневий зв'язок з ортофосфатним аніоном.

В діапазоні $1720\text{-}1600\text{ см}^{-1}$ знаходяться також деформаційні коливання води та коливання які можна віднести деформаційно асиметричних групи NH_4^+ . Виділити з суперпозиції характерні коливання води і йона амонію не можливо.

Одночасно в інтервалі $1460\text{-}1400\text{ см}^{-1}$ фіксуються сильні смуги поглинання, які відповідають тільки для іону NH_4^+ деформаційно асиметричні коливання та характерні для амонійних фосфатів.

В області $1200\text{-}1250\text{ см}^{-1}$ розміщена смуга поглинання, яка відноситься до коливання груп $\text{P}-\text{O}$ в ланцюгу $-\text{P}-\text{O}-\text{H}-\text{NH}_3$ [2], які слабо проявляються в $\text{K}_2(\text{NH}_4)_2\text{PO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

Асиметричні і симетричні валентні коливання фосфатної групи PO_4^{3-} спостерігаються в областях $1075\text{-}885\text{ см}^{-1}$ у вигляді сильних і середніх смуг поглинання.

В спектрі проявляються слабкі коливання в області 850 см^{-1} на основі ізотонічного зміщення і відносяться до неплосинного деформаційного коливання групи $\text{H}-\text{O}-\text{P}$.

Слабка смуга поглинання спостерігаються при 645 см^{-1} , яка відповідає коливанням групі OPO середніх фосфатів. В діапазоні $555\text{-}420\text{ см}^{-1}$ спостерігаються деформаційні симетричні і асиметричні коливання груп $\delta_s(\text{PO}_4)$, $\delta(\text{O}_3\text{PO}')$.

Таким чином, на основі аналізу ІЧ спектрів встановлено, що в подвійного калійдіамонійфосфату, який містить дві молекул води, одночасно присутні коливання води, іонів амонію і середнього ортофосфату, характер яких відрізняється від відомих речовин.

На основі результатів рентгенофазового аналізу для подвійного гідратованого калійдіамоній фосфату $\text{K}(\text{NH}_4)_2\text{PO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ встановлено його просторову групу $P-1$, яка має моноклінний тип кристалічної решітки з параметрами елементарної комірки: $a = 5,836(3)\text{ \AA}$; $b = 22,052(1)\text{ \AA}$; $c = 8,575(2)\text{ \AA}$; $\beta = 99,53^\circ$, $V = 1088,4\text{ \AA}^3$. Дані результати відрізняються від відомих подвійних фосфатів калію і амонію [3,4].

Таким чином виділено з водно-аміачних розчинів кристалічний гідратований калійдіамонійфосфат індивідуального складу $\text{K}(\text{NH}_4)_2\text{PO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. На основі одержаних результатів підтверджено склад, властивості, наявність молекул води і йону амонію. За допомогою метода ІЧ-спектроскопії проведено порівняння спектрів одержаної речовини з відомими сполуками, встановлено її індивідуальність, яка підтверджується рентгенофазовим аналізом.

1. Патент України на корисну модель № 85388 у. Спосіб одержання подвійного ортофосфату калію-амонію /І.Д. Жилияк, В. А. Копілевич, В.Я. Коваль, І.М. Сенік, Н.О. Ляховська, І.В. Затовський; заявник і патентотримач Уманський національний університет садівництва. № а 201204743 від 17.04.2012. Опубл. 25.11.2013. Бюл. № 22.

2. Жилияк І.Д. До питання синтезу подвійного натрійдіамоній фосфату гексагідрату $\text{Na}(\text{NH}_4)_2\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ / І.Д.Жилияк, В.А. Копілевич, Л.Ю. Очеретенко, І.М. Казаку, Н.О. Ляховська, В.Я. Коваль, М.М. Бойко / Наукові записки Тернопільського державного педагогічного університету. Серія: Хімія. - 2016. – Вип. 23. – С.40-44.

3. Yasuhiro O. Phase Transitions in Mixed Crystal System $\text{K}_{1-x}(\text{NH}_4)_x\text{H}_2\text{PO}_4$ / О. Yasuhiro, Н. Tomoyuki, І. Takuro // J. Phys. Soc. Jap. – 1987. – Vol. 56, Issue 2. – pp. 577.

4. Патент КНР № CN87101529A, C01B25/45. Спосіб спільного приготування різноманітних складних добрив /Ван Чжерен (КНР); заявник і патентотримач Шеньянський хіміко-технологічний інститут. N87101529 від 04.04.1987; Опубл. 19.10.1988.

КІНЕТИЧНІ МОДЕЛІ ПЕРЕТВОРЕННЯ МЕТАНОЛУ НА ЦЕОЛІТІ ZSM-5

Жох О.О., Трипольський А.І., Стрижак П.Є.

Інститут фізичної хімії ім.Л.В.Писаржевського НАН України, al.zhokh@gmail.com

Перетворення метанолу до диметилового ефіру (ДМЕ) на цеолітних каталізаторах є перспективним промисловим процесом з огляду на те, що ДМЕ є багатотоннажним продуктом хімічної промисловості. Крім того, ДМЕ може бути використаний як екологічно чистий замітник дизельного палива у двигунах внутрішнього згорання. Для промислового впровадження процесу синтезу ДМЕ з метанолу необхідні розрахунки відповідного гетерогенно-каталітичного реактора, які неможливо здійснити без знань про швидкість перебігу власне хімічного перетворення реагенту. Тому з метою встановлення кінетичних особливостей каталітичного дегідрування метанолу до ДМЕ на цеолітному каталізаторі у даній роботі було досліджено швидкість процесу у кінетичній області та встановлено можливі механізми перебігу процесу.

Високу каталітичну активність у реакції перетворення метанолу до ДМЕ виявляє, зокрема, цеоліт ZSM-5. Для дослідження кінетики процесу перетворення метанолу використано промисловий зразок цеоліту ZSM-5. На підставі фізико-хімічних методів аналізу встановлено такі характеристики використаного матеріалу: ступінь кристалічності – 70%, кремнієве число – 35,4, питома площа поверхні – 335 м²/г, об'єм пор – 0,17 см³/г, об'єм мікропор – 0,08 см³/г, концентрація кислотних центрів Бренстеда та Льюїса – 274 та 42 мкмоль/г.

Розроблено ряд кінетичних схем процесу, заснованих на формалізмі Ленгмюра-Хіншельвуда та Ілі-Ріділа. На підставі їх експериментальної перевірки встановлено, що лише два кінетичні рівняння в рамках моделі Ленгмюра-Хіншельвуда є застосовними до опису одержаних експериментальних даних. Зокрема перша кінетична схема передбачає такий механізм перетворення метанолу на активних центрах (Z) на поверхні каталізатора:

- 1) $\text{CH}_3\text{OH} + \text{Z} = \text{CH}_3\text{OHZ}$
- 2) $\text{CH}_3\text{OHZ} + \text{Z} \rightarrow \text{CH}_2\text{Z} + \text{H}_2\text{OZ}$
- 3) $\text{CH}_3\text{OHZ} + \text{CH}_2\text{Z} \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_2\text{Z} + \text{Z}$
- 4) $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{Z} = \text{CH}_3\text{OCH}_3 + \text{Z}$
- 5) $\text{H}_2\text{OZ} = \text{H}_2\text{O} + \text{Z}$

Такій схемі відповідає кінетичне рівняння, яке описує швидкість перетворення метанолу (1):

$$-r = k_2 \cdot \frac{K_M \cdot C_M}{(1 + K_M \cdot C_M + K_W \cdot C_W + K_D \cdot C_D)^2} \quad (1)$$

Друга кінетична схема заснована на механізмі:

- 1) $\text{CH}_3\text{OH} + \text{Z} = \text{CH}_3\text{OHZ}$
- 2) $2\text{CH}_3\text{OHZ} \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_2\text{Z} + \text{H}_2\text{OZ}$
- 3) $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{Z} = \text{CH}_3\text{OCH}_3 + \text{Z}$
- 4) $\text{H}_2\text{OZ} = \text{H}_2\text{O} + \text{Z}$

Кінетичне рівняння, яке відповідає другій схемі:

$$-r = k_2 \cdot \left(\frac{K_M \cdot C_M}{1 + K_M \cdot C_M + K_W \cdot C_W + K_D \cdot C_D} \right)^2 \quad (2)$$

Перша кінетична схема відповідає дисоціативному механізму перетворення метанолу. Згідно із вказаною схемою адсорбована молекула метанолу дисоціює на інтермедіати CH_2 та воду. Друга кінетична схема відповідає асоціативному механізму, який полягає у взаємодії двох адсорбованих молекул метанолу, що призводить до утворення молекули ДМЕ.

На Рис. 1 показано експериментальні дані за різних температур реакції, описані рівняннями (1) та (2). Графічно результати опису є однаковими для обох рівнянь. Між експериментальними даними та теоретичними рівняннями спостерігається гарна відповідність. На підставі розрахованих за допомогою рівнянь (1) та (2) кінетичних констант одержано кінетичні параметри, зокрема, передекспоненційний множник, енергія активації та

теплота адсорбції, які наведено у Таблиці. Кінетичні параметри, визначені у рамках обох кінетичних рівнянь є дуже близькими (енергія активації та теплота адсорбції) або одного порядку (передекспоненційні множники). Розраховані значення кінетичних параметрів узгоджуються із літературними даними для процесу дегідратації метанолу до ДМЕ на цеоліті ZSM-5 [1 – 3].

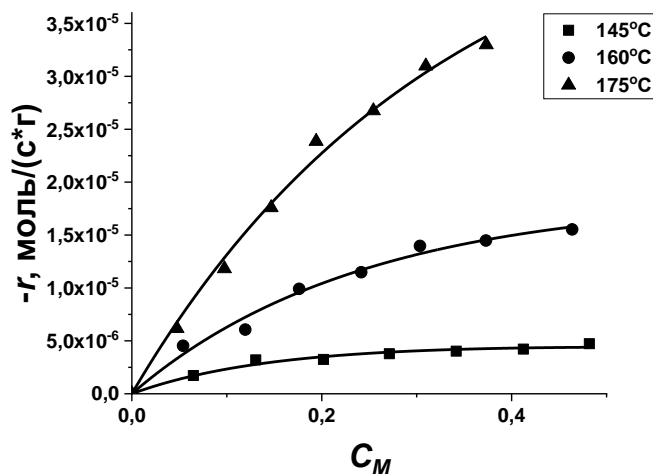


Рис. 1 Експериментальні дані (точки) та теоретичні рівняння швидкості перетворення метанолу (лінії) за різних температур

Таблиця

Розраховані кінетичні параметри процесу перетворення метанолу

Рівняння	Енергія активації, кДж/моль	Теплота адсорбції, кДж/моль	k^0 , моль/(г*с)	K^0 , бар ⁻¹
(1)	123	43	$4,8 \times 10^{10}$	$6,1 \times 10^{-6}$
(2)	123	42	$8,8 \times 10^9$	$9,1 \times 10^{-5}$

Отримані результати свідчать про те, що виокремити конкретну кінетичну модель, яка б забезпечувала виключний опис процесу перетворення метанолу до ДМЕ у кінетичній області, неможливо. Насправді процес очевидно протікає за обома кінетичними схемами одночасно.

Роботу виконано за підтримки Національного фонду досліджень України (грант №2020.02/0050).

1. Ortega C., Rezaei M., Hessel V., Kolb G. Methanol to dimethyl ether conversion over a ZSM-5 catalyst: Intrinsic kinetic study on an external recycle reactor // Chem. Eng. J. – 2018. – 347. – P. 741 – 753.
2. Pope C.G. Adsorption of methanol and related molecules on zeolite H-ZSM-5 and silicalite // J. Chem. Soc. Faraday. Trans. – 1993. – 89. – P. 1139 – 1141.
3. Migliori M., Aloise A., Catizzone E., Giordano G. Kinetic analysis of methanol to dimethyl ether reaction over H-MFI catalyst // Ind. Eng. Chem. Res. – 2014. – 53. – P. 14885 – 14891.

ДОСЛІДЖЕННЯ ГІДРОГЕНІЗАЦІЇ ДИБЕНЗИЛТОЛУЕНУ ЯК ПЕРСПЕКТИВНОГО НАПОКИЧУВАЧА ВОДНЮ

Зюбрицька Ю.І., Кордши О.М., Розанцев Г.М.

Кафедра неорганічної, органічної та аналітичної хімії,
Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна,
ziubrytska.i@donnu.edu.ua

Численні прогнози свідчать про те, що у становленні низьковуглецевої енергетики основну роль відіграє водень. Використання його в якості палива є не простим процесом, оскільки водень не такий вибухонебезпечний, а й складний у транспортуванні газ. На сьогодні існує низка технологій транспортування водню, зокрема: рідкими органічними носіями, балонами, газотранспортними системами. Серед них, технології, що використовують рідкі органічні носії найбільш привабливі. Вони дозволяють транспортувати водень дешевше та безпечніше порівняно із іншими технологіями.

Одним з найбільш перспективних рідких органічних носіїв водню є дибензилтолуен. За участі каталізаторів, 1 моль дибензилтолуену може гідрогенізуватись з 9 молями водню з утворенням ди(циклогексилметил)-метилциклогексану, що відповідає теоретичній ємності по водню 6,2 % мас.

Відомо, що температура, тиск та природа каталізатору помітно впливають на процес гідрогенізації дибензилтолуену. Гідрогенізація дибензилтолуену відбувається за наявності специфічного каталізатора на основі металів Ni, Pd, Pt, Ru нанесеним на $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ у проміжку температур 390...450 К та тиску 3...7,5 МПа. Тому саме ці умови було обрано для проведення досліджень.

Шляхом визначення ступеню гідрогенізації, аналізом проб з газової або рідкої фази, показано вплив вмісту металу Pt та Ru на перебіг реакції. Серія зразків каталізаторів на основі Pt і Ru нанесеним на $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ з масовим вмістом 5, 10 % Pt і 1, 5 % Ru відповідно, показали: майже 100% ступінь перетворення дибензилтолуену досягається за використання каталізатору, що містить 5% Pt/ $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ та 90% ступінь перетворення вихідної речовини за використання каталізатору 1% Ru/ $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$.

Для підтвердження результатів було проведено хроматомаспектроскопічний аналіз речовин виділених у процесі гідрогенізації дибензилтолуену із використанням 5% Pt/ $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$, який ідентифікував ди(циклогексилметил)-метилциклогексан, без помітних домішок.

ГЕТЕРОМЕТАЛІЧНІ (ЛАНТАНОЇД, СТИБІЙ АБО БІСМУТ)ВМІСНІ КОМПЛЕКСИ З СЕМИКАРБАЗОНОМ САЛІЦИЛОВОГО АЛЬДЕГІДА

¹*Євсєєва М.В.*, ²*Сидорук Т.І.*, ²*Ющенко Т.І.*

¹Вінницький національний медичний університет ім.М.І. Пирогова,

evseevamv359@gmail.com

²Вінницький національний технічний університет

Гетерометалічні комплексні сполуки лантаноїдів привертають увагу багатьох вчених, завдяки тому, що вони володіють широким спектром функціональних властивостей, та можуть слугувати вихідними речовинами для отримання керамічних матеріалів, які мають певний склад, будову і електричні властивості (діелектричні, напівпровідникові, провідникові, надпровідні). Для отримання такого виду комплексних сполук часто вибирають основи Шиффа, які є полідентатними лігандами, можуть проявляти різні способи координації, а також виступати у ролі місткових лігандів.

Метою даної роботи є синтез нових гетерометалічних (лантаноїд, стибій або бісмут)вмісних координаційних сполук з семикарбазоном саліцилового альдегіда, встановлення їх складу, будови та дослідження властивостей.

Процес отримання цих сполук складається із трьох стадій: перша стадія полягає в отриманні семикарбазону саліцилового альдегіду ($H_2L=2-HOC_6H_4CH=NNHC(O)NH_2$); друга стадія – синтез та виділення в твердому стані комплексних сполук лантаноїдів з семикарбазоном саліцилового альдегіда складу $[Ln(HL)L(H_2O)_2] \cdot nH_2O$ ($Ln(III) = Nd, n=1; Gd, n=0$), методика описана в роботі [1]; третя стадія – взаємодія суспензій $[Ln(HL)_2L]$ ($Ln(III) = Nd, Gd$) в хлороформі з безводним стибій(III) хлоридом або бісмут(III) хлоридом, при нагріванні у співвідношенні 1:1.

За такою методикою виділено чотири однорідні мікрокристалічні комплекси жовтого кольору, які мають різні відтінки. Практичний вихід отриманих сполук становить 70-75% від теоретичного. Виділені речовини є не розчинними в етері, бензені, спирті, гексані; у воді вони при нагріванні розкладаються. Отримані сполуки є неелектролітами, що підтверджено вимірюванням електропровідності їх розчинів у диметилформаміді.

Для встановлення складу і будови отриманих сполук використовували елементний і рентгенофазовий аналізи, ІЧ-спектроскопічний і термогравіметричний методи дослідження. Встановлено, що виділені гетерометалічні комплекси мають такий склад: $[Ln(HL)L(MCl_3)]$ ($Ln(III) = Nd, Gd; M(III) = Sb, Bi$). Термогравіметричний аналіз виділених сполук показав, що в інтервалі температур 80-170 °С спостерігається ендотермічний ефект, який за втратою маси відповідає відщепленню молекули HCl. Повне термічне розкладання виділених сполук спостерігається в інтервалі температур 320-450 °С.

На основі аналізу даних ІЧ-спектроскопічного дослідження встановлено, що органічний ліганд H_2L у виділених комплексних сполуках зв'язаний з атомом лантаноїда через фенольний атом Оксигену і атом Нітрогену азометинової групи з утворенням п'яти і шестичленного металоциклів і виступає в ролі тетрадентатного хелатуючого ліганда, а кислота Льюїса утворює зв'язок з атомом Оксигену фенольної групи ліганду. Для точного вирішення питання про будову виділених комплексів необхідні додаткові дослідження.

Досліджено температурну залежність питомого опору пресованих експериментальних зразків, виготовлених на основі виділених сполук в інтервалі температур 30 –150 °С та встановлено, що вони мають властивості напівпровідникових матеріалів і можуть бути використані для виготовлення резистивних елементів у терморезисторах. Встановлено, що розраховані напівпровідникові характеристики – температурний коефіцієнт опору та чутливість напівпровідникового матеріалу залежать, як від природи лантаноїда, так і від природи р- елемента.

1. Самусь Н. М., Гандзий М. В., Сеница И. В., Цапков В. И. Координационные соединения редкоземельных элементов с семикарбазоном саліцилового альдегіда // Коорд. химия. – 1992 – Т.18, №1. – С. 107–111.

ВИЗНАЧЕННЯ КРИТИЧНОЇ КОНЦЕНТРАЦІЇ МІЦЕЛОУТВОРЕННЯ (ККМ) В СИСТЕМІ ІЗОПРОПАНОЛ – ВОДА СТАЛАГМОМЕТРИЧНИМ МЕТОДОМ

Каленюк І.С., Онищук О.О., Камінський О.М., Тітов Ю.О.

Житомирський державний університет ім. Івана Франка, irynakaleniuk015@gmail.com

Вода є однією з найбільш розповсюджених дисперсійних середовищ у різних системах. Вона впливає на перебіг численних колоїдних, фізико-хімічних, біологічних і технологічних процесів тощо.

Вода також впливає на процеси піноутворення, які відбуваються в побутових, харчових, технологічних процесах. Найбільш ефективно піноутворення забезпечується тоді, коли концентрація ПАР у спінюваній рідині відповідає критичній концентрації міцелоутворення (ККМ). Поверхневий натяг водних розчинів ПАР різко зменшується з ростом їх концентрації аж до ККМ, після чого з підвищенням концентрації ПАР змінюється мало. Тобто фактично ККМ є тим мінімальним значенням концентрації, вище якого подальше розчинення ПАР в рідині не призводить до помітного зниження поверхневого натягу [1].

Одним з ефективних простих, але точних методів визначення поверхневого натягу рідин та розчинів ПАР є сталагмометричний метод. В основі методу лежить вільний відрив капель рідини з капіляра сталагмометра під дією сили тяжіння. Кожна крапля відривається від нижнього кінця трубки лише тоді, коли її вага буде більшою ніж сила поверхневого натягу, який утримує краплю на кінці трубки [2].

Метою даної роботи є: визначення критичної концентрації міцелоутворення (ККМ) в системі ізопропанол – вода сталагмометричним методом.

Сталагмометр налаштовували таким чином, щоб середня кількість крапель рідини, яка витікала за хвилину становила 35 – 40 крапель. Кожного разу при визначенні поверхневого натягу розчинів низькомолекулярних ПАР, води та ізопропілового спирту відраховували по 20 краплин рідини і зважували її на електронних терезах другого класу точності.

Формула для розрахунку поверхневого натягу має вигляд:

$$\sigma = \frac{0,78 * m}{N}, \quad (1)$$

де: m – маса крапель рідини, взята в g ; N – число крапель рідини.

Хід виконання роботи, описаний в [3]: спочатку приготували по 50 мл розчинів ізопропанолу у воді з концентраціями 0,26; 1,31; 2,62 моль/л; далі поміряли сталагмометром виміряли поверхневий натяг спочатку води, а потім розчинів ПАР з найвищої концентрації до чистого ізопропанолу за кімнатної температури 21 °С.

На рис. 2 представлена графічна залежність коефіцієнта поверхневого натягу від натурального логарифма концентрації ПАР.

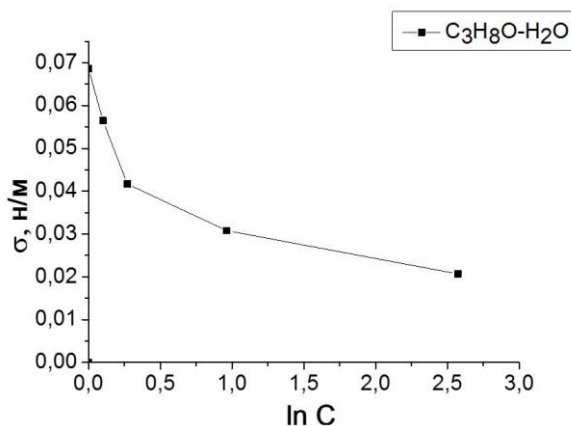


Рис.2 Залежність поверхневого натягу від концентрації в системі $C_3H_8O - H_2O$

Встановлено, що ККМ для ізопропанолу в системі ізопропанол – вода становить 1,042 моль/л, що добре узгоджується з літературними даними.

1. Псюк М.О. Метод визначення критичної концентрації міцелоутворення поверхнево-активних речовин // Науковий вісник ІФНТУНГ, 2007. – № 1(15) – С.35 – 38.

2. Фізична хімія Розділ “Поверхневі явища та дисперсні системи” [Електронний ресурс] – Режим: https://nmetau.edu.ua/file/poverhnevi_yavischa_ta_dispersni_sistemi.pdf

3. Проценко В.С. Методичні вказівки до лабораторного практикуму для студентів напрямку підготовки 6.051401 – «Біотехнологія» та 6.051301 – "Хімічна технологія" з дисципліни "Фізична та колоїдна хімія", "Поверхневі явища і дисперсні системи". – Дніпропетровськ: ДВНЗ УДХТУ, 2012. – 43 с.

ОКИСЛЕНИЕ ДИОКСИДА СЕРЫ В ПРИСУТСТВИИ КОМПЛЕКСОВ ЖЕЛЕЗА(III), ЗАКРЕПЛЁННЫХ НА ПРИРОДНОМ БЕНТОНИТЕ

Киосе Т.А., Попруга Ю.И., Киосе Т.М., Данюкина О.М.

Одесский национальный университет имени И.И. Мечникова, kiosetatyana@gmail.com

Проблема удаления диоксида серы не ограничивается очисткой дымовых газов и других организованных выбросов, для чего эффективными признаны природные сорбенты, главным образом, клиноптилолит и морденит. На предприятиях различных отраслей промышленности происходит загрязнение воздуха рабочей зоны неорганизованными выбросами, содержащими SO_2 в концентрациях в 10-15 раз выше ПДК (10 мг/м^3) не только в аварийных ситуациях, но и в штатной обстановке, что требует применения рабочими средств индивидуальной защиты органов дыхания (СИЗОД). Вопрос очистки воздуха от SO_2 в СИЗОД до настоящего времени не решен, о чем свидетельствуют обзорные публикации, а также продолжающийся поиск новых перспективных природных сорбентов диоксида серы. На кафедре неорганической химии и химической экологии изучаются защитные свойства не только клиноптилолита и морденита, но также и других природных сорбентов, а именно, базальтового туфа, трепела и пр., добытых из разных месторождений Украины. Так, было установлено, что защитные свойства сорбентов заметно повышаются при модифицировании их хлоридом меди(II), гидроксидом натрия, гексаметилентетрамином, а также смесью этих реагентов. В настоящее время наиболее актуальным является создание более активных хемосорбционно-каталитических композиций для обезвреживания диоксида серы при его содержании в воздухе до 15 ПДК. В работе в качестве адсорбента диоксида серы и носителя хемосорбционно-каталитических композиций на основе солей железа(III) используется бентонит Дашуковского месторождения Украины, химический состав которого в расчете на оксиды, в мас. % таков: $\text{SiO}_2 - 49,6$; $\text{Al}_2\text{O}_3 - 13,5$; $\text{Fe}_2\text{O}_3 - 7,2$; $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3 - 3,67$; $\text{MgO} - 2,0$. Хемосорбционно-каталитические композиции получали методом импрегнирования носителя по влагоемкости: 10 г высушенного при 110°C природного бентонита со средним размером зёрен $\bar{d}_3 = 0,75 \text{ мм}$ помещали в чашки Петри и пропитывали водным раствором соли FeX_3 ($\text{X} = \text{Cl}^-, \text{NO}_3^-, \text{SO}_4^{2-}$) при заданных концентрациях компонентов. В закрытой чашке Петри образец при комнатной температуре выдерживали 20 часов. После "созревания" влажный образец сушили в воздушной среде при температуре 110°C в течение 3 часов до постоянной массы. Содержание компонентов композиций рассчитывали на единицу массы сухого носителя. Полученные данные свидетельствует о том, что для нитратной, сульфатной и

$\tau_{\text{ПДК}}$, мин

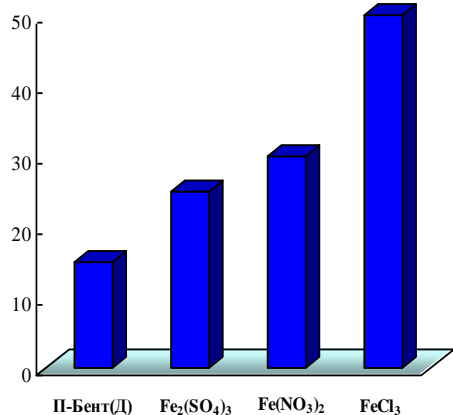


Рис. Влияние природы прекурсоров железа(III) на $\tau_{\text{ПДК}}$ композиций FeX_3 ($\text{X} = \text{Cl}^-, \text{NO}_3^-, \text{SO}_4^{2-}$) при $C_{\text{Fe(III)}} = 0,1 \cdot 10^{-5}$ моль/г

хлоридной систем с увеличением концентрации железа(III) защитные, сорбционные и кинетические параметры реакции окисления диоксида серы кислородом проходят через максимум при $C_{\text{Fe(III)}} = 0,1 \cdot 10^{-5}$ моль/г. Влияние природы прекурсоров железа(III) на время защитного действия ($\tau_{\text{ПДК}}$) композиции $\text{FeL}_3/\text{П-Бент(Д)}$ ($\text{L} = \text{NO}_3^-, \text{SO}_4^{2-}, \text{Cl}^-$) при $C_{\text{Fe(III)}} = 0,1 \cdot 10^{-5}$ моль/г представлено на рис. Видно, что время защитного действия систем, содержащих нитрат, сульфат железа(III), по сравнению с природным бентонитом, изменяются незначительно, тогда как защитные свойства композиции $\text{FeCl}_3/\text{П-Бент(Д)}$ напротив, возрастают почти в четыре раза по сравнению с природным бентонитом. Константа первого порядка, $k_{1/2}$, рассчитанная по времени полупревращения ($\tau_{1/2}$) SO_2 для всех образцов при варьировании концентрации железа(III) не является постоянной.

ІЄРАРХІЧНІ ЦЕОЛІТИ – КАТАЛІЗАТОРИ РЕАКЦІЇ ГЕВАЛЬДА

Курмач М.М.¹, Конишева К.М., Лозовицька О.І., Швець О.В.

Інститут фізичної хімії ім. Л.В. Писаржевського НАН України, mazinator3710@ukr.net

Реакція Гевальда – одержання 2-амінотіофенів з кетонів, сірки та малонодінітрилу перебігає у 2 стадії: на першій стадії відбувається реакція Кневенагеля між кетоном та малонодінітрилом [1]. Утворений продукт взаємодіє з сіркою з утворенням кінцевого 2-амінотіофену. Активними каталізаторами вказаного процесу є аміни (триетиламін, диетиламін тощо) та основні оксиди (оксиди магнію, цинку, тощо) [2], а недоліками таких каталізаторів є відносна складність їх відділення від кінцевого продукту (аміни) та відносно низька поверхня гетерогенних каталізаторів. Вирішення даної задачі можливе з використанням даних підходів, зокрема диспергування каталітично активної компоненти на поверхні матриць з розвиненою поверхнею, зокрема, ієрархічних цеолітах. При використанні ієрархічних цеолітів як вихідних матриць можна очікувати високу дисперсність частинок оксидів основних металів в цеолітах та їх доступність молекул для об'ємних 2-амінотіофенів.

Синтез вихідних матриць – ієрархічних цеолітів проводили методом гідротермального синтезу з використанням полічетвертинних амонійних солей (Gemini-ПАР) як структуро-спрямовуючих агентів (ССА) [3]. Вказані сполуки виконують одночасно роль структуро-спрямовуючих агентів, спряючи утворенню певної цеолітної структури; та роль обмежувача росту кристалу в одному чи декількох напрямках, що забезпечується за рахунок наявності в матеріалах гідрофобних алкільних хвостів C16-C18. Значне зменшення розмірів частинок ієрархічних цеолітів дозволяє суттєво збільшити значення питомої зовнішньої поверхні та об'єму мезопор в порівнянні з «традиційними» аналогами та досягають значень 600 м²·г⁻¹ and 1,2 см³·г⁻¹, відповідно.

В роботі досліджені цезієві форми ієрархічних цеолітів, синтезовані шляхом іонного обміну натрієвих форм ієрархічних цеолітів; та доповані оксидами магнію, цинку, цезію та титану, що одержували просоченням цеолітних матриць відповідними солями та їх подальшим розкладом.

Каталітичні властивості синтезованих матеріалів досліджено в процесі перетворення циклічних кетонів: циклопентанону, циклогексанону, циклогептанону та циклооктанону. Високий вихід цільового продукту в процесі перетворення циклогексанону в 2-аміно-4,5,6,7-тетрагідробензо[*b*]тіофен-3-карбонітрил досягається для Cs- та Mg-вмісних ієрархічних цеолітів структурного типу BEA, причому у випадку іонообмінних форм Cs/Al-BEA (наногубки) досягається кількісне перетворення кетону у цільовий продукт.

Активність Cs-вмісних ієрхічних цеолітів в процесах перетворення циклогептанону та циклооктанону значно зменшується, хоча для Cs/Al-BEA_{nч} досягається вихід цільового бензтіофену близько 58%. При цьому суттєво зростає частка 2-циклооктиліден- та 2-цилогептиліденмалонодінітрилів – продуктів першої стадії процесу. Останнє може свідчити про недостатню силу чи концентрацією основних центрів наявних у синтезованих цеолітних матеріалах.

1. Sabnis R., Rangnekar D., Sonawane N., 2-Aminothiophenes by the Gewald reaction// J heter chem. – 1999. – 36, № 2. – P. 333-345.

2. Adib M., Janatian Ghazvini H., Soheilzad M., Tajbakhsh M., Amanlou M., One-Pot Four-Component Synthesis of Thieno[2,3-*d*]pyrimidin-4-amines via Sequential Gewald/Cyclocondensation Reactions// Helvetica Chimica Acta.– 2015. – 98, № 8. – P. 1079-1086.

3. Choi M., Na K., Kim J., Sakamoto J, Terasaki O., Ryoo R. Stable single-unit-cell nanosheets of zeolite MFI as active and long-lived catalysts //Nature. – 2009. – 461, № 7261. – P. 246-249.

ВИЗНАЧЕННЯ КИСЛОТНОСТІ ІЄРАРХІЧНИХ ЦЕОЛІТІВ МЕТОДОМ ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНОГО ТИТРУВАННЯ

Курмач М.М., Конишева К.М., Лозовицька О.І., Швець О.В.

Інститут фізичної хімії ім. Л.В. Писаржевського НАН України, mazinator3710@ukr.net

Ієрархічні цеоліти - це новий клас матеріалів, що поєднують характерну для цеолітів систему мікропор з внутрішньо та міжкристалічною мезопористістю, що забезпечує транспортування об'ємних молекул до активного центру та дозволяє поліпшити каталітичну активність в процесах за їх участю.

Для прогнозування каталітичних властивостей таких матеріалів необхідно знати їх кислотні або основні властивості, включаючи тип, концентрацію та силу активних центрів таких матеріалів. Ієрархічні цеоліти були синтезовані з використанням Gemini-type поверхнево-активних речовин як структуроутворюючих агентів [1]. Кислотність В-, Al-, Ga-силікатних ієрархічних цеолітів досліджували за допомогою потенціометричного титрування. pK_a зразків розраховували за теорією Грана [2].

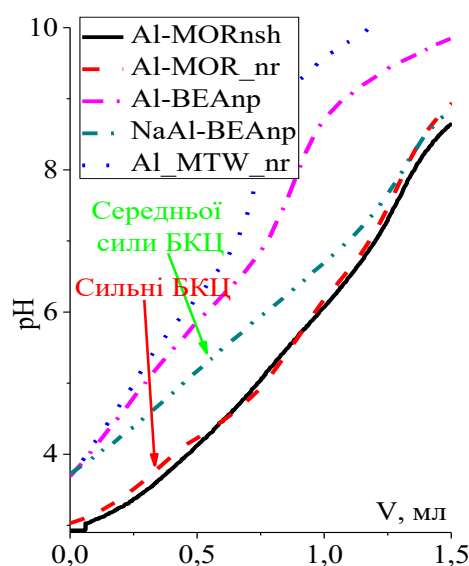


Рис. Типові криві потенціометричного титрування

На основі проведених досліджень виявлено, що сила кислотних центрів Бренстеда в межах однієї цеолітної структури (BEA, MTW, MFI) хоч і спадає ряду $Al > Ga \gg B$, проте відмінність в силі центрів алюмосилікатних та галосилікатних центрів не є значною. В ряду алюмосилікатних цеолітів сила кислотних центрів Бренстеда є найвищою для цеоліту морденіт (до $pK_a = 3,6$), а для решти корелює із середнім значенням співвідношення Si/Al та зростає в ряду $BEA < MFI < MTW$. Виявлено, що морфологія нанокристалітів впливає на силу кислотних центрів. В меншій мірі це проявляється послабленням центрів для цеоліту структурного типу MOR при переході від наностержнів до наночасток, та значно в більшій мірі для цеолітів структурного типу BEA при переході від наночасток до наночасток, коли має місце збільшення pK_a на 0,4 – 0,9. - Морфологія нанокристалітів впливає на співвідношення кислотних центрів Бренстеда/Льюїса, що очевидно обумовлено меншою стабільністю перших на зовнішній поверхні.

1. Gran G. Determination of the Equivalence Point in Potentiometric Titrations. Part II// *Analyst.* – 195. – 77. – P. 661- 671.

2. Choi M., Na K., Kim J., Sakamoto J, Terasaki O., Ryoo R. Stable single-unit-cell nanosheets of zeolite MFI as active and long-lived catalysts // *Nature.* – 2009. – 461, № 7261. – P. 246-249.

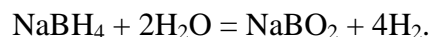
ЗАКОНОМІРНОСТІ ГІДРОЛІЗУ БОРОГІДРИДУ НАТРІЮ В ПРОТОЧНОМУ РЕАКТОРІ З ПЛАТИНОВИМ КАТАЛІЗАТОРОМ

Кутсий А.В., Манілевич Ф.Д., Пірський Ю.К., Панчишин Т.М.

Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського НАН України,

kutsyi@ionc.kiev.ua

Гідроліз борогідриду натрію є одним з найбільш ефективних шляхів генерування чистого водню безпосередньо в місці його використання, наприклад, для живлення паливних комірок з водневим анодом. Стабілізований лугом водний розчин борогідриду натрію стійкий протягом тривалого часу. Однак при його контакті з каталізаторами при кімнатній температурі протікає реакція гідролізу, в результаті якої утворюються водень та метаборат натрію [1]:



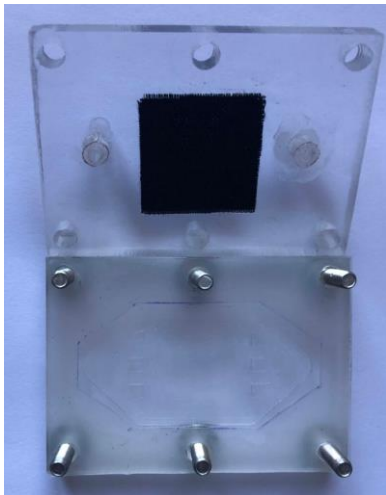
Згідно з наведеною реакцією, в результаті гідролізу одного моля NaBH_4 утворюється 4 моли водню – два з борогідриду і два з води. Отримуваний водень забруднений лише водяною парою і може подаватися на аноди паливних комірок без очистки і зволоження. Інший продукт гідролізу (NaBO_2) є екологічно безпечним і може бути відновлений до борогідриду. Швидкість цієї реакції залежить від багатьох параметрів і легко може бути контрольована.

На даний час відомі понад 300 гомогенних та гетерогенних каталізаторів реакції гідролізу борогідриду натрію: органічні та мінеральні кислоти, благородні та неблагородні метали, сплави і композити на їхній основі, галогеніди і бориди металів та ін., в тому числі, нанодисперсні каталізатори, іммобілізовані на різних носіях (наприклад, на оксидах металів або на активованому вугіллі). Літературні дані свідчать, що найбільш активними металами-каталізаторами гідролізу NaBH_4 є родій, рутеній та платина [1]. Проте, має місце значна розбіжність в опублікованих даних, оскільки активність каталізаторів залежить від умов їхнього відновлення та синтезу, природи використаних прекурсорів, кількості активної фази каталізатора та типу носія.

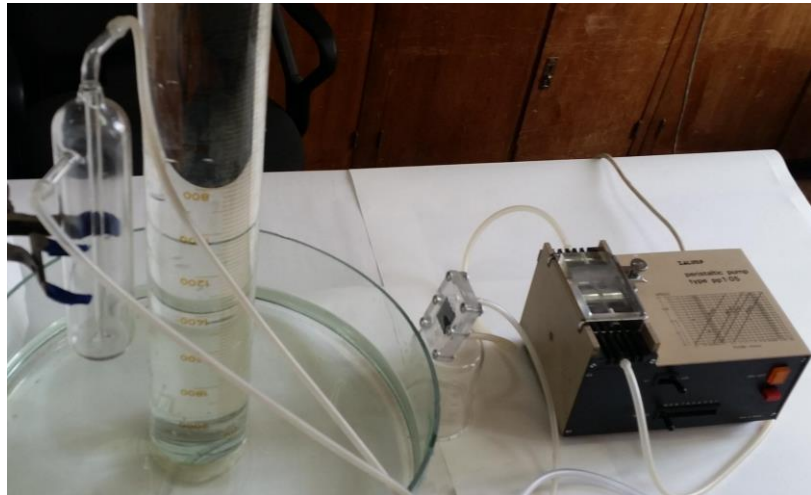
В даній роботі для пришвидшення реакції гідролізу борогідриду натрію розроблені нанодисперсні платинові каталізатори, іммобілізовані на вуглецевій тканині, та досліджені закономірності каталітичного гідролізу NaBH_4 в проточному реакторі. Платиновий каталізатор на вуглецевому носії Pt(40 %)/Vulcan XC-72 приготували з використанням розчину $\text{H}_2\text{PtCl}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, етиленгліколю та формальдегіду. Каталітичне чорнило, до складу якого входили платиновий каталізатор Pt(40 %)/Vulcan XC-72 та 30 - 50 мас.% 5 %-ї дисперсії мономера Nafion (ND) D521 на спиртовій основі 1100 EW, піддавали ультразвуковій обробці при частоті 22 - 25 кГц протягом 2 -3 хв., після чого наносили на вуглецеву тканину (ВТ) Plain Carbon Cloth - 1071 НСВ шляхом розпилювання аерографом. Виконували проміжну сушку шарів чорнила, що необхідно для надання їм кращої адгезії до тканини. Після нанесення на ВТ певної кількості каталізатора (1 - 2 мг/см²) проводили вимірювання маси зразка на аналітичних терезах. За потреби нанесення каталізатора повторювали для досягнення необхідної маси каталітичного шару. З обробленої таким чином вуглецевої тканини вирізали зразки розміром 2.5 × 2.5 см, які термічно обробляли при 130 °С, після чого використовували в плоскому проточному реакторі.

Реактор був виготовлений із оргскла і складався з двох пластин із заглибинами, між якими знаходилась вуглецева тканина з нанесеним на неї каталітичним шаром (рис. 1а). Для забезпечення герметичності реактора між пластинами розміщували силіконову прокладку, після чого пластини щільно з'єднували за допомогою болтів і гайок з нержавіючої сталі. Підведення в реактор лужного розчину NaBH_4 і відведення продуктів гідролізу здійснювали через відповідні вклеєні штуцери із оргскла.

Для оцінки швидкості гідролізу борогідриду натрію в такому реакторі на розроблених каталізаторах була створена волюмометрична установка, яка дозволяла вимірювати об'єм виділеного водню через певні проміжки часу. Основними компонентами установки були: реактор з каталізатором, перистальтичний насос, евідіометр та сепаратор для збору рідких



a



б

Рис. 1 Фотографії реактора з каталізатором на вуглецевій тканині (*a*) та волюмометричної установки для вимірювання об'єму виділеного водню (*б*)

продуктів гідролізу (рис. 1*б*). Виміряні значення об'єму водню перераховували на нормальні умови та розраховували середню швидкість виділення водню за методикою, описаною в [2]. Ступінь конверсії борогідриду натрію розраховували як відсоткову частку об'єму виділеного водню від теоретично можливого його об'єму.

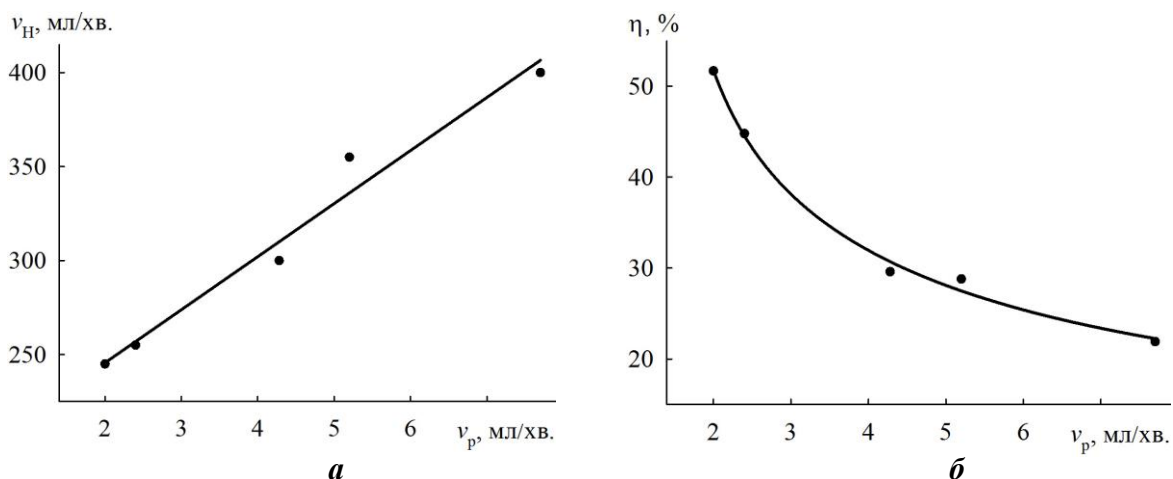


Рис. 2 Залежності середньої швидкості виділення водню (*a*) та ступеня конверсії борогідриду натрію (*б*) від швидкості протікання через реактор 10 % розчину NaBH_4 , що містив також 5 % NaOH , при температурі 24 °С

Як видно з рисунка 2*a*, середня швидкість виділення водню була прямо пропорційна швидкості протікання лужного розчину NaBH_4 в дослідженому діапазоні її значень і досягала 400 мл/хв. при швидкості протікання 7.8 мл/хв., що є достатнім для стабільної роботи батареї воднево-повітряних паливних комірок потужністю 30 Вт. Ступінь конверсії борогідриду натрію (рис. 2*б*) знижувалась при збільшенні швидкості протікання розчину із-за зменшення тривалості контакту розчину з каталізатором.

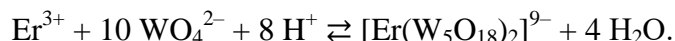
1. Abdelhamid H.N. A review on hydrogen generation from the hydrolysis of sodium borohydride // Int. J. Hydrogen Energy. – 2021. – Vol. 46, No. 1. – P. 726-765.
2. Куций А.В., Манілевич Ф.Д., Пірський Ю.К., Панчишин Т.М. Одержання водню шляхом гідролізу борогідриду натрію для живлення паливних комірок // IV Всеукр. наук. конф. “Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи” (29 квітня 2020 р.). Матеріали конференції. – Ж.: Видавець О.О. Євенок, 2020. – С. 145-147.

СИНТЕЗ І КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА $\text{Na}_9[\text{Er}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 32\text{H}_2\text{O}$

Марійчак О.Ю., Радіо С.В., Розанцев Г.М.

Факультет хімії, біології і біотехнологій Донецького національного університету імені Василя Стуса, Вінниця, Україна, o.marijchak@donnu.edu.ua

Встановлено умови синтезу та виділено кристалічну сіль натрію гетерополідекавольфрамоербіату(III), $\text{Na}_9[\text{Er}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 32\text{H}_2\text{O}$, з підкисленого до $Z = v(\text{HNO}_3)/v(\text{Na}_2\text{WO}_4) = 0,80$ водного розчину натрію вольфрамату зі співвідношенням $v(\text{Er}):v(\text{W})=1:10$ та додаванням пропанону-2. Для приготування розчину вихідні компоненти було взято в кількостях, які відповідають стехіометрії утворення гетерополіаніону $[\text{Er}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2]^{9-}$ в солі за реакцією:



Результати ІЧ- та КР-спектроскопічного аналізу показали приналежність аніону в її складі до гетерополіаніону зі структурою Пікока–Уіклі $[\text{Er}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2]^{9-}$. Методом рентгеноструктурного аналізу проведено розшифровку структури і встановлено кристалічні параметри одержаної солі: $a = 11.445(4) \text{ \AA}$, $b = 22.856(6) \text{ \AA}$, $c = 23.550(6) \text{ \AA}$, $\beta = 91.82(3)^\circ$, $V = 6157.0(3) \text{ \AA}^3$, $Z = 4$, моноклінна сингонія, пр.гр. Сс. Будову основної кристалографічної одиниці структури $\text{Na}_9[\text{Er}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 32\text{H}_2\text{O}$ показано на рисунку.

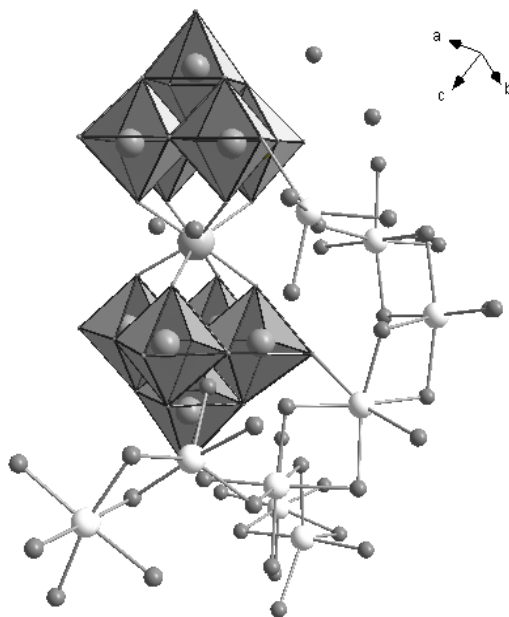


Рис. Кристалічна структура натрію гетерополідекавольфрамоербіату(III)

Гетерополіаніон $[\text{Er}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2]^{9-}$ знаходиться у сітці поліедрів, побудованій із тетрагональної піраміди NaO_5 та октаедрів NaO_6 . У порожнинах структури знаходяться некоординовані молекули H_2O , які утримуються за рахунок водневого зв'язку. Будову солі порівняно з описаною $\text{Nd}(\text{III})$ -вмісною сіллю такого самого гідратного складу $\text{Na}_9[\text{Nd}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 32\text{H}_2\text{O}$ (Baldoví J.J. et al. Inorg. Chem., 2014, pp. 9976–9980). Незважаючи на однаковий гідратний склад, встановлено різницю в сингоніях, у яких кристалізуються солі, та будові катіонної підґратки в структурах солей. Так, на відміну від солі з $\text{Er}(\text{III})$ -гетероатомом, сіль $\text{Na}_9[\text{Nd}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 32\text{H}_2\text{O}$ кристалізується в триклінній сингонії, пр. гр. $P-1$, а катіонна підґратка побудована з поліедрів NaO_6 та NaO_7 .

Роботу виконано в рамках конкурсної тематики Міністерства освіти і науки України (фундаментальна НДР № 0119U100025).

СИНТЕЗ ТА СОРБЦІЙНІ ВЛАСТИВОСТІ КОМПОЗИТУ НА ОСНОВІ СИЛІКАГЕЛЮ З АДСОРБОВАНИМ ПОЛІ[8-ОКСИХІНОЛІНМЕТАКРИЛАТОМ]

Мельничук А.М.¹, Кичкирук О.Ю.¹, Яновська Е.С.², Савченко І.О.², Стерник Д.³

¹Житомирський державний університет імені Івана Франка, nastya_melnychuk@ukr.net

²Київський національний університет імені Тараса Шевченка

³Університет Марії Кюрі-Склодовської

8-оксихінолін – один з найвідоміших хелатуючих агентів, металокомплекси за участі якого відомі ще з ХІХ століття. Модифікація поверхні пористих неорганічних матеріалів оксихіноліновмісними полімерами дозволяє отримати сорбенти для видалення йонів токсичних металів із стічних вод за рахунок їх комплексоутворення з атомами нітрогену та кисню іммобілізованого полімеру.

Дана робота направлена на синтез та дослідження композиту, одержаного шляхом адсорбції полі[8-оксихінолінметакрилату] на поверхні силікагелю за наступною методикою: певну наважку полімеру вносили у плоскодонну колбу об'ємом 250 мл і розчиняли у тетрагідрофурані (ТГФ). Потім до утвореного розчину додавали наважку силікагелю, нагрівали при температурі 60°C та інтенсивно перемішували на магнітній мішалці протягом 5-ти годин в атмосфері аргону. Через добу синтезований композит відділяли декантацією на фільтр і висушували при кімнатній температурі протягом декількох діб до сталої маси.

Дослідження будови синтезованого композиту та структури поверхні проводили фізичними методами, зокрема ІЧ-спектроскопії, термогравіметричного аналізу, диференціальної скануючої калориметрії, скануючої електронної мікроскопії, ВЕТ (низькотемпературної адсорбції-десорбції азоту).

Було встановлено, що у результаті закріплення полімеру пористість поверхні силікагелю знижується значним чином (питома площа поверхні зменшується з 447 до 21,1 м²/г). При цьому середній об'єм пор зменшується з 0,686 до 0,072 см³/г, а середній діаметр пор зростає з 5,92 до 12,9 нм. Поверхня суттєво вкрита полімером. Полімер знаходиться на поверхні силікагелю у вигляді агломератів, які вкривають велику площу силікагелю. Масова частка іммобілізованого полімеру становить 43,5%.

Сорбційні властивості синтезованих композитів щодо йонів Cu(II), Cd(II), Pb(II) та Fe(III) досліджували в статичному режимі. Концентрації йонів у розчині визначали атомно-абсорбційним методом після доби контакту розчину з поверхнею адсорбенту.

В конічні колби вносили по 0,1 г сорбенту і по 25 мл водних розчинів нітратів катіонів металів в діапазоні концентрацій 4-50 мг/л. Розчини перемішували і залишали на добу. Фільтрували розчини і визначали концентрацію йонів до і після адсорбції. Ступінь сорбції та ємність сорбенту розраховували за відповідними формулами.

Найкращу сорбційну здатність модифікований силікагель проявляє по відношенню до йонів Cu(II), найгіршу - до йонів Pb(II). Слід відмітити, що сорбційна ємність синтезованого композиту майже в 10 разів перевищує ємність немодифікованого силікагелю щодо усіх досліджуваних катіонів.

КОРОЗІЙНІ ПРОЦЕСИ І МЕТОДИ ЗАХИСТУ МЕТАЛІВ ВІД КОРОЗІЇ

Мудрак В.В., Чумак В.В.

Житомирський державний університет імені Івана Франка, yikamudrak25@gmail.com

Корозія металів призводить до величезних збитків у всіх галузях виробництва, а її продукти забруднюють довкілля та негативно впливають на здоров'я людей. Саме тому необхідний надійний захист металів і металевих конструкцій від корозійних процесів.

За механізмом протікання корозійного процесу розрізняють два типи корозії: хімічну корозію та електрохімічну корозію [1].

В залежності від виду корозійного руйнування прийнято підрозділяти корозію на загальну (суцільну) та місцеву корозію. Якщо корозія поширюється на всю поверхню металу - загальна корозія. Вона може бути рівномірною або нерівномірною залежно від того, чи є однаковою глибина корозійного руйнування на всіх ділянках металевої поверхні. Якщо корозійне руйнування переважно локалізоване у деяких окремих ділянках, а решта поверхні лишається майже не ушкодженою корозією, то такий вид руйнування називають місцевою корозією [2]. Місцева корозія буває різних типів. При корозії плямами ушкодження на окремих ділянках поширюється порівняно неглибоко та займає відносно великі ділянки поверхні. Корозія виразками - серйозне та глибоке ушкодження локалізоване на обмежених майданчиках. При точковій корозії (пітінг) ушкодження локалізоване в окремих точках, які можуть переростати в наскрізні отвори. Підповерхнева корозія - метал руйнується переважно під поверхнею, а продукти корозії виявляються зосередженими всередині металу.

Міжкристалітна корозія – це руйнування металу по межах кристалітів (зерен) з втратою його механічної міцності. Транскристалітна корозія характеризується руйнуванням металу крізь тіло зерен кристалітів [1].

Серед основних методів боротьби з корозією сьогодні можна відзначити наступні [1]:

- використання гальванічних антикорозійних покриттів (хром, нікель, цинк, олово, алюміній, кадмій);
- введення до складу металу Al, Cr, Be, Mg, або наносять на його поверхню шар Al (алітування);
- обробка корозійного середовища - видалення O_2 з розчинів та застосування інгібіторів корозії. Інгібіторами виступають органічні (альдегіди, полікарбонати, аміни, оксихіноліни, оксипіридини, талові кислоти тощо) та неорганічні речовини (фосфати, поліфосфати, борати, силікати, нітрити, арсеніти, хромати, дихромати);
- хімічний захист – метали обробляються хімічними реактивами, які сприяють утворенню захисної плівки (пасивують);
- електрохімічний захист – відбувається завдяки катодній та анодній поляризації, приєднання протекторів, які гальмують корозію;
- використання неметалічних покриттів, таких як оксидні та фосфатні плівки, неорганічні емалі, кераміка, пластик, каучук, бітум, поліуретан;
- жаростійке легування – введення до складу сплавів компонентів, які підвищують їх жаростійкість. До таких компонентів в основному відносять хром, алюміній, кремній;
- використання захисних або контрольованих атмосфер, тобто розміщення виробів у штучно створених газових середовищах; цей метод захисту застосовують найчастіше при проведенні спеціальних технологічних процесів (наприклад, при термічній чи хіміко-термічній обробці матеріалів);
- зменшення окислення металів, чого досягають різними методами (застосування тимчасових покриттів та обмазок, прискорення нагрівання та охолодження, полегшення утворення на металі захисних плівок, індукційне нагрівання).

1. Стоєв П.І., Литовченко С.В., Гірка І.О., Грицина В.Т. Хімічна корозія та захист металів: навчальний посібник. – Х.: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2019. – 216 с.

2. Большаніна С.Б. Корозія металів та захист від неї: конспект лекцій – Суми: Сумський державний університет, 2012. – 53с.

ВПЛИВ КАТІОННОЇ ПІДГРАТКИ НА ПАРАМЕТРИ БУДОВИ ІЗОПОЛІВОЛЬФРАМАТ-АНІОНУ ЗІ СТРУКТУРОЮ ЛІНДКВІСТА

Олексій Ю.А., Русіч А.В., Міщенко А.О., Марійчак О.Ю., Радіо С.В.

Факультет хімії, біології і біотехнологій Донецького національного університету імені
Василя Стуса, Вінниця, Україна, oleksii.i@donnu.edu.ua

Ізополіаніони – багатозарядні аніони оксокислот d-металів загальної формули $[M_xO_{x+k}]^{n-}$, найпростіші з яких $[M_7O_{24}]^{6-}$ ($M = W, Mo$), $[M_6O_{19}]^{2-}$ ($M = Mo, W$). Їхню структуру складає решітка з атомів металу, з'єднаних містковими атомами Оксигену, в якій відсутні зв'язки метал–метал. Гексавольфрамат-аніон зі структурою Ліндквіста (Lindqvist), $[W_6O_{19}]^{2-}$, побудований із октаедрів WO_6 , з'єднаних чотирма спільними ребрами (рис.).

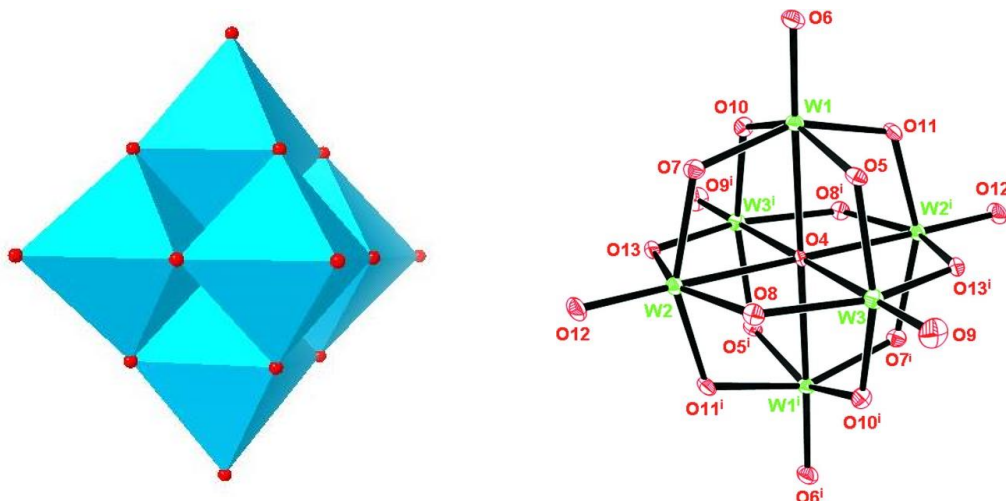


Рис. Будова аніону $[W_6O_{19}]^{2-}$: ліворуч – поліедричне зображення, праворуч – шаро-стрижневе зображення

В аніоні $[W_6O_{19}]^{2-}$ можна виділити три типи зв'язків $W-O$: кінцеві зв'язки $W=O_t$ ($O_t = O_6, O_9, O_{12}$), місткові зв'язки $W-O_b$ ($O_b = O_5, O_7, O_8, O_{10}, O_{11}, O_{13}$), та зв'язки $W-O_c$ із шестикоординуваним атомом Оксигену ($O_c = O_4$).

У роботі проведено аналіз кристалічної будови ізополівольфраматів з аніоном $[W_6O_{19}]^{2-}$ та різним катіонним складом і наявною або відсутньою гідратною (сольватною) оболонкою за опублікованими в літературі структурними даними для сполук: $[Cu(C_{12}H_8N_2)_2]_2[W_6O_{19}]$, $CrFeCr-CH_2-Py_{12}[W_6O_{19}]$ ($Cr = C_5H_5, Py = C_5H_5N$), $[(n-Bu_4N)_2][W_6O_{19}]$, $[Cu(L_2)(Cl)]_2[W_6O_{19}]$ ($L_2 = 4,6$ -di(pyridine-2-yl)- N -(4,6-di(pyrimidin-2-yl)pyrimidin-2-yl)pyrimidin-2-amine), $[n-Bu_4N]_4[Ag_2I_4][W_6O_{19}]$, $(C_{24}H_{20}P)_2[W_6O_{19}] \cdot 2CD_3CN$, $[C_6S_4H_4]_4[W_6O_{19}] \cdot 0.5CH_3CN$, $[Cu(cyclen)(CH_3CN)][W_6O_{19}]$, $[Co_2(C_2O_4)(C_{10}H_8N_2)_4][W_6O_{19}]$, $(BPDT-TTF)_2[W_6O_{19}]$ ($BPDT-TTF = bis(bis(propylenedithio)tetrathiafulvalenium)$), $[(H_3O)[Cu_2Cl(C_{12}H_8N_2)_4][W_6O_{19}] \cdot H_2O$, $[Co^{III}(L)(NCS)_2]_2[W_6O_{19}] \cdot 2CN_3CN$ ($L = 5,7,7,12,14,14$ -hexamethyl-1,4,8,11-tetraazacyclotetradeca-4,11-diene), $[M(C_2H_6OS)_6][W_6O_{19}]$ ($M = Co, Mn, Cu$).

З'ясовано, що: довжини кінцевих зв'язків $W=O_t$ знаходяться в межах 1,688–1,733 Å, місткових зв'язків $W-O_b$ – в межах 1,895–1,949 Å, зв'язків із центральним Оксигеном $W-O_c$ – в межах 2,316–2,339 Å; теоретично прямі кути $O-W-O$ знаходяться в межах 75,4–106,2 градусів, а теоретично розгорнуті – в межах 151,3–180 градусів (що вказує на значні викривлення в октаедрах WO_6).

Встановлено відсутність впливу характеру кристалічної упаковки, складу й будови катіонної підґратки, наявності сольватної оболонки на довжини зв'язків $W-O$ та валентних кутів $O-W-O$.

Роботу виконано за підтримки Міністерства освіти і науки України (проект № 0119U100025).

КВАНТОВО-ХІМІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ МЕХАНІЗМІВ АКТИВАЦІЇ АЛКАНІВ ПО ЗВ'ЯЗКУ С–Н СІРЧАНОЮ КИСЛОТОЮ

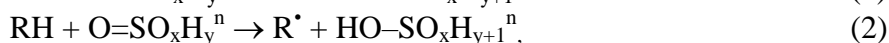
Опейда Л. І.¹, Волкова Л. К.², Пастернак О. М.³

¹*Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії і вуглекімії
ім. Л. М. Литвиненка НАН України, li.opeida@gmail.com*

²*Інститут фізико-органічної хімії і вуглекімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України,
volkovalk@gmail.com*

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

Актуальність дослідження функціоналізації зв'язків С–Н окисниками в умовах каталізу іонами металів перехідних елементів у розчинах концентрованої сірчаної кислоти зростає у зв'язку з розробкою методів одержання цінних кисневмісних продуктів з вуглеводневої сировини. Разом з тим експериментально показано, що сама сірчана кислота не відіграє роль суто розчинника, а може бути окисником алканів і циклоалканів. Кислотність середовища впливає на перебіг таких реакцій, що пояснюється впливом протонування на реактивність утворюваних з молекул сірчаної кислоти активних хімічних частинок. Запропоновано два можливих механізми активації алканів по зв'язку С–Н частинками, які утворились з сірчаної кислоти, що передбачають відрив гідрид-іона H^- з утворенням карбокатиону R^+ , **гетеролітичний** (1), та відрив Н-атома з утворенням радикалу R^\bullet , **гомолітичний** (2):



де величини x , y та n , загальний заряд частинки, залежать від ступеня її протонування.

Мета роботи – з'ясування впливу протонування частинок окисника на їх реактивність.

Оскільки експериментально виміряти константи швидкості реакцій окремих частинок складно, тож для аналізу вигідності перебігу реакцій за механізмами (1) чи (2) були використані термодинамічні характеристики, зміни ентальпій реакцій (ΔH), які добре корелюють з кінетичними параметрами взаємодії частинок окисника із зв'язками С–Н вуглеводнів. Величини були обчислені з використанням напівемпіричного PM7 (пакет MOPAC2016) [1] та неемпіричного DFT B3LYP/6-311G(d,p) методів квантової хімії.

Методом PM7 оцінено величини стандартних ентальпій утворення ΔH_{298}^0 , а методом DFT – сумарні електронні та термічні ентальпії (Sum of electronic and thermal Enthalpies) реагентів і можливих продуктів реакцій 2,3-диметилбутану по третинному (*трет.*) зв'язку із сірчаною кислотою (табл.1).

Таблиця 1

Порівняння ΔH_{298}^0 , розрахованих методом PM7, та H_{sum} , AU – методом DFT, для реагентів і продуктів у реакціях 2,3-диметилбутану по *трет.*-С–Н із сірчаною кислотою

№	Частинка	ΔH_{298}^0 *	H_{sum} , AU**	№	Частинка	ΔH_{298}^0 *	H_{sum} , AU**
1	C_6H_{14}	-38	-236,953731	12	$H_2SO_2^+$	114	-549,498299
2	$C_6H_{14}^-$	17	-236,864879	13	HSO_3^+	92	-624,058357
3	$C_6H_{14}^+$	173	-236,614948	14	H_2SO_3	-133	-625,065694
4	C_6H_{13}	-16	-236,307870	15	$H_2SO_3^+$	71	-624,683308
5	$C_6H_{13}^-$	-4	-236,291076	16	$H_3SO_3^+$	34	-625,349037
6	$C_6H_{13}^+$	152	-236,067354	17	H_2SO_4	-178	-700,283464
7	HSO_2^+	117	-548,893952	18	$H_2SO_4^+$	71	-699,867282
8	H_3SO_4	-125	-700,819448	19	SO_2^+	147	-548,197489
9	$H_3SO_4^+$	1	-700,554143	20	HSO_3	-107	-624,422313
10	H_4SO_4	-184	-701,449813	21	HSO_2	-63	-549,226144
11	$H_4SO_4^+$	-5	-701,117654	* У ккал·моль ⁻¹ ** У Гартрі·частинка ⁻¹			

Ці результати були застосовані для обчислення зміни ентальпії (ΔH) досліджуваних реакцій (табл. 2). В якості активних частинок використані: сама молекула H_2SO_4 , частинки $H_3SO_4^+$ і SO_3H^+ , які утворюються шляхом її протонування і наступної дегідратації в типових реакціях:



Таблиця 2

Порівняння величин зміни ентальпії ΔH у реакціях 2,3-диметилбутану з гомо- та гетеролітичним розривом *трет.* зв'язку C–H, розрахованих методами DFT та PM7

Реакції 2,3-диметилбутану по <i>трет.</i> -C–H		ΔH в ккал·моль ⁻¹	
№	відрив атома H	DFT	PM7
1	$H_2SO_4 + C_6H_{14} \rightarrow H_3SO_4 + C_6H_{13}$	69	75
2	$H_3SO_4^+ + C_6H_{14} \rightarrow H_4SO_4^+ + C_6H_{13}$	51	16
3	$HSO_3^+ + C_6H_{14} \rightarrow H_2SO_3^+ + C_6H_{13}$	13	1
відрив гідрид-іона H ⁻			
4	$H_2SO_4 + C_6H_{14} \rightarrow H_3SO_4^- + C_6H_{13}^+$	–	5
5	$H_3SO_4^+ + C_6H_{14} \rightarrow H_4SO_4 + C_6H_{13}^+$	–6	–9
6	$HSO_3^+ + C_6H_{14} \rightarrow H_2SO_3 + C_6H_{13}^+$	–75	–20

Як видно з табл. 2, для взаємодії алкану з хімічними частинками H_2SO_4 , $H_3SO_4^+$, HSO_3^+ , розраховані величини ΔH реакцій, що протікають за гомолітичним механізмом (1), є вищими, ніж ΔH для відповідних гетеролітичних реакцій (2). Порівняння величин зміни ентальпії свідчить про те, що, як в механізмі (1) так і (2), протонування H_2SO_4 збільшує реакційну здатність цієї молекули, реакції 1 та 2 і 4 та 5, а також найбільш активною є утворена при дегідратації (4) частинка HSO_3^+ , реакції 3 і 6, при цьому відрив гідрид-іона H⁻ з утворенням карбокатиону R⁺ є значно вигіднішим, ніж відрив атома H з утворенням радикала R[•]. Найбільш вигідним із розглянутих 6-и процесів є гетероліз *трет.*-C–H зв'язку частинкою HSO_3^+ (реакція 6). Дані табл. 2 узгоджуються з гіпотезою [2-3] про те, що для сірчаної кислоти активною частинкою є SO_3H^+ , яка відриває H⁻ від *трет.*-C–H з утворенням *трет.* карбокатиону R⁺. Слід відмітити, що результати попередньо виконаних обчислень з використанням моделі COSMO, де враховано вплив середовища, демонструють такі ж якісні закономірності, як і результати, отримані методом DFT.

ВИСНОВКИ. Якісні закономірності зміни ентальпій у ряду досліджуваних реакцій, отримані напівемпіричним PM7 та неемпіричним DFT методами, залишаються однаковими. Результати показали очікуваний ефект для механізму (1) – протонування збільшує реакційну здатність окисника, та такий же ефект для механізму (2), де реакція йде з відривом нейтрального атома H, що було менш очікувано і, на нашу думку, особливо цікаво. Дегідратація протонованої частинки в обох випадках ще підвищує реакційну здатність частинки-окисника в цих реакціях.

Результати квантово-хімічних розрахунків для реакцій частинок, що утворились із сірчаної кислоти, показують значну перевагу реакцій переносу гідрид-іона від *трет.*-C–H над реакціями, що протікають через гомоліз *трет.* зв'язку C–H.

1. Пастернак О. М., Опейда Л. І., Семиволос Д. С., Волкова Л. К. Квантово-хімічне дослідження окисної функціоналізації зв'язків C–H алканів сірчаною кислотою // Фізико-органічна хімія, фармакологія та фармацевтична технологія біологічно активних речовин. Збірник наукових праць – 2019. – вип. 2 – С. 95-105.

2. Рудаков Е. С. Реакции алканов с окислителями, металлокомплексами и радикалами в растворах. – Киев: Наук. думка, 1985. – 248 с.

3. Волкова Л. К., Опейда И. А. Влияние кислотности среды на скорость реакций окислительной функционализации углеводов в сернокислотных растворах // Кинетика и катализ. – 2020. – 61, № 4. – С. 509-519.

МАРФАЛОГІЯ ДЫСПЕРСІІ МЕДЗІ З МАЛЕІНАВАЙ КІСЛАТОЙ

Осокин Я.С., Палонскі У.А., Варгалюк В.Ф.

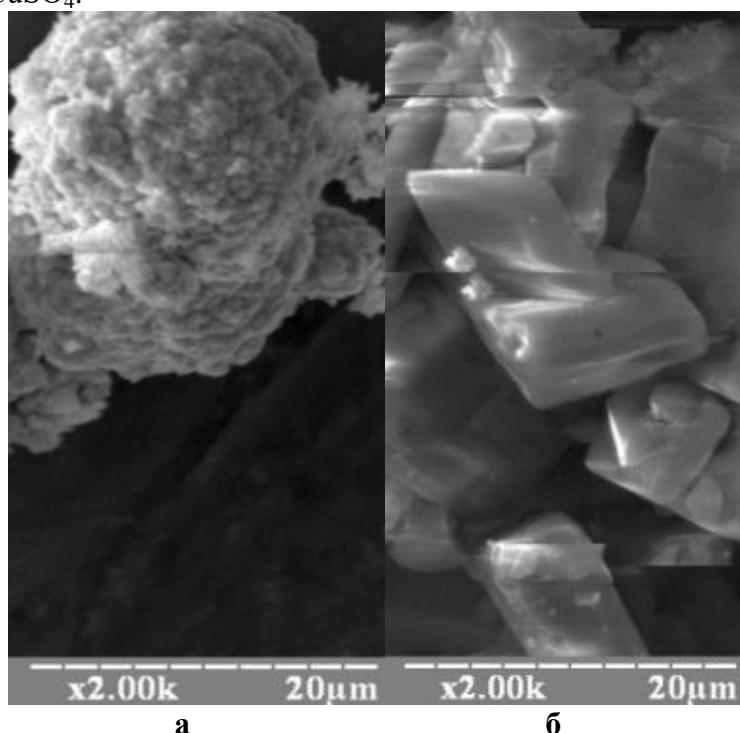
Дняпроўскі нацыянальны ўніверсітэт ім. Олеса Гончара, osokin@cf.dnu.dp.ua

Для вырашэння розных тэхналагічных задач усё часцей выкарыстоўваюцца мікрадысперсныя металічныя парашкі і матэрыялы на іх аснове. Адным з напрамкаў выкарыстання металічных дысперсій з'яўляецца вытворчасць кампазітных матэрыялаў з высокаразвітай паверхняй. Сярод такіх кампазітных матэрыялаў варта вылучаць медзь у мікрадысперсным стане, бо яна выкарыстоўваецца ў медыцыне ў якасці бактэрыцыдных прэпаратаў [1, 2]. Праведзеныя мікрабіялагічныя даследаванні [3] пацвердзілі наяўнасць бактэрыцыднай актыўнасці ў парашках медзі, мадыфікаваных акрылавай кіслатай, і яна апынулася значна вышэйшай, чым у чыстага парашка медзі.

Мэтай дадзенай працы было атрыманне і вывучэнне структуры [4] мікрапорошкаў медзі, мадыфікаваных малеінавай кіслатай.

Сінтэз мікрапорошкаў медзі ажыццяўляўся з выкарыстаннем хімічнага аднаўлення іёнаў Cu^{2+} з раствора меднага купарваса з парашком цынку ў адсутнасці і ў прысутнасці малеінавай кіслаты (у эквівалентнай колькасці). Марфалогія атрыманых мікрадысперсій была даследавана шляхам сканіруючай электроннай мікраскапіі з выкарыстаннем мікраскопа РЭМ-1061.

Парашок, атрыманы ў прысутнасці малеінавай кіслаты, адрозніваўся па колеры і ступені дысперсіі ад меднага парашка, атрыманага з чыстага раствора сульфату медзі. Дысперсія, выдзеленая ў прысутнасці малеінавай кіслаты, мела жоўта-зялёны колер, а яе аб'ём у 2-3 разы перавышаў аб'ём парашка медзі, атрыманага з раствора толькі сульфату медзі. Гэта сведчыла аб нізкай шчыльнасці металарганічнага парашка і, відавочна, аб яго неметалічным складзе. На мал. 1а прадстаўлены мікрафатаграфіі парашка медзі, атрыманага з чыстага раствора CuSO_4 .



Мал. 1 Структура медных парашкоў, атрыманых хімічным спосабам з чыстага раствора CuSO_4 (а) і ў прысутнасці малеінавай кіслаты (б)

Як бачна, у асадаку адсутнічае крышталічнасць; ён складаецца з круглявых часціц памерам 10-20 мкм, у якіх пры вялікім павелічэнні праглядаюцца шчыльна агрэгаваныя фрагменты дыяметрам каля 1 мкм. Дысперсія, атрыманая ў прысутнасці малеінавай кіслаты,

складається з ромбічних кристалічних часціц памерам каля 10-20 мкм, а таксама з больш дробных утварэнняў, форму якіх цяжка вызначыць (мал. 1б). Мікрафатаграфіі гэтага парашка дэманструюць дэфекты малюнка, якія выкліканы рухам найменшых часціц парашка падчас сканавання электронным пучком. Гэта абумоўлена узаемным адштурхваннем часціц у працэсе здымкі па прычыне назапашвання на іх аднайменнага адмоўнага зарада, які не сцякае на падкладку. Гэты эфект узнікае, калі аб'ект даследавання валодае дыэлектрычнымі ўласцівасцямі і служыць пацверджаннем наяўнасці ў складзе парашка неметалічных кампанентаў.

1. Silva F.S., Cinca N. [at al.] Corrosion resistance and antibacterial properties of copper coating deposited by cold gas spray // *Surface & Coatings Technology*. – 2019. – Vol. 361. – P. 292–301.

2. Phan D., Dorjjugder N. Antibacterial mechanisms of various copper species incorporated in polymeric nanofibers against bacteria // *Materials Today Communications*. – 2020. – Vol. 25. – P. 1–27.

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

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

ВПЛИВ СКЛАДУ ТРАВНИКІВ $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ – НВР НА ПРОЦЕС ХІМІЧНОГО РОЗЧИНЕННЯ $\text{Cd}_{0,2}\text{Hg}_{0,8}\text{Te}$

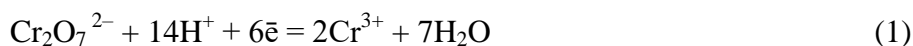
Павленко В.О.¹, Чайка М.В.¹, Денисюк Р.О.¹, Томашик В.М.²

Житомирський державний університет імені Івана Франка, pavlenkovictor484@gmail.com

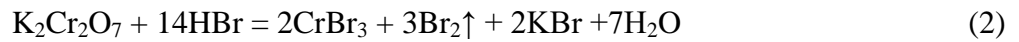
Фізико-хімічна взаємодія активних компонентів травника з поверхнею напівпровідникових кристалів має окисно-відновний характер, на який впливають: швидкість хімічного травлення, кристалічна досконалість поверхні, її фізико-хімічна чистота, рН травника, температура, швидкість перемішування розчину, час взаємодії, обладнання тощо [1].

Для хімічної обробки напівпровідників часто використовують галогенвиділяючі розчини, які містять дихромат-йони і бромідну або хлоридну кислоти та володіють невисокими швидкостями розчинення поверхні напівпровідників. Причому, залежно від складу, травильні композиції на основі сполук шестивалентного хрому у розчинах галогенідних кислот можуть виявляти полірувальний, селективний або неселективний характер травлення [2].

Калій дихромат – досить сильний окисник, адже стандартний окисно-відновний потенціал процесу:



становить 1,33 В. У кислому середовищі $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ окиснює поверхню напівпровідникових пластин, а бромідна кислота розчиняє продукти окиснення. В таких травильних композиціях можливе утворення Br_2 згідно з рівнянням реакції між компонентами травника:



Відомо, що травильні композиції, до складу яких входять дихромат-йони та HBr, характеризуються невисокими швидкостями розчинення напівпровідників типу A^{IV}B^{VI} при високій якості полірування поверхні [3].

Дослідження процесу травлення монокристалів Cd_{0,2}Hg_{0,8}Te водними розчинами K₂Cr₂O₇ – HBr проводили методом диску, що обертається в концентраційному інтервалі 5-60 об.% насиченого водного розчину K₂Cr₂O₇ в HBr при T = 295 K та швидкості обертання диску $\gamma = 82 \text{ хв}^{-1}$. Варто відзначити, що активним компонентом травника є Br₂, що утворюється згідно з реакцією 2.

В інтервалі концентрацій 5-20 об. % K₂Cr₂O₇ в HBr поверхня напівпровідника місцями вкрита світло-сірою плівкою, а при зростанні в розчині концентрації окисника в межах 30-50 об. % K₂Cr₂O₇ в HBr, що відповідає за розрахунком розчинам із вмістом 7,8-33 об.% Br₂ в HBr, формуються полірувальні розчини, поверхня протравлених монокристалів в яких полірована і має дзеркальний блиск. Так як утворений бром розчиняється в надлишку бромідної кислоти, то рН травильного розчину є кислим, що сприяє переведенню в розчин катіонів Cd²⁺, Cr³⁺ та формуванню полірованої поверхні. При збільшенні об'ємного вмісту K₂Cr₂O₇ в травнику від 5 до 50 об. % відбувається збільшення швидкості ХДП досліджуваного зразка в межах: 1,1-7 мкм/хв для Cd_{0,2}Hg_{0,8}Te [3].

Подальше збільшення вмісту K₂Cr₂O₇ у травильних сумішах сприяє зменшенню швидкості розчинення до 7 мкм/хв. для Cd_{0,2}Hg_{0,8}Te причому якість поверхні значно погіршується. Якщо збільшувати концентрацію окисника і надалі, то це призводить до суттєвого зменшення швидкості травлення – до 1,5- 2,5 мкм/хв, а поверхня кристалів стає матовою з утворенням темно-сірого нальоту. Очевидно, це пов'язано із припиненням виділення Br₂ (в розчині складу 59 об. % K₂Cr₂O₇ в HBr) і забрудненням поверхні малорозчинними продуктами взаємодії складових компонентів травника та непрореагованим дихроматом калію [3]. Травильні композиції такого складу втрачають кислотність в ході реакції, що призводить лише до утворення вільного броду. Продукти взаємодії при рН близькому до нейтрального піддаються процесу гідролізу, що в свою чергу погіршує їх розчинність, як наслідок поверхня напівпровідника вкривається важкорозчинними сполуками. Такий ефект і спостерігається практично.

Таким чином виявлено, що розчини системи K₂Cr₂O₇ – HBr мають значно кращі полірувальні властивості порівняно з розчинами K₂Cr₂O₇ – HCl. Встановлено, що суміші із вмістом (30-50 об. %) K₂Cr₂O₇ в HBr з невеликими (4,5-9 мкм/хв) швидкостями розчинення є найбільш перспективними для розробки на їх основі повільних полірувальних травників для монокристалів Cd_{0,2}Hg_{0,8}Te. Визначено, що підвищення рН розчину спричиняє погіршення якості поверхні напівпровідника який обробляється.

1. Воротынцев В. М. Базовые технологии микро- и нанoeлектроники : учеб. пособие / В.М. Воротынцев, В. Д. Скупов. – М. : Проспект, 2017. – 519 с.
2. Павлов П. В. Физика твердого тела / П. В. Павлов, А. Ф. Хохлов. – М. : Высш. шк., 2000. – 493 с.
3. Чайка М.В. Фізико-хімічна взаємодія монокристалів CdTe та твердих розчинів Zn_xCd_{1-x}Te і Cd_xHg_{1-x}Te з травильними композиціями K₂Cr₂O₇ – мінеральна кислота-розчинник, 2019.-122с, 135с.

КІНЕТИКА СОРБЦІЇ СПОЛУК УРАНУ (VI) ВОЛОКНИСТИМ АНІОНІТОМ ФІБАН А-6, МОДИФІКОВАНИМ SnO₂

Перлова О. В.¹, Дзязько Ю. С.², Долинюк К. М.¹, Пальчик О. В.², Полікарпов А. П.³

¹Одеський національний університет імені і. І. Мечникова, olga_perlova@onu.edu.ua

²Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В. І. Вернадського НАН України

³Інститут фізико-органічної хімії НАН Білорусі

Уран належить до рідкісних і розсіяних елементів, який неминує потрапляє до джерел питного водопостачання. Його основними джерелами є води шахт видобутку урану, стічні води гірничо-збагачувальних комбінатів, де відбувається переробка уранвмісних руд. Багато з існуючих методів очистки призводять до суттєвого вторинного забруднення води, крім того, більшість з них досить коштовні. Тому розробка методів очищення води від домішок урану із застосуванням високоефективних та доступних матеріалів є актуальним завданням. Сорбція відноситься до найбільш поширених методів видалення сполук урану з води. Важливою є розробка сорбентів, які поряд з високою ємністю та селективністю характеризуються швидким перебігом сорбції. До таких сорбентів відносяться волокнисті іоніти ФІБАН [1]. Швидкість сорбції на таких матеріалах є вищою порівняно з іонообмінними смолами [2] і, особливо, з неорганічними іонітами [3], Варто очікувати, що композиту на основі цих волокон будуть притаманні не тільки значна швидкість сорбції, але й підвищена селективність до сполук U(VI). Мета роботи - виявлення закономірностей сорбції U(VI)-вмісних аніонів з карбонатних розчинів аніонітом ФІБАН А-6, модифікованим наночастинками SnO₂. Морфологію іонітів вивчено за допомогою ТЕМ та СЕМ, хімічний склад встановлено з використанням рентгенфлуоресцентної спектроскопії, функціональні групи ідентифіковано методом ІЧ спектроскопії, а їх кислотність – потенціометричним титруванням.

Сорбатами слугували аніонні комплекси уранілу складу [UO₂(CO₃)₂]²⁻ і [UO₂(CO₃)₃]⁴⁻, що знаходились в модельних карбонатних розчинах, які містили 0,0001 моль/л урану та 0,02 моль/л NaHCO₃ (рН 8). Сорбція урану (VI) відбувалася в статичному режимі при 20 ± 2°С. Концентрацію U(VI) після сорбції визначали фотометричним методом за допомогою розчину арсеназо III при довжині хвилі 670 нм.

Встановлено, що за допомогою композиту карбонатні комплекси уранілу можуть бути вилучені з модельних розчинів практично повністю (на 99,5%) протягом 10 хв при дозуванні сорбенту 2 г/л. Детально вивчено швидкість сорбції сполук U(VI). Для визначення внеску дифузійних процесів у загальну швидкість сорбції здійснено моделювання кінетики сорбції за допомогою моделі Вебера-Моріса:

$$A_t = K_d \cdot \sqrt{t} + C \quad (1)$$

де A_t - кількість сорбованої речовини в момент часу t ; K_d - константа швидкості внутрішньої дифузії; C - відрізок, що відтинається прямою на осі ординат (пропорційний товщині плівки, що оточує волокна сорбенту). Встановлено, що сорбція відбувається за змішаної дифузійним механізмом. Збільшення дозування аніоніту від 0,5 до 4,0 г/л призводить до зменшення константи швидкості як зовнішньої, так і внутрішньої дифузії урану. Для композиту значення констант зовнішньої і внутрішньої дифузії є меншими (відповідно, у 3-4 рази і приблизно на порядок) порівняно з полімерними волокнами. У випадку зовнішньої дифузії це обумовлено більшою товщиною гідродинамічно нерухої плівки на межі поділу фаз внаслідок більш рельєфної поверхні волокон композиту. Зменшення константи швидкості внутрішньої дифузії для композиту, вірогідно, зумовлено трансформацією пористої структури полімеру при інкорпоруванні неорганічних наночастинок.

Для встановлення впливу хемосорбції у загальну швидкість процесу були використані лінеаризовані форми моделей псевдо-першого:

$$\ln(A_p - A) = \ln A_p - k_1 \cdot t, \quad (2)$$

та псевдо-другого порядку:

$$\frac{t}{A} = \frac{1}{k_2 \cdot A_p^2} + \frac{t}{A_p} \quad (4)$$

а також моделі Єловича

$$A = \frac{1}{\beta} \ln(\alpha \cdot \beta) + \frac{1}{\beta} \ln t \quad (5)$$

де A_p – рівноважна сорбція (сорбційна ємність при рівновазі); k_1 і k_2 - константи швидкості псевдо-першого і псевдо-другого порядків; α - початкова швидкість сорбції; β - константа десорбції.

Розраховано константи використаних кінетичних моделей, середні відносні похибки (ARE), проведено графічне зіставлення експериментальних та модельних кінетичних кривих (табл.). Визначено, що швидкість сорбції U(VI) підпорядковується кінетичній моделі псевдо-другого порядку. Чисельні значення k_2 є близькими для модифікованого і немодифікованого сорбентів. На наш погляд, це свідчить про те, що хемосорбційна взаємодія в обох випадках здійснюється на однакових сорбційних центрах (аміногрупах волокнистого аніоніту ФІБАН А-6). Зрозуміло, що наночастинки SnO₂ не беруть участі у хемосорбційній взаємодії. Функція інкорпорованих до полімерної матриці наночастинок полягає в упорядкуванні її пористої структури.

Таблиця

Результати обробки експериментальних кінетичних кривих сорбції урану (VI) моделями псевдо-другого порядку та Єловича

q, г/л	Модель псевдо-другого порядку					Модель Єловича			
	$A_p, \text{ експ} \cdot 10^5$ моль/г	$A_p, \text{ розр.} \cdot 10^5$ моль/г	$k_2 \cdot 10^{-3}$, г/(моль ·хв)	R ²	ARE, %	$\beta \cdot 10^{-4}$, л/моль	$\alpha \cdot 10^5$, моль/(г ·хв)	R ²	ARE, %
0,5	7,8	8,7	5,75	0,9991	1,16	5,32	9,68	0,9900	1,58
1,5	5,0	5,4	5,38	0,9984	3,21	8,06	7,96	0,9924	6,64
2,0	3,8	4,7	15,02	0,9945	4,28	8,30	1,98	0,9894	1,44
4,0	2,5	2,6	52,29	0,9987	3,37	11,93	3,04	0,9984	0,50

Експериментальні кінетичні криві адекватно описуються моделлю Єловича, яка описує випадки гетерогенної хемосорбції та іонного обміну на неоднорідних твердих поверхнях. Константи швидкості моделі псевдо-другого порядку і константи десорбції збільшуються при зростанні витрати сорбенту. Це пов'язано, вочевидь, зі збільшенням кількості функціональних груп волокнистого аніоніту ФІБАН А-6, здатних до хемосорбційної та іонообмінної взаємодії з карбонатними комплексами уранілу.

Таким чином, стадія хімічної взаємодії сполук урану з поверхнею сорбенту істотно впливає на загальну швидкість процесу. Тим не менш, слід зазначити, що розділити внесок дифузії та хімічної стадії на підставі використання формальних кінетичних рівнянь практично неможливо. Скоріш за все, тут спостерігається сумарний ефект усіх стадій сорбційного процесу.

1. Sazonova V.F., Perlova O.V., Perlova N.A. et al Sorption of uranium (VI) compounds on fibrous anion exchanger surface from aqueous solutions // Colloid J. – 79, N 2. – P. 270-277.

2. Perlova O., Dzyazko Yu., Halutska I., Perlova N., Palchik A. Anion exchange resin modified with nanoparticles of hydrated zirconium dioxide for sorption of soluble U(VI) compounds // Springer Proc. Phys. – 2018. – 210. – P. 3-15.

3. Perlova O.V., Dzyazko Yu.S., Palchik A.V., Ivanova I.S., Perlova N.O., Danilov M.O., Rusetskii I.A., Kolbasov G.Ya., Dzyazko A.G. Composites based on zirconium dioxide and zirconium hydrophosphate containing graphene-like additions for removal of U (VI) compounds from water // Appl. Nanosci. – 2020. – 10, N 12. – P. 4591 – 4602.

ВИЗНАЧЕННЯ ЕНЕРГІЙ ГІББСА РЕАКЦІЙ УТВОРЕННЯ І ВЗАЄМНИХ ПЕРЕХОДІВ ІЗОПОЛІВОЛЬФРАМАТІВ В ВОДНО-ЕТИЛЕНГЛІКОЛЬНОМУ СЕРЕДОВИЩІ

Рисіч А.В.¹, Дуванова Е.С.¹, Радіо С.В.¹, Розанцев Г.М.¹

¹Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, rysich_a@donnu.edu.ua

Розробка перспективних і ефективних методик синтезу новітніх комплексних сполук, у першу чергу, передбачає встановлення оптимальних умов утворення цільових речовин з високим виходом продуктів реакції і мінімізацію утворення побічних продуктів. Передовим напрямком в галузі планування такого типу синтезу є математичне моделювання процесів за допомогою методів хімічної інформатики та пакетів спеціальних прикладних програм.

В області досліджень процесів комплексоутворення в підкислених водних і водно-органічних розчинах ізополівольфраматів (ІПВА) широко використовується метод моделювання за програмою CLINP 2.1, яка дозволяє розраховувати логарифми концентраційних констант утворення ($\lg K_C$) різних форм ІПВА, і шляхом підбору моделей рівноважних процесів їх утворення, передбачати умови необхідної для синтезу форми аніону. Однак даний метод не повністю відповідає вимогам щодо визначення параметрів термодинамічної стійкості частинки в розчині, а саме вільної енергії Гіббса утворення її з вихідних реагентів та енергій Гіббса реакцій переходів між формами ІПВА. Остання дозволяє точно визначити, в разі перекривання зон існування частинок на модельних кривих розрахованих в програмі CLINP 2.1, більш термодинамічно-ймовірний процес трансформації ІПВА між собою і передбачити напрямок реакцій.

У даній роботі, на підставі попереднього математичного моделювання процесів комплексоутворення, з наступною побудовою та аналізом графіків розподілу форм ІПВА і розрахунком $\lg K_C$ їх утворення в системах $\text{Na}_2\text{WO}_4 - \text{H}_2\text{O} - \text{HCl} - \text{NaCl} - \text{C}_2\text{H}_4(\text{OH})_2$ з об'ємним вмістом $\varphi(\text{C}_2\text{H}_4(\text{OH})_2) = 10 \div 50$ об. %, за іонної сили $I(\text{NaCl}) = 0,10 \div 0,50$ моль/л, при $C_M(\text{WO}_4^{2-}) = 5 \cdot 10^{-3}$, за методом Пітцера (програма Pitzer) були отримані значення логарифмів термодинамічних констант реакцій утворення ІПВА ($\lg K^0$) при значенні $I(\text{NaCl}) = 0,00$ моль/л. Отримані величини $\lg K^0$ були використані для розрахунків вільної енергії Гіббса утворення ІПВА з WO_4^{2-} і H^+ . На підставі отриманих значень ΔG^0 утворення були обчислені ΔG^0 реакцій переходів між формами ІПВА і запропоновані термодинамічно-обґрунтовані схеми реакцій утворення різних форм ІПВА в системах та їх взаємних переходів, які виявилися універсальними для всіх значень іонних сил і можуть використовуватися в їх синтезі в якості довідникових (рис.):

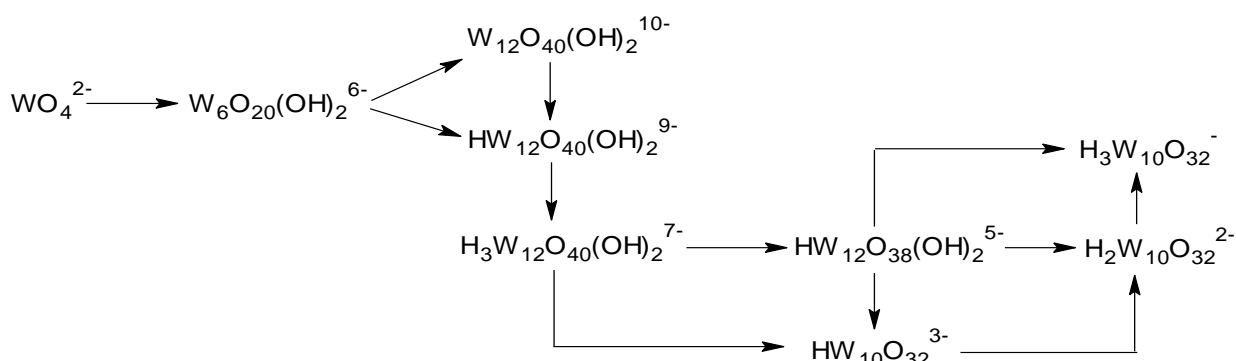


Рис. Схема перетворень ІПВА в водно-етиленглікольному розчині при $\varphi(\text{C}_2\text{H}_4(\text{OH})_2) = 10$ об. %

СИНТЕЗ ТА ЕЛЕКТРОКІНЕТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ

ЗАМІЩЕННЯ $\text{Er}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$

Стадник Ю.В.¹, Ромака Л.П.¹, Ромака В.В.², Горинь А.М.¹, Рокоманюк М.В.³

¹ Львівський національний університет імені Івана Франка, stadnykyu@gmail.com

² Institute for Solid State Research (Дрезден, Німеччина)

³ Національний університет «Львівська політехніка»

Одним із способів отримання термоелектричних матеріалів на основі фаз пів-Гейслера (структурний тип MgAgAs , просторова група $F\bar{4}3m$ [1]) з високою ефективністю перетворення теплової енергії в електричну є легування базових напівпровідників, зокрема, $n\text{-MnSn}$, $n\text{-MCoSb}$ та $n\text{-VFeSb}$ ($M=\text{Ti, Zr, Hf}$), домішковими атомами, що генерує структурні дефекти нейтральної, донорної і/або акцепторної природи. Новим класом напівпровідникових матеріалів діркового типу провідності є тверді розчини заміщення на основі фаз пів-Гейслера $p\text{-RNiSb}$ [2], де R – рідкісноземельний метал. Поєднання високих та додатних значень коефіцієнта термо-ерс α з високими, як для напівпровідників, значеннями електропровідності σ є відправною точкою для отримання термоелектричних матеріалів зі стабільними характеристиками у широкому температурному діапазоні.

Методом електродугового плавлення синтезовано зразки твердого розчину $\text{Er}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$ ($x=0\text{--}0.10$) та досліджено вплив легування атомами Sc на електрокінетичні та енергетичні характеристики фази пів-Гейслера ErNiSb за температур 80–400 К. Структурні дослідження твердого розчину $\text{Er}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$ показали зменшення значень періоду елементарної комірки $a(x)$, оскільки атомний радіус Sc ($r_{\text{Sc}}=0.164$ нм) менший від Er ($r_{\text{Er}}=0.176$ нм). Структурні дослідження $\text{Er}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$ методом порошку у силу малої концентрації домішкових атомів Sc не дозволили виявити неупорядкованість структури. Тому моделювання поведінки рівня Фермі ϵ_F та кінетичних характеристик проведено для упорядкованого варіанту його структури. Розрахунки DOS показали, що легування фази ErNiSb атомами Sc ($3d^14s^2$) зменшує ширину забороненої зони ϵ_g , а рівень Фермі ϵ_F рухається до середини забороненої зони. Температурні залежності питомого опору ρ та коефіцієнта термо-ерс α $\text{Er}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$ наведені на рис. 1. Залежності $\ln(\rho(1/T))$ $\text{Er}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$ містять високо- та низькотемпературні активаційні ділянки, що характерно для напівпровідників. Наявність на залежності $\ln(\rho(1/T))$ $p\text{-ErNiSb}$ активаційної ділянки за низьких температур з енергією активації $\epsilon_3^p=0.4$ меВ свідчить про компенсацію зразка, яку забезпечують акцептори та донори невідомого походження.

На збільшення концентрації дірок у $p\text{-Er}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$ за вмісту Sc $x=0\text{--}0.03$ вказує зменшення значень питомого опору $\rho(x,T)$ та коефіцієнта термо-ерс $\alpha(x,T)$. Додавання найменших концентрацій домішки Sc , наприклад, за $T=80$ К, приводить до зменшення значень $\rho(x,T)$ у ~ 4 рази та значень $\alpha(x,T)$: за $T=380$ К $\alpha_{x=0}=120.9$ мкВ/К і $\alpha_{x=0.03}=71.2$ мкВ/К.

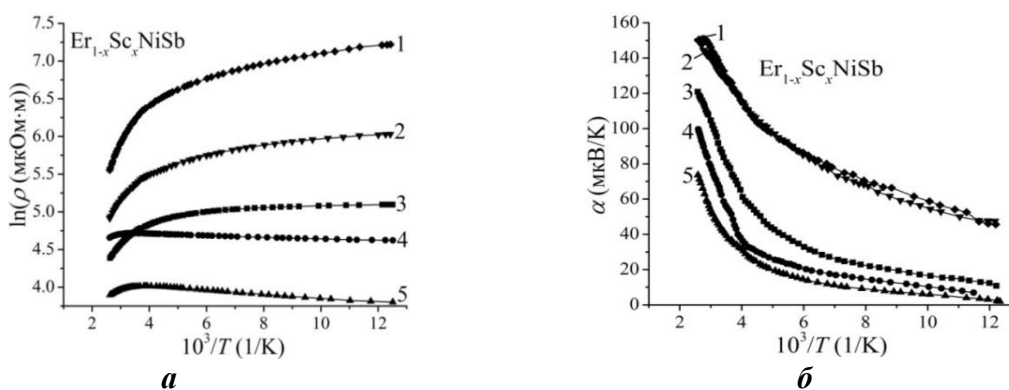


Рис. 1 Температурні залежності питомого електроопору $\ln(\rho(1/T))$ (а) та коефіцієнта термо-ерс $\alpha(1/T)$ (б) $\text{Er}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$: 1 – $x=0.10$, 2 – $x=0.05$, 3 – $x=0$, 4 – $x=0.01$, 5 – $x=0.03$

Поведінка залежностей питомого електроопору $\rho(x,T)$ та коефіцієнта термо-ерс $\alpha(x,T)$ у p - $\text{Er}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$, $x \geq 0.03$, також свідчить про появу у напівпровіднику донорів невідомого походження. Так, на ділянці концентрацій $\text{Er}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$, $x=0.03-0.10$, значення питомого електроопору $\rho(x,T)$ стрімко зростають, наприклад, за $T=80$ К від значень $\rho_{x=0.03}=44.8$ мкОм·м до $\rho_{x=0.10}=1367.8$ мкОм·м. Для напівпровідника p -типу провідності це можливо лише за умови зменшення концентрації основних носіїв струму, якими є вільні дірки, а також генерування донорів, які компенсують акцепторні стани. Даний висновок підтверджується також поведінкою коефіцієнта термо-ерс $\alpha(x,T)$ за концентрацій $x \geq 0.03$.

Для уточнення кристалічної структури $\text{Er}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$ проведено розрахунок DOS для різних варіантів просторового розташування атомів. Ми виходили з того, що адекватність результатів DOS та експериментальних досліджень передбачає, що модель його структури максимально наближена до реальної. Маючи експериментальні результати швидкості дрейфу рівня Фермі ε_F як енергії активації $\varepsilon_1^p(x)$ з рівня Фермі на рівень протікання валентної зони ε_V $\text{Er}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$, шукали ступінь компенсації напівпровідника (співвідношення структурних дефектів донорної та акцепторної природи), яка задасть напрямок та швидкість руху рівня Фермі ε_F максимально близьким до $\varepsilon_1^p(x)$. Виявилось, що для сполуки ErNiSb найбільш прийнятним є варіант, який передбачає наявність вакансій у кристалографічних позиціях $4a$ та $4c$ атомів Er та Ni відповідно. Причому кількість вакансій в позиції Er ($4a$) є вдвічі меншою за кількість вакансій в позиції Ni ($4c$) (рис. 2а). Уведення до структури сполуки ErNiSb домішкових атомів Sc шляхом заміщення атомів Er супроводжується одночасно як заміщенням атомів Er , так і зайняттям ними вакансій у позиції $4a$. При цьому атоми Ni займають вакансії у позиції $4c$, що може супроводжуватися процесом упорядкування структури $\text{Er}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$. Зайняття атомами Sc та Ni вакансій приводить до збільшення концентрації вільних електронів, росту ступеню компенсації, що змінює положення рівня Фермі ε_F та механізми електропровідності. Цей процес також, однак у 2 рази повільніше, веде до зменшення концентрації структурних дефектів акцепторної природи. При цьому атоми Ni , віддаючи валентні електрони, виступають донорами. На рис. 2б, як приклад, представлено результати розрахунку розподілу густини електронних станів DOS зразка $\text{Er}_{0.9}\text{Sc}_{0.1}\text{NiSb}$, які адекватно відображають ступінь його компенсації. З рис. 2б видно, що рівень Фермі ε_F розташовується ближче до валентної зони ε_V , що відповідає додатним значенням коефіцієнта термо-ерс $\alpha(x,T)$.

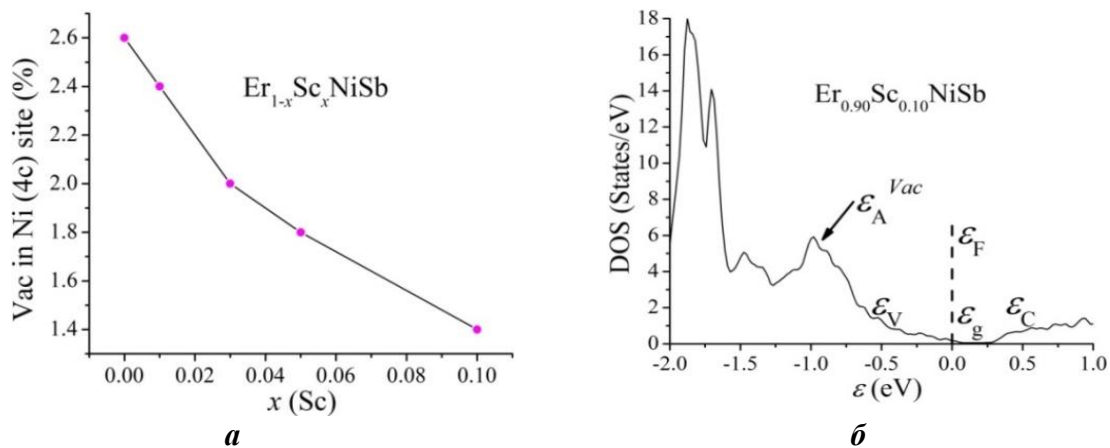


Рис. 2 Динаміка зміни концентрації вакансій у позиції $4c$ атомів Ni (а) та розрахунок DOS за наявності вакансій у кристалографічних позиціях $4a$ та $4c$ (б) $\text{Er}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSb}$

1. Ромака В.А., Стадник Ю.В., Крайовський В.Я., Ромака Л.П., Гук О.П., Ромака В.В., Микійчук М.М., Горинь А.М. Новітні термочутливі матеріали та перетворювачі температури. – Львів: Видавництво Львівської політехніки, 2020. – 612 с.
2. Karla I., Pierre J., Skolozdra R.V. // J. Alloys Compd. – 1998. – 265(42).

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА ТЕРНАРНОЇ СПОЛУКИ Tb_{1-x}Na_xSn₂ (x = 0,1)

Стецьків А.О.¹, Павлюк В.В.²

¹Івано-Франківський національний медичний університет, andrijstetskiw69@gmail.com

²Львівський національний університет імені Івана Франка

Авторами [1] було виявлено існування подвійної сполуки TbSn₂ та за порошковими даними зарахували її структуру до структурного типу ZrSi₂. У роботі [2] методом монокристалу була уточнена кристалічна структура бінарного станіду і параметри решітки становили ($a = 0,44118(5)$, $b = 1,6312(2)$, $c = 0,43138(6)$ нм).

При дослідженні системи Tb-Na-Sn із зразка складу Tb₃₀Na₅Sn₆₅ нам вдалося одержати монокристал, що мав пластинчасту форму. Масиви рентгенівських дифракційних даних отримали за кімнатної температури на автоматичному дифрактометрі XCALIBUR. Структуру визначили з використанням комплексу програм SHELX – 97 [3].

Результати обчислення та уточнення кристалічної структури сполуки Tb_{1-x}Na_xSn₂ (x = 0,1) підтвердили, що вона кристалізується в структурному типі ZrSi₂, де атоми Tb (Na) утворюють статистичну суміш і займають положення атомів Zr (проходить заміщення атомів Тербію на атоми Натрію), а атоми Sn1 та Sn2 – відповідно положення атомів Si2 та Si1.

Експериментальні дані та результати уточнення методом монокристалу встановленої сполуки представлені у табл 1.

Таблиця 1

Деталі експерименту і результати уточнення методом монокристалу
сполуки Tb_{1-x}Na_xSn₂ (x = 0,1)

Емпірична формула	Tb _{1-x} Na _x Sn ₂ (x=0,1)
Структурний тип	ZrSi ₂
Симетрія	Ромбічна
Просторова група	Cmcm
Символ Пірсона	oS12
Розміри кристалу (мм ³)	0,09×0,04×0,01
Температура, К	293(2)
Параметри комірки:	
<i>a</i> , нм	0,4412(1)
<i>b</i> , нм	1,6314(2)
<i>c</i> , нм	0,4314(1)
<i>V</i> , нм ³	0,3105(4)
Тип сканування	ω
Випромінювання, довжина хвилі, нм	MoK _α , 0,071073
Межі θ при зйомці кристалу (°)	4,80 ÷ 32,00
Межі <i>h k l</i>	-6 ≤ <i>h</i> ≤ 6, -20 ≤ <i>k</i> ≤ 20, -4 ≤ <i>l</i> ≤ 4
Загальна кількість рефлексів	1585
Незалежні рефлекси	297 ($R_{int} = 0,045$)
Рефлекси з $I > 2\sigma(I)$	261 ($R_{sigma} = 0,027$)
Фактор добротності, <i>S</i>	1,24
$R(F) [F^2 > 2\sigma(F^2)]$	0,0481
$wR(F^2)$	0,0965
Найбільша/найменша залишкова електронна густина	1,58•10 ⁻³ / -1,63•10 ⁻³ е/нм ³

Координати та ізотропні параметри зміщення атомів у дослідженому стані представлені в табл. 2.

Таблиця 2

Атомні координати та параметри теплового коливання атомів

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	U_{iso} ($\text{нм}^2 \times 10$)	G
Tb_{1-x}Na_xSn₂ (x=0,1)						
Tb/Na	4c	0	0,096(1)	1/4	0,0102(2)	0,89(6)/0,11(6)
Sn1	4c	1/2	0,254(1)	1/4	0,0109(3)	1,00
Sn2	4c	1/2	0,064(3)	1/4	0,0114(2)	1,00

1. Ерёмченко В.Н., Буланова М.В., Марценюк П.С. Фазовые равновесия в системе тербий-олово // Укр. хим. журн. – 1991. – Т. 57, № 3. – С. 241-246.

2. Стецьків А.О., Павлюк В.В. Уточнення кристалічної структури бінарної сполуки TbSn₂ методом монокристалу // Науковий вісник Ужгородського університету (Серія Хімія). – 2016. №1(35). – С. 37-40.

3. Sheldrick G.M. SHELXL-97. Program for crystalstructure refinement. University of Göttingen, Germany, 1997.

ФУНКЦІОНАЛЬНІ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ КРЕМНЕЗЕМИ З КОВАЛЕНТНО ЗАКРІПЛЕНИМИ ХЛОРОПРОПІЛЬНИМИ ТА ОЛІГОСАХАРИДНИМИ ГРУПАМИ ДЛЯ СОРБЦІЇ ФЕНОЛУ З ВОДИ

Трофимчук І. М.

Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, trofymchuk_iryna@ukr.net

Ефективне вилучення органічних забруднювачів з водного середовища є одним з пріоритетних напрямків хімічної науки, зважаючи на щоденне зростання промислового виробництва та їх потрапляння у стічні води з підприємств лакофарбової, фармацевтичної, нафтової та хімічної промисловості, а також у результаті сільськогосподарської діяльності людини. Фенол – це ароматична сполука, характерний і небезпечний токсичний забруднювач, що негативно впливає на стан навколишнього середовища і здоров'я людини. Для вилучення фенолу з водних розчинів використовують різноманітні методи, серед яких дистиляція, біо- та фотодеградація, екстракція, хімічне окиснення, мембранні методи [1]. Однак сорбційне вилучення фенолу все ще залишається однією з найефективніших та розповсюджених процедур очищення стічних вод завдяки простоті апаратурного оформлення процесу та широкому асортименту доступних сорбентів. Одним з найбільш поширених сорбентів для вилучення фенолу з води є активоване вугілля, проте навіть при значних його перевагах залишається ряд недоліків – висока вартість матеріалів, низька механічна стійкість, селективність та ефективність при слідових кількостях забруднювача, необхідність регенерації з використання високих температур, хімічних реагентів та значних кількостей промивної води [2]. Саме тому в даний час основна увага приділяється створенню нових сорбентів, що матимуть покращені характеристики у процесах вилучення слідових кількостей сполук з подібними властивостями, завдяки конструюванню активних центрів сорбції на поверхні твердих носіїв. Зважаючи на це кремнеземи є перспективними матеріалами з огляду на їх унікальні хімічні та фізичні властивості.

У даній роботі за допомогою золь-гель синтезу було одержано кремнеземні матеріали в результаті гідролізу та конденсації тетраетоксисилану (ТЕОС) (або його суміші з (3-хлоропропіл)триетоксисиланом ХПТЕОС) у присутності β-циклодекстрину (β-ЦД) у водно-етанольному розчині (каталізатор – хлоридна кислота) при температурі 70 °С. Синтезовані кремнеземи охарактеризовано методами ІЧ спектроскопії, низькотемпературної адсорбції-десорбції азоту, термогравіметричного та хімічного аналізу.

Показано, що в результаті поліконденсації ТЕОС при додаванні циклічного олігосахариду закріплення функціональних груп β -ЦД на поверхні кремнезему відбувається завдяки утворенню гідролітично нестійких Si–O–C зв'язків. На ІЧ спектрах відбиття таких кремнеземів спостерігається зникнення смуги коливань при 2932 см^{-1} , що належить валентним коливанням С–Н зв'язків у СН- та CH_2 -групах молекул β -ЦД, при їх багатократному промиванні дистильованою водою. Також інтенсивні смуги, що належать деформаційним коливанням С–Н зв'язків первинних та вторинних гідроксильних груп β -ЦД в інтервалі $1400\text{--}1200\text{ см}^{-1}$, валентним коливанням С–О зв'язків ефірних та гідроксильних груп β -ЦД (1078 та 1030 см^{-1}) в інтервалі $1200\text{--}1030\text{ см}^{-1}$ та коливанням зв'язків глюкопіранозного циклу в інтервалі $950\text{--}700\text{ см}^{-1}$, реєструються лише у спектрах кремнеземів, які не піддавалися багатократній обробці водою. Хімічний аналіз кремнезему, одержаного конденсацією ТЕОС у присутності β -ЦД (β -ЦД/ТЕОС), підтверджує, що кількість закріплених на поверхні олігосахаридних груп суттєво зменшується після багатократного промивання таких матеріалів дистильованою водою (від $117,55\text{ мкмоль/г}$ до $2,68\text{ мкмоль/г}$).

Гідролітично стійкі С–О–С зв'язки можна отримати шляхом гідролізу та конденсації двох типів силанів (ТЕОС та ХПТЕОС) у присутності β -ЦД. Після багатократного промивання таких кремнеземів дистильованою водою на ІЧ спектрах відбиття реєструються характеристичні смуги валентних та деформаційних коливань С–О, С–ОН, С–О–С та С–Н зв'язків у інтервалах $1400\text{--}1200\text{ см}^{-1}$ і $1200\text{--}900\text{ см}^{-1}$, а поява смуги коливання при 2943 см^{-1} свідчить про присутність на поверхні олігосахаридних груп. Вміст закріплених олігосахаридних груп на поверхні β -ЦД/ХПТЕОС/ТЕОС кремнезему після багатократного промивання його дистильованою водою (за даними хімічного аналізу) становить $4,83\text{ мкмоль/г}$.

Для обох типів золь-гель кремнеземів (β -ЦД/ТЕОС та β -ЦД/ХПТЕОС/ТЕОС) було вивчено сорбцію фенолу з водних розчинів в залежності від тривалості контакту та його рівноважної концентрації. Для порівняння впливу функціоналізації поверхні кремнеземних матеріалів на ефективність вилучення ароматичної сполуки з води було також вивчено сорбцію фенолу на гідроксильованому кремнеземі (ТЕОС), синтезованому за тих же умов, що й функціоналізовані зразки. Показано, що хімічна функціоналізація поверхні кремнеземів приводить до зростання сорбції фенолу з води у порівнянні з немодифікованим сорбентом. На рисунку представлені ізотерми сорбції фенолу з води на ТЕОС, β -ЦД/ТЕОС та β -ЦД/ХПТЕОС/ТЕОС кремнеземах (на одиницю маси та питомої поверхні сорбенту).

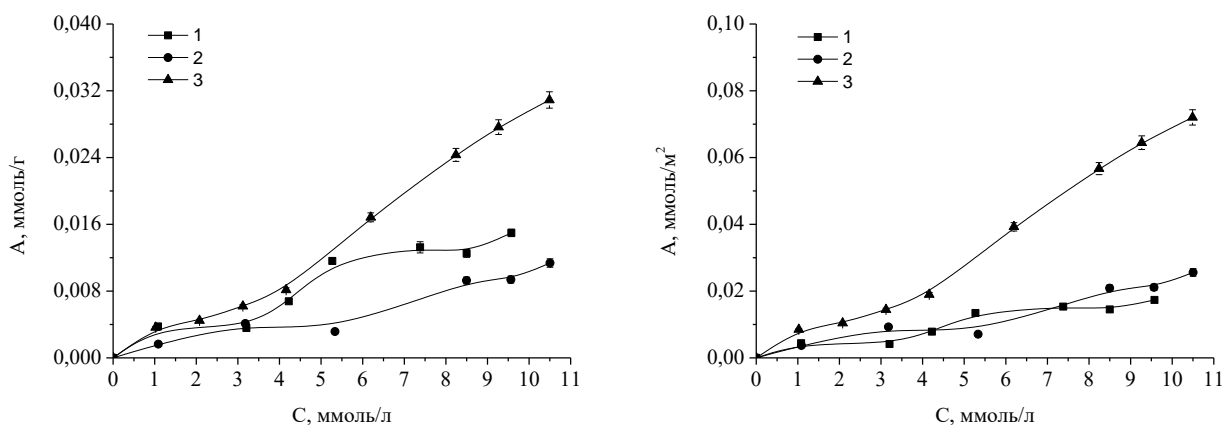


Рис. Ізотерми сорбції фенолу на ТЕОС (1), β -ЦД/ТЕОС (2) та β -ЦД/ХПТЕОС/ТЕОС (3) кремнеземах

У випадку ТЕОС-кремнезему сорбція фенолу відбувається в результаті відносно слабких взаємодій ароматичної сполуки та поверхневих силанольних груп. Збільшення сорбції фенолу на поверхні функціоналізованих матеріалів можливе завдяки супрамолекулярним та гідрофобним взаємодіям між ароматичною сполукою та закріпленими олігосахаридними чи алкільними групами. До того ж з врахуванням питомої поверхні синтезованих матеріалів різниця між їх сорбційною здатністю стає більш очевидною. Одержані результати підтверджують, що закріплення на поверхні кремнезему олігосахаридних груп шляхом утворення гідролітично стабільних С–О–С зв'язків завдяки використанню функціонального хлоропропільного силану сприяє покращенню сорбційних характеристик щодо фенолу і відкриває нові можливості при створенні кремнеземних матеріалів для ефективного вилучення токсичних забруднювачів з води.

1. Buska G., Berardinelli S., Resini C., Arrighi L. Technologies for the removal of phenol from fluid streams: A short review of recent developments //J. Hazard. Mater. – 2008. – 90. – P. 265–288.

2. Lin S.-H., Juang, R.-S. Adsorption of phenol and its derivatives from water using synthetic resins and low-cost natural adsorbents.//J. Environ. Manage. – 2009. – 90. – P. 1336–1349.

ВПЛИВ ФІЗИКО-ХІМІЧНИХ ПАРАМЕТРІВ ТРАВІЛЬНИХ КОМПОЗИЦІЙ $K_2Cr_2O_7 - HBr$ – РОЗЧИННИК НА ПРОЦЕС ХІМІЧНОЇ ВЗАЄМОДІЇ З $Zn_xCd_{1-x}Te$

Федорчук О. М.¹, Чайка М. В.¹, Денисюк Р. О.¹, Томашик В. М.²

¹Житомирський державний університет імені Івана Франка, olha.fel@ukr.net

²Інститут фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова НАН України

У сучасному світі для виготовлення приладів, деталей до них, використовують напівпровідникові матеріали. Фізико-хімічні параметри і характеристики для різних приладів відрізняються. Напівпровідникові матеріали на основі $Zn_xCd_{1-x}Te$ володіють великою кількістю переваг у порівнянні з аналогічними приладами [1].

Метою дослідження є вивчення електрохімічних процесів, що відбуваються під час розчинення монокристалу напівпровідника $Zn_{0,04}Cd_{0,96}Te$ в травниках системи $K_2Cr_2O_7 - HBr$ – розчинник.

Напівпровідникові матеріали, що застосовуються для виготовлення різних виробів мікроелектроніки, повинні відповідати ряду вимог. Придатність того чи іншого напівпровідникового матеріалу визначається його:

- кристалічною структурою,
- шириною забороненої зони,
- положенням домішкових рівнів,
- однорідністю розподілу легуючих домішок по об'єму.

Напівпровідникові матеріали за хімічним складом можна розділити на прості (елементарні) і складні. Напівпровідники у вигляді пластин або дисків, вирізаних з монокристалів, називаються підкладками. В їх об'ємі і на поверхні методами травлення, окислення, дифузії, епітаксії, імплантації, фотолітографії, іншими технологічними прийомами формуються елементи мікросхем електронних приладів і пристроїв. Стан поверхні підкладки впливає на параметри виготовлених приладів. Якість поверхні підкладки визначається її мікрорельєфом, кристалічною досконалістю поверхневих шарів і ступенем їх фізико-хімічної чистоти.

В процесі обробки і підготовки поверхні підкладок напівпровідників необхідне створення досконалих поверхонь, мають високу ступінь плоскопаралельності при заданій кристалографічній орієнтації, з повною відсутністю порушеного шару, мінімальною

щільністю поверхневих дефектів, дислокацій та інше. Поверхневі забруднення повинні бути мінімальними.

Вирішення цих завдань досягається з використанням фізико-хімічних методів обробки поверхні, які включають хіміко-механічне травлення, хімічне травлення і хіміко-динамічне полірування (ХДП), електрохімічне і плазмохімічне травлення, осадження та ін. Вибір того чи іншого технохімічного процесу обробки напівпровідникових підкладок залежить від вимог конкретного технологічного процесу виготовлення певного типу напівпровідникових приладів

Процес хімічної обробки напівпровідникових підкладок полягає в розчиненні їх поверхневого шару під дією кислотних або лужних травителів. Даний процес є гетерогенним, так як взаємодія напівпровідникового матеріалу з травителем здійснюється на межі розділу двох різних середовищ: твердої (підкладка) і рідкої (травитель). Інша особливість хімічної взаємодії підкладки з травителем полягає в тому, що процес травлення підкладки не є рівноважним – обсяг напівпровідникового матеріалу видаляється менше, ніж травителя. Надлишок травителя і фіксація його температури дозволяють підтримувати процес хімічної обробки з постійною швидкістю і таким чином точно розрахувати товщину шару напівпровідникового матеріалу, що видалиться.

Однак слід враховувати той факт, що швидкість травлення механічно-порушеного шару значно вище. Це пояснюється наявністю в механічно обробленому шарі великої кількості структурних порушень, які збільшують ефективну площу взаємодії напівпровідникового матеріалу з травителем, що призводить до зростання швидкості травлення.

За результатами проведених досліджень можна зробити висновок, що при хімічному розчиненні монокристалів $Zn_xCd_{1-x}Te$ в розчинах $K_2Cr_2O_7 - HBr$ – розчинник спостерігається компенсаційна залежність, на яку не впливає природа напівпровідникового матеріалу, проте важливу роль відіграє характер травильних композицій, які використовуються для розчинення поверхні досліджуваних матеріалів [2].

1. Холодкова, Н.В. *Технология материалов электронной техники: лабораторный практикум* / Н.В. Холодкова, Т.Г. Шикова; Иван. гос. хим.-технол. ун-т. – Иваново, 2013. – 3с.

2. Чайка М.В. Вплив природи органічного компонента на хімічне розчинення монокристалів $CdTe$ та $Zn_xCd_{1-x}Te$ у водних розчинах $K_2Cr_2O_7 - HBr$ – розчинник / М.В. Чайка, З.Ф. Томашик, В.М. Томашик, Д.Ю. Панасюк // Всеукр. наук. конф. “Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи”, 17-18 травня 2017 р. : Збір. матер. конф. – Житомир, 2017. – С. 125-128.

ЕЛЕКТРОХІМІЧНІ ПРОЦЕСИ ПРИ РОЗЧИНЕННІ МОНОКРИСТАЛІВ $CdTe$ В ТРАВІЛЬНИХ КОМПОЗИЦІЯХ $K_2Cr_2O_7 - HCl$

Чайка М.В.¹, Томашик З.Ф.², Денисюк Р.О.¹, Томашик В.М.², Панасюк Д.Ю.³

¹Житомирський державний університет імені Івана Франка, laridae92@gmail.com

²Інститут фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова НАН України

³Житомирський науково-дослідний експертно-криміналістичний центр МВС України

Широкозонні напівпровідникові монокристали $CdTe$ є перспективним матеріалом для компактних і не потребує охолодження детекторів рентгенівського і γ -випромінювання, ПЧ-фотоприймачів. Сучасна технологія виробництва робочих елементів цих приладів вимагає встановлення основних закономірностей процесів та явищ, які відбуваються в найтонших поверхневих шарах матеріалів. Ця технологія включає в себе очищення поверхні кристалів від забруднень та її вирівнювання до відповідних значень основних параметрів шорсткості шляхом проведення хіміко-механічного (ХМП) та хіміко-динамічного полірування (ХДП). Фізико-хімічні процеси, які відбуваються під час полірування на границі розділу поверхні

напівпровідників з травильними композиціями, відіграють значну роль у забезпеченні надійності робочих елементів електронних приладів.

Метою дослідження є вивчення електрохімічних процесів, що відбуваються під час розчинення монокристалів CdTe у водних розчинах $K_2Cr_2O_7 - HCl$.

Для досліджень закономірностей процесу розчинення CdTe використовували отримані за методом Бріджмена монокристали, з яких готували точкові електроди. Місце контакту зразка з поверхнею досліджуваного електрода ізолювали беззольною самотвердіючою пластмасою PATTERN RESIN LS. Травильні розчини готували з 10,9 % водного розчину $K_2Cr_2O_7$ (х.ч.) та 35,5 % HCl (х.ч.). Перед вимірюванням електродних потенціалів саморозчинення поверхню CdTe спочатку травили поліруючим розчином, потім промивали 0,1 М $Na_2S_2O_3$ та великою кількістю дистильованої води. Експериментальні дослідження електрохімічних процесів проводили на установці, в якій електродом порівняння був насичений хлор-срібний електрод з потенціалом 0,2445 В. Його разом із точковим електродом опускали у досліджуваний травильний розчин. Вимірювання виконували у статичному режимі, щоб уникнути зовнішнього впливу на окисно-відновні процеси, які відбуваються при цьому. Встановлено, що важливо контролювали відстань між електродами та відсутність їх контакту з стінками посудини, адже саме цей вплив може створювати умови для проходження побічних процесів. Електродні потенціали вимірювали та записували на комп'ютер через кожні 2 секунди іонометром И-160М за температури 293 К, потім виконували перерахунок на стандартний водневий електрод [1].

На рис. 1. показана залежність значення електродного потенціалу від часу розчинення точкового електрода в травильних композиціях $K_2Cr_2O_7 - HCl$. Встановлено, що електродні потенціали CdTe перебувають в межах 0,3-0,4 В.

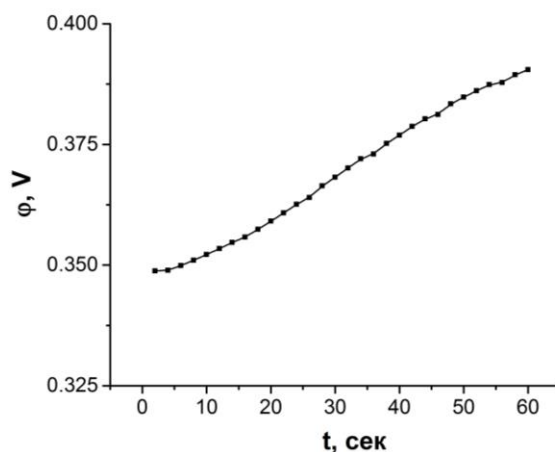


Рис. 1 Електродні потенціали розчинення CdTe в полірувальному розчині, що містить (в об. %): 40 $K_2Cr_2O_7 - 60 HCl$

Видно, що значення електродних потенціалів з часом збільшуються, оскільки відбувається утворення та перехід іонів з поверхні напівпровідника у розчин. Крім того, це може бути обумовлено утворенням на поверхні досліджуваних монокристалів малорозчинних сполук кадмію, хрому, а також, можливо, телуру. Утворення цих сполук призводить до перенапруги на електроді, що сприяє збільшенню електродних потенціалів, але через те, що товщина плівки малорозчинних сполук невелика, то і збільшення потенціалів незначне.

Встановлено залежність середніх значень електродних потенціалів саморозчинення досліджуваних монокристалів від вмісту $K_2Cr_2O_7$ в травильних розчинах $K_2Cr_2O_7 - HCl$. Виявлено (рис. 2), що збільшення концентрації окисника у складі травильних композицій призводить до зростання електрорушійної сили гальванічного елемента, що, ймовірно, пов'язано з більшою різницею між потенціалами відновника (напівпровідника) та окисника (травника). Невеликі коливання електродних потенціалів при вмісті $K_2Cr_2O_7$ в HCl до

30 об. %, можливо, відбуваються через часткову пасивацію поверхні монокристалів та її забруднення малорозчинними продуктами взаємодії, зокрема, нерозчиненими сполуками телуру. Зі збільшенням концентрації калій дихромату потенціал рівномірно зростає як для полірувальних травильних композицій, так і для розчинів, після обробки якими на поверхні зразків утворюються нерозчинні сполуки хрому.

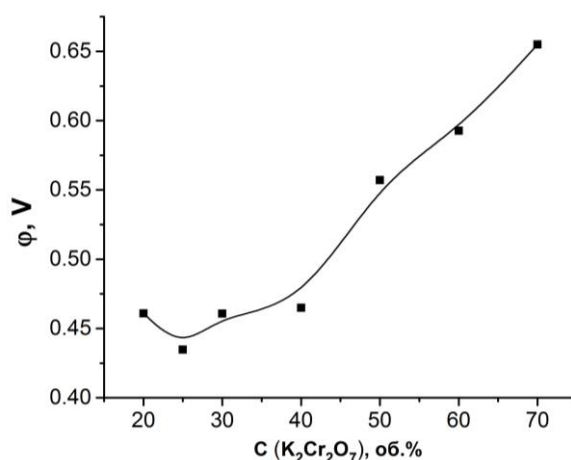


Рис. 2 Концентраційна залежність зміни електродних потенціалів CdTe у водних розчинах К₂Сг₂О₇ – НСІ

Встановлено, що для хіміко-динамічного полірування поверхні монокристалів CdTe можна використовувати травильні суміші зі значеннями електродних потенціалів саморозчинення по відношенню до водневого електроду 0,44-0,58 В. Важливою умовою для формування поліруючих травильних композицій є достатній вміст окисника в травнику (25-45 об. %), адже його нестача може сприяти утворенню на поверхні напівпровідників шару нерозчинених сполук телуру та хрому.

За результатами дослідження електродних потенціалів розчинення монокристалів CdTe у водних розчинах К₂Сг₂О₇ – НСІ проаналізовано процеси, що відбуваються на границі розділу “монокристал – травильний розчин”. Встановлено, що для полірування поверхні досліджуваних напівпровідників з невеликою швидкістю хімічного розчинення (2,5-6 мкм/хв) можна використовувати травильні композиції із вмістом К₂Сг₂О₇ в НСІ 25-45 об. %.

1. Чайка М.В. Електрохімічні процеси при розчиненні CdTe та Zn_xCn_{1-x}Te у водних розчинах К₂Сг₂О₇ – НВг – етиленгліколь / М.В. Чайка, З.Ф. Томашик, Р.О. Денисюк, Д.Ю. Панасюк, В.М. Томашик // III Всеукр. наук. конф. “Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи”, 17 квітня 2019 р. : Збір. матер. конф. – Житомир, 2019. – С. 245-246.

ДОСЛІДЖЕННЯ ФІЗИКО-ХІМІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ НАНОФЕРИТУ PbFe₂O₄

Шамайло П.В.¹, Камінський О.М.¹, Тітов Ю.О.²

¹Житомирський державний університет імені Івана Франка, petro.shamailo.ua@gmail.com

²Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Однією з важливих форм магніточутливих матеріалів, що знайшли широке застосування, є ферити. Ферити із структурами прямої та оберненої шпінелі, мають загальну хімічну формулу MeFe₂O₄ (де Me²⁺ – це іони металів). Їх використовують для виготовлення трансформаторних осердь, котушок індуктивності, циркуляторів, фазообертачів, магнітних осердь, ізоляторів тощо. Наноферити, зокрема, мають широке використання в медицині для магнітно-резонансної томографії [1].

Одним із сучасних способів одержання наноферитів, який набув досить широкого розповсюдження, є так званий золь – гель процес. Серед варіантів золь – гель синтезу

наноферитів слід відмітити золь – гель синтез за участю автогоріння (ЗГА). ЗГА – це різновид золь-гель синтезу твердих оксидних наноматеріалів (в тому числі, наноферитів), в процесі якого утворений гель під час випаровування золю здатний самоспалахувати, що призводить до підвищення температури реакційної суміші та швидкого формування дрібно кристалічної ґрадки матеріалу. Як відмічають автори [1], цей метод є досить простим та зручним, оскільки не потребує ніякої складної та дорогої апаратури і дозволяє синтезувати складні оксидні системи, феритові порошки тощо різного хімічного складу. Як вже зазначалося, ферити, наприклад, використовуються для виготовлення магнітних приладів і вузлів електронної техніки (Рис.1).



Рис. 1 Феритовий випрямляч напруги на зарядці до ноутбука

Метою роботи є: синтез нанофериту $PbFe_2O_4$ методом ЗГА та дослідження його фізико – хімічних властивостей.

Синтез нанофериту $PbFe_2O_4$ за участю ЗГА здійснювали за методикою, описаною в [2-3]: на електронних терезах зважували 0,01 моль $Pb(NO_3)_2$ марки «ч.д.а.» ($m = 3,32$ г); 0,02 моль $Fe(NO_3)_3 \cdot 9H_2O$ марки «ч.д.а.» ($m = 8,08$ г) та 0,03 моль лимонної кислоти $C_6H_8O_7 \cdot H_2O$ марки «ч.д.а.» ($m = 6,3$ г). Одержану суміш розчиняли в 50 мл дистилляту. До одержаного розчину покрпельно додавали 12,5 мл 25 % розчину аміаку для підтримання $pH \approx 8$ (перевіряли універсальним індикатором). Розчин нагрівали в конічній колбі на 250 мл на електроплитці до повного випаровування розчинника з утворенням густого гелю, який в момент висихання самоспалахував (відбувався процес автогоріння з утворенням пухкої маси фериту). Після закінчення реакції одержану масу синтезованого фериту охолоджували до кімнатної температури, розтирали в ступці та промивали 7 – 8 разів (до $pH = 7$) невеликою кількістю дистилляту та висушували на повітрі.

Встановлено, що одержаний наноферит $PbFe_2O_4$ – важкий порошок коричневого кольору, що володіє помірними магнітними властивостями. При розчиненні зразка в розчині нітратної кислоти (1:1) та дії на цей розчин Na_2S утворюється чорний осад плумбум сульфід (що якісно підтверджує наявність іонів Pb^{2+} зразку фериту).

Будову синтезованого фериту вивчали методами РФС та ІЧ спектроскопії. Методом ІЧ спектроскопії (дослідження проводили на спектрофотометрі з Фур'є перетворенням AGILENT CARY 630 в діапазоні $400 - 4000$ cm^{-1}) ідентифіковано основні смуги поглинання нанофериту ($550 - 570$ cm^{-1} валентні коливання зв'язків Fe – O в шпінелі; 700 cm^{-1} валентні коливання Pb – O зв'язків), що підтверджує будову $PbFe_2O_4$.

1. В.С. Бушкова, Б.К. Остафійчук, О.В. Копаєв Особливості синтезу складних оксидних систем з використанням ЗГА-методу / В.С. Бушкова, Б.К. Остафійчук, О.В.Копаєв // Фізика і хімія твердого тіла.. – 2014. – Т. 15, №1 (2014). – с. 182-185.

2. Синтез та магнітна мікроструктура наночастинок магнієвих феритів, заміщених цинком/Б.К. Остафійчук, В.С. Бушкова, В.В. Мокляк, Р.В. Ільницький//Укр. фіз. журн. – 2015. – Т. 60, № 12. – с. 1236 – 1244.

3. Махневич Д.С., Камінський О.М. Синтез магніточутливих наноферитів методом ЗГА // II Всеукр. наук. конф. «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи». – Житомир, 16 травня. – 2018. – с. 112.

ВИКОРИСТАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ БАРВНИКІВ ТА ЇХ РІЗНОРІДНИХ АСОЦІАТІВ ДЛЯ КІЛЬКІСНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ВМІСТУ ПАР У РОЗЧИНАХ

Шаповалов С.А.

Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, serghey.a.shapovalov@karazin.ua

Вивчення взаємодій між протилежно зарядженими барвниками доцільно у зв'язку з перспективністю використання властивостей асоціатів для розробки нових способів кількісного визначення органічних речовин, у тому числі поверхнево-активних речовин (ПАР). Так, запропоновано методики кількісного визначення неіонної ПАР [1] або аніонної – [2], в основу яких покладена зміна стійкості асоціатів $(\text{ПАР}^+)_2 \cdot \text{БФС}^{2-}$ у присутності ПАР, що визначається (де БФС^{2-} – двохзарядний аніон бромфенолового синього). Цей факт знайшов відображення у зміні спектрофотометричних характеристик розчину, що містить даний асоціат. Встановлюється залежність між величиною оптичної густини розчину, A , і молярною концентрацією ПАР, C . Але чи не вперше використовувати саме різнорідні асоціати барвників для кількісного визначення ПАР запропоновано на прикладі асоціату індотрикарбоціаніна з бромтимоловим синім, проте – дещо пізніше [3]: градувальна залежність має лінійний вигляд при рН 3,8 і вмістах ЦПБ від $2 \cdot 10^{-6}$ до $2 \cdot 10^{-5}$ моль/л.

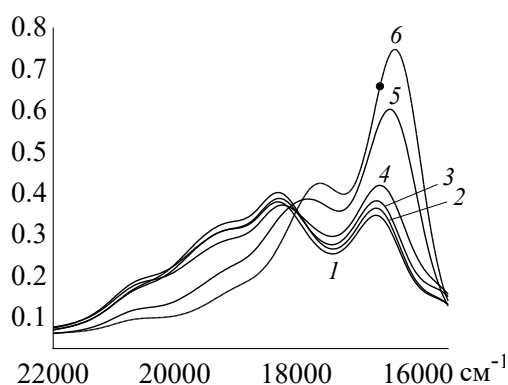


Рис. 1. Світлопоглинання (A) в системі «хінальдиновий синій (ХС)+ додецилсульфат натрію (ДДСН)». Вміст, моль/л: ХС: 1 – 6 – $1,5 \cdot 10^{-5}$; ДДСН: 1 – 0, 2 – $5 \cdot 10^{-4}$, 3 – $9 \cdot 10^{-4}$, 4 – $2 \cdot 10^{-3}$, 5 – $2 \cdot 10^{-2}$, 6 – $4 \cdot 10^{-2}$. Товщина поглинаючого шару 0,20 см

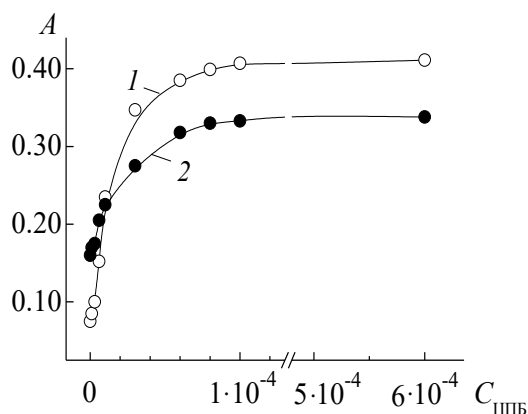


Рис. 2. Залежність A від молярної концентрації ЦПБ: 1 – 600 нм; 2 – 550 нм. Вміст, моль/л: ХС: $4,6 \cdot 10^{-6}$, БКЗ: $8,0 \cdot 10^{-5}$. Розчин порівняння – $8,0 \cdot 10^{-5}$ моль/л БКЗ. Товщина поглинаючого шару 1,00 см

Способи, які використовуються для кількісного визначення ПАР, здебільше націлені на зниження межі виявлення або розширення інтервалу концентрацій, що визначаються. Серед асоціатів ХС цікавим з практичної точки зору характером спектральних змін звертає на себе увагу система «ХС + фенолсульфогфталейн (ФС) + іонний ПАР» (рис. 1).

Катіон ХС^+ має планарну будову внаслідок sp^3 -гібридизації атомів Карбону (лише етильні групи ХС^+ розташовані поза плоскістю хромофору). На відміну від ХС^+ , бензольні кільця аніонів ФС^- розташовані пропелероподібно та симетрично відносно центрального атома Карбону. Тому аніони ФС^- можна вважати схожими на сферу (радіус із центром на позначеному атомі Карбону дорівнює 5,6 ангстрем, торсійні кути між бензольними фрагментами приблизно 52°). Однак, не зважаючи на принципово різну геометрію катіона й аніона, між ними виникає суттєва взаємодія. Про це свідчать не тільки спектральні дані. Нами проведений розрахунок енергій барвників, що взаємодіють, та їх асоціатів. Вихідні стани ХС^+ і ФС^- характеризуються значеннями повної енергії (тут і далі розмірність енергії кДж/моль) 141,0 і 274,2, відповідно, а їх алгебраїчна сума 415,2 перевищує енергію асоціату 342,4. Таким чином, виграш енергії ΔE для асоціату $\text{ХС}^+ \cdot \text{ФС}^-$ складає 72,8. Подібна ситуація спостерігається і для асоціату $(\text{ХС}^+)_2 \cdot \text{ФС}^{2-}$: ΔE становить 149,2.

Катіонний цетилпіридиній бромід (ЦПБ) руйнує асоціат $\text{XC}^+\cdot\text{FC}^-$ при невеликих концентраціях ПАР у водному розчині (від $3\cdot 10^{-6}$ до $2\cdot 10^{-5}$ моль/л). Інакше кажучи, асоціат виявляється доволі «чутливим» по відношенню до вмісту ЦПБ. За цих умов величина оптичної густини при фіксованій довжині хвилі A_λ і незмінних концентраціях обох барвників суттєво зростає зі збільшенням концентрації ПАР ($C_{\text{ЦПБ}}$, моль/л). Характерною особливістю цього ефекту є існування пропорційної залежності A_λ від $C_{\text{ЦПБ}}$. Наприклад, при постійних молярних концентраціях XC $4,9\cdot 10^{-6}$ і FC $7,1\cdot 10^{-5}$ для довжини хвилі 600 нм вона має вигляд: $A_\lambda = (0,032 \pm 0,010) + (2,31 \pm 0,09)\cdot 10^4 \times C_{\text{ЦПБ}}$.

Подібні залежності можуть стати основою розробок кількісних визначень катіонних ПАР в розчині, які характеризуються доволі низькою межею концентрації, що визначається.

Незвичайний характер руйнування різнорідних асоціатів барвників встановлено для асоціату XC з бромкрезоловим зеленим (БКЗ): за певних умов величина A при фіксованій довжині хвилі лінійно зростає зі збільшенням вмісту ЦПБ у розчині (див. рис. 2 крива 1, концентрації ЦПБ від $2\cdot 10^{-6}$ до $2\cdot 10^{-5}$ моль/л):

$$A_\lambda = (0,11 \pm 0,01) + (2,7 \pm 0,1)\cdot 10^4 \times C_{\text{ЦПБ}},$$

де інтервал концентрацій ЦПБ складає від $1\cdot 10^{-6}$ до $3\cdot 10^{-5}$ моль/л.

Різне відношення асоціатів барвників до ПАР можна пов'язати з різною стійкістю сполук, що утворюються: катіонного барвника з аніоном ДДС⁻, а аніонного – з катіоном ЦП⁺. Тобто для цілеспрямованого пошуку нових систем (наприклад, в кількісному хімічному аналізі), що здатні змінювати світлопоглинання водного розчину в заданому напрямку, є необхідними дані про рівноважні та спектральні властивості і барвників, і асоціатів [4]. Для досягнення найбільшого ефекту визначень як іонних ПАР в розчині, так і в оцінці критичної концентрації міцелотворення (ККМ) ПАР важливо використовувати асоціат певної стійкості, яка характеризується значенням рівноважної константи різнорідної асоціації (наприклад, асоціат XC з FC). Особливістю подібних розробок є висока чутливість (на рівні $1\cdot 10^{-6}$ моль/л) і висока контрастність кількісних визначень. Вона забезпечується наявністю в розчині двох барвників, що мають добре спектрально рознесені смуги поглинання (наприклад, для FC величина λ_{max} становить 430 нм, а для XC^+ – 600 нм). Остання обставина сприяє не тільки інструментальній, але й візуальній індикації змін забарвлення розчину, що відбуваються. Таким чином, барвники та різнорідні асоціати барвників можуть бути використані при розробці тестових визначень ПАР або в оцінці ККМ [5, 6] у водних розчинах.

1. Сухан В.В., Куличенко С.А., Доленко С.А. Спектрофотометрическое определение неионогенных ПАВ по реакции с бромфеноловым синим и бромидом децилпиридиния // Укр. химич. журн. – 1993. – Т. 59, № 2. – С. 184 – 188.

2. Сухан В.В., Горенштейн Л.И. Спектрофотометрическое определение лаурилсульфата // Укр. хим. журн. – 1993. – Т. 59, № 9. – С. 974 – 977.

4. Шаповалов С.А., Коваль В.Л., Мчедлов-Петросян Н.О., Клещевникова В.Н., Деревянко Н.А., Ищенко А.А. Влияние длины полиметиновой цепи индополикарбодиазаниновых катионов на их ассоциацию с анионными красителями в воде // Допов. НАН України. – 1999. – № 2. – С. 156 – 161.

5. Shapovalov S.A. Association processes with the participation of dyes in solutions: Thermodynamic and equilibrium characteristics of nanosystems. – Riga : Academic Publishing of European Union, OmniScriptum Publishing group, 2020. – 114 p. – ISBN: 978-620-2-92204-3.

6. Shapovalov S., Ponomariov V. Interaction of dyes with cationic surfactants in solutions: Determination of critical micelle concentration // Int. Lett. Chem., Phys. Astronomy. – 2019. – Vol. 81. – P. 27 – 34.

7. Пат. № 120049 Україна, МПК G01N 21/64 (2006.01), G01N 21/64 (2006.01). Спосіб флуоресцентного визначення критичної концентрації міцелотворення неионогенних поверхнево-активних речовин у воді / С.А. Шаповалов, О.В. Кириченко (Україна). – Заявка № u201702901 ; заявл. 27.03.2017 ; опубл. 25.10.2017 ; Бюл. № 20.

КІНЕТИЧНІ АСПЕКТИ ВЗАЄМОДІЙ МЕТАЛІВ І РАДІОНУКЛІДІВ З ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНИМИ ОРГАНІЧНИМИ СПОЛУКАМИ В ЕКСТРАКЦІЙНИХ СИСТЕМАХ

Шаповалов С.А., Краснощорова А.П., Юхно Г.Д., Єфімова Н.В.

Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, serghey.a.shapovalov@karazin.ua

Екстракційно-фотометричні способи, які використовуються для кількісного визначення металів, радіонуклідів у водному середовищі, засновані на використанні властивостей комплексів металу з функціоналізованими органічними сполуками [1, 2]. До їх складу може входити органічний реагент (R^1), що селективно взаємодіє з металом (Me), та барвник (R^2), що сприяє утворенню у водному середовищі інтенсивно забарвленої різнолігандної сполуки $Me-R^1-R^2$. Ця сполука здатна екстрагуватися в органічний розчинник, що не змішується з водою. Проте важливим з точки зору ефективності кількісного визначення є, по-перше, намагання забезпечити вилучення сполуки протягом однієї екстракції, а по-друге, створити експериментальні умови здійснення визначення (наприклад, добавки косольвентів) для оптимізації часу встановлення хімічної рівноваги. Тому розгляд кінетичних аспектів є фізико-хімічним підґрунтям раціоналізації аналітичної процедури. В даному повідомленні висвітлюються кінетика рідинної та твердофазної екстракції стосовно комплексних сполук міді (II) та низки радіонуклідів.

У способі екстракційно-фотометричного визначення вмісту міді (II), який для утворення сполуки з Cu послідовно включає добавки R^1 та R^2 , подальше екстрагування сполуки у хлороформну фазу, вимірювання оптичної густини органічної фази, побудування градувальної залежності оптичної густини від концентрації міді при певній довжині хвилі світлопоглинання, який характеризується тим, що як R^1 використовують 2,2'-біхінолін-4,4'-дикарбоксамід, а як R^2 використовують динатрієву сіль 2,4,5,7-тетрабромфлуоресцеїна [3]. Нами експериментально встановлено, що на швидкість екстракції впливає склад хлороформної фази, який містить домішки ізопропанолу. Розрахована константа швидкості екстракції, яка визначалася за зміною інтенсивності забарвлення органічної фази при 545 нм (рис. 1; ϵ – коефіцієнт молярного поглинання, $\text{моль} \cdot \text{л}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$; λ – довжина хвилі поглинання, нм) для низки екстрактів з різним об'ємним вмістом ізопропанолу (від 1 до 20 %).

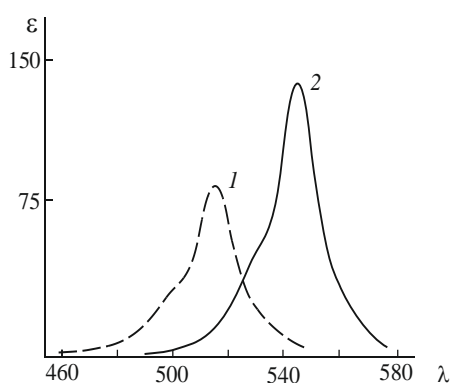


Рис. 1. Спектри поглинання: 1 – R^2 у воді; 2 – $\text{Cu(I)-R}^1\text{-R}^2$ у хлороформній фазі

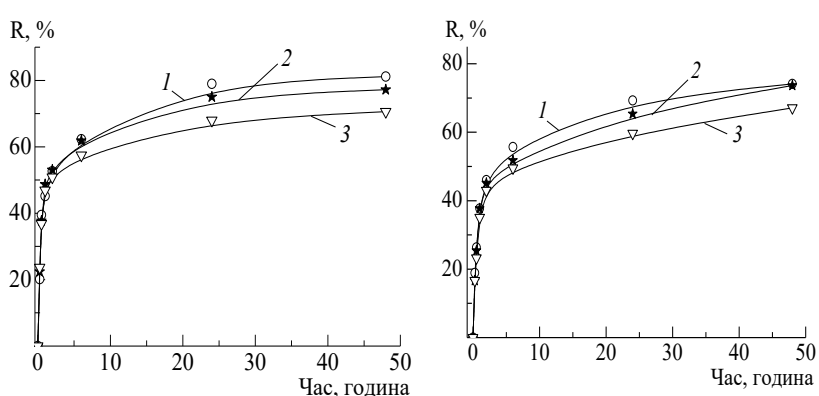


Рис. 2. Кінетика екстракції U(VI) з водної фази ТВЕКС–С45 (ліворуч) і ТВЕКС–СІР67 (праворуч) в залежності від кислотності розчину: 1 – рН 2; 2 – рН 4; 3 – рН 6

Найбільше значення константа швидкості приймає при 9 – 10 % концентрації ізопропанолу в хлороформі. Таким чином, кінетичні дані дають змогу удосконалити процедуру кількісного визначення міді (II) у розчині за рахунок оптимізації складу органічної фази і скорочення часу екстракції.

З метою екстракційного вилучення [4, 5] радіонуклідів ^{90}Sr , ^{90}Y , ^{137}Cs та U(VI) з водних розчинів нами були використані тверді екстрагенти (ТВЕКС) на основі каліксаренів: ТВЕКС–С45 і ТВЕКС–СІР67, які запропоновані ІОХ НАН України. Екстракційні властивості ТВЕКСів визначали їх контактуванням із розчинами ^{90}Sr , ^{90}Y , ^{137}Cs та уранілнітрату $(\text{UO}_2)(\text{NO}_3)_2$ при співвідношенні кількостей твердої та рідкої фаз 1 : 100. Наважку ТВЕКСа перемішували з розчином, який містив радіонуклід, що досліджували, при різній кислотності (0; 0,1; 0,5 і 1,0 моль/дм³) і температурі 293 К. Тривалість часу, необхідна для встановлення термодинамічної рівноваги в системі «ТВЕКС – розчин радіонукліду», визначалася з кінетичних даних за зміною величини коефіцієнту вилучення (R, %), які були отримані шляхом послідовного відбору проб та визначення залишкової концентрації радіонукліду в розчині. Як приклад, кінетичні криві вилучення U(VI) при екстракції ТВЕКС–С45 і ТВЕКС–СІР67 в залежності від рН розчинів і часу контактування зображені на рис. 2.

Аналіз кінетичних кривих в системі «ТВЕКС – каліксарен – розчин» свідчить, що сорбційна рівновага між рідкою та твердою фазами практично досягається вже через 6 годин. Встановлені залежності дають змогу стверджувати, що процес екстракції радіонуклідів складається з двох стадій: швидкої та повільної. Висунуто припущення, що за даних умов швидкість екстракції твердим екстрагентом контролюється внутрішньо-дифузійним механізмом та істотно залежить від селективності екстрагенту. Показано, що екстракція радіонуклідів ТВЕКСами зростає із збільшенням заряду частинки у послідовності: $\text{U(VI)} > ^{90}\text{Y} > ^{90}\text{Sr} > ^{137}\text{Cs}$. Разом з тим, екстракція залежить від довжини алкільного радикалу, який розташований поблизу атому Фосфору макроциклічного каркасу калікс[4]аренфосфіноксиду. Катіони екстрагуються ефективніше з каліксареном меншої довжини алкільного радикалу. Порівняння коефіцієнтів екстракції (R) U(VI) , ^{90}Sr , ^{90}Y і ^{137}Cs свідчить про те, що екстракційна здатність стосовно досліджуваних радіонуклідів для системи ТВЕКС–С45 більше, ніж для ТВЕКС–СІР67. Величини R для екстракції U(VI) твердими екстрагентами в залежності від рН розчину свідчать, що зі зростанням рН ефективність вилучення Урану зменшується. У нейтральних розчинах U(VI) можуть бути присутні продукти гідролізу – іони $\text{UO}_2(\text{OH})^+$, в той час як у сильноокислих розчинах метал знаходиться у формі катіона $(\text{UO}_2)^{2+}$. Зменшення екстракційної здатності із збільшенням рН розчину відбувається внаслідок комплексоутворення катіонної форми з фосфіноксидною групою ТВЕКС. На екстракцію інших радіонуклідів кислотність розчину також суттєво впливає. При низьких значеннях кислотності (нейтральне середовище) екстракція незначна. Проте, із підвищенням кислотності розчину, екстракція різко зростає як для ТВЕКС–трибутилфосфат, так і для ТВЕКС–каліксаренів.

1. Комплексоутворення та асоціація в розчинах з участю металовміщуючих частинок, функціональних і забарвлених речовин: практичні рішення і напрацювання : [монографія] / С.А. Шаповалов [та ін.] ; [за ред. докт. хім. наук, проф. С.А. Шаповалова] – Харків : ХНУ імені В.Н. Каразіна, 2018. – 148 с. – ISBN 978-966-285-540-1.

2. Svishchova Y.A., Shapovalov S.A. Analysis of the possibility of using azodyes to estimation of the cadmium and lead content in agricultural soils // Int. J. Ecol. Sci. Environm. Engineering. – 2018. – Vol. 5, № 1. – P. 28 – 33.

3. Пат. № 146469 [корисна модель] Україна, МПК G01N 21/78 (2006.01). Спосіб екстракційно-фотометричного визначення вмісту міді (II) у водному середовищі / Шаповалов С.А. ; [володілець : Харків. нац. ун-т ім. В.Н. Каразіна (Україна)]. – Заявка № u202005488 ; заявл. 25.08.2020 ; опубл. 24.02.2021 ; Бюл. № 8.

4. Пат. № 141642 [корисна модель] Україна, МПК B01J 20/00, C02F 1/28 (2006.01), C02F 101/00 (2006.01). Сорбційний матеріал для вилучення радіоактивних ізотопів з водних середовищ різного походження / Краснопорова А.П., Єфімова Н.В., Юхно Г.Д., Софронов Д.С. ; [власн. : ДНУ «Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів"» ; Харків. нац. ун-т ім. В.Н. Каразіна (Україна)]. – Заявл. u201908500 від 17.07.2019 ; опубл. 27.04.2020 ; Бюл. № 8.

5. Пат. № 140690 [корисна модель] Україна, МПК B01J 20/22. Твердий екстрагент для вилучення іонів церію з водних розчинів / Краснопорова А.П., Юхно Г.Д., [та ін.] ; [власн. : Харків. нац. ун-т ім. В.Н. Каразіна]. – Заявл. u201908225 від 15.07.2019 ; опубл. 10.03.2020 ; Бюл. № 5.

ФАЗОВІ РІВНОВАГИ В СИСТЕМІ $ZrO_2-HfO_2-Sm_2O_3$ ПРИ ТЕМПЕРАТУРІ 1500°C

Юрченко Ю.В., Барцевська Г.К., Биков О.І., Корнієнко О.А., Самелюк А.В.

Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України,

yvy4all@gmail.com

Серед сучасних матеріалів з широким діапазоном використання особливе місце займають багатокомпонентні системи, що утворені оксидами цирконію, гафнію та лантаноїдів. Матеріали на основі зазначених оксидів, можуть бути використані для створення функціональної та конструкційної кераміки. Останнім часом збільшується необхідність в розробці нових керамічних матеріалів, здатних працювати в екстремальних умовах. Керамічні матеріали на основі діоксидів цирконію, гафнію та лантаноїдів є перспективними для виробництва вогнетривів, зокрема – термобар'єрних покриттів [1-3]. Діаграма стану системи $ZrO_2-HfO_2-Sm_2O_3$ є фізико-хімічною основою для створення нових перспективних матеріалів. Відомості про будову діаграми стану системи $ZrO_2-HfO_2-Sm_2O_3$ в літературі відсутні та потребують вивчення.

Методами рентенофазового та мікроструктурного аналізів досліджено фазові рівноваги в системі на основі діоксидів цирконію, гафнію та оксиду самарію та побудовано ізотермічний переріз при температурі 1500 °С. Азотнокислі солі цирконію $ZrO(NO_3)_2 \cdot 2H_2O$ та гафнію $HfO(NO_3)_2 \cdot 2H_2O$, а також Sm_2O_3 зважували в певних співвідношеннях та готували зразки з концентраційним кроком 5 мол. %. Порошки пресували в таблетки діаметром 5 та висотою 4 мм під тиском 10 МПа, без зв'язки.

Рентгенофазовий аналіз проводили за методом порошку з використанням установки ДРОН-3 при кімнатній температурі (CuK α -випромінювання, Ni фільтр). Були використані наступні режими: крок сканування складав 0.05–0.1 град, експозиція 4 у діапазоні кутів 2θ від 10 до 100°. Обробку отриманих результатів рентгенофазового аналізу проводили за даними бази Міжнародного комітету порошкових стандартів (JSPSDS International Center for Diffraction Data 1999).

Мікроструктурні дослідження проводили на зразках після термообробки з наступним поліруванням та напилення шару золота (SUPERPROBE-733, JEOL, Japan, Palo Alto, CA).

Для даного дослідження були визначені зразки, склади яких лежать на двох променях: ZrO_2 – (50 мол. % HfO_2 –50 мол. % Sm_2O_3), Sm_2O_3 – (50 мол. % ZrO_2 - 50 мол. % HfO_2).

У потрійній системі $ZrO_2-HfO_2-Sm_2O_3$ при 1500 °С утворення нових фаз не спостерігалось. При дослідженій температурі в системі на основі діоксидів цирконію гафнію та оксиду церію утворюються області гомогенності твердих розчинів: моноклінної (B) модифікації Sm_2O_3 , тетрагональної (T) та кубічної (F) модифікацій ZrO_2 , моноклінної (M) модифікації HfO_2 та упорядкованої фази зі структурою типу пірохлору $Ln_2Zr_2O_7$ ($Ln_2Hf_2O_7$), (Py).

Ізотермічний переріз потрійної системи $ZrO_2-HfO_2-Sm_2O_3$ при 1500 °С характеризується утворення неперервного ряду твердих розчинів на основі фази типу пірохлору $Ln_2Zr_2O_7$ ($Ln_2Hf_2O_7$). Параметри елементарних комірок упорядкованої фази зі структурою типу пірохлору змінюються від $a=1,0606$ нм для двофазного зразка (Py+F), що містить 0 мол. % ZrO_2 –50 мол. % HfO_2 –50 мол. % Sm_2O_3 до $a=1.0592$ нм для граничного складу твердого розчину, що містить 20 мол. % ZrO_2 –40 мол. % HfO_2 –40 мол. % Sm_2O_3 , та до $a=1.0460$ нм для зразка, що відноситься до двофазної області складу 45 мол. % ZrO_2 –27.5 мол. % La_2O_3 –27.5 мол. % Sm_2O_3 на промені ZrO_2 –(50 мол. HfO_2 % – 50 мол. % Sm_2O_3).

При вказаній температурі в системі утворюються дві області гомогенності на основі кубічних твердих розчинів зі структурою типу флюориту. Твердий розчин на основі кубічної модифікації із структурою типу флюориту існує в рівновазі з усіма фазами, що існують в дослідженій системі. Параметри елементарних комірок твердих розчинів зі структурою типу флюориту зменшуються від $a = 0.5229$ нм для двофазного зразка (Py + F), що містить 45 ZrO_2 –27.5 мол. % HfO_2 – 27.5 мол. % Sm_2O_3 до $a = 0.5184$ нм для граничного складу твердого розчину, що містить 65 мол. % ZrO_2 –17.5 мол. % La_2O_3 – 17.5 мол. % Sm_2O_3 та до

$a = 0.5070$ нм для зразка який розташований в двофазній області (Pu + T) та має хімічний склад 97 мол. % ZrO_2 – 1.5 мол. % HfO_2 – 1.5 мол. % Sm_2O_3 за перерізом ZrO_2 –(50 мол. % HfO_2 – 50мол.% Sm_2O_3).

Ізотермічний переріз ZrO_2 – HfO_2 – Sm_2O_3 при 1500 °C характеризується наявністю однієї трифазної області (Pu+M+T).

1. Vorozhtcov V. A., Stolyarova V. L., Chislov M. V, Zvereva I. A., Simonenko E. P., Simonenko N. P. Thermodynamic properties of lanthanum, neodymium, gadolinium hafnates ($Ln_2Hf_2O_7$): Calorimetric and KEMS studies // Journal of materials research – 2019 – Vol. 34 – P.3326–3336.

2. Popov V.V., Menushenkov A.P., Yaroslavtsev A.A., Zubavichus Ya.V., Gaynanov B.R., Yastrebtsev A. A., Leshchev D. S., Chernikov R. V. Fluorite-pyrochlore phase transition in nanostructured $Ln_2Hf_2O_7$ (Ln = La-Lu) // Journal of Alloys and Compounds – 2016 – Vol. 689 – P. 669–679.

3. Lopez-Cota F. A., Cepeda-Sanchez1 N. M., Diaz-Guillen J. A., Dura O. J., Lopez de la Torre M. A., Maczka M., Ptak M., Fuentes A. F. Electrical and thermophysical properties of mechanochemically obtained lanthanide hafnates // Journal of the American Ceramic Society – 2017 – Vol. 100 – P.1994–2004.

ХІМІЧНІ ПРЕПАРАТИ
В БІОЛОГІЇ ТА МЕДИЦИНІ

DIMENSIONAL CHARACTERISTICS OF MEDICAL AND BIOLOGICAL COMPOSITES BASED ON Fe₃O₄

Kusyak N.V., Ilchuk O.R., Kusyak A.P., Perehristyuk M.M.
Ivan Franko Zhytomyr State University, nkusyak@ukr.net

Physico-chemical parameters of nanoparticles used as substrates for targeted delivery of therapeutic or diagnostic agents must comply with the principles of biocompatibility and adsorption activity. The increase in biocompatibility is facilitated by the functionalization of the surface, which ensures the activity of the target system, the selectivity of the binding of nanoparticles with certain chemicals or cells. Among the groups of functionalizing agents, a group of substances of biological origin, in particular protein components, is increasingly used. This coating allows you to create areas of specific binding of nanoparticles to target cells, as well as "mask" the particle from the effects of the immune system, which helps to prolong the stay in the body. Enzymes, biomarkers, and biocatalysts can be immobilized on the surface of various nanoparticles. It is extremely important to know the processes and mechanisms of interaction of biological substances with the surfaces of nanoparticles of different nature, the impact on the conformation and functional ability of protein substances [1]. This interaction will be determined by the chemical nature of the reagents, physicochemical (surface charge, reactive groups) and geometric (size, surface structure) properties of the nanoparticle. In this regard, the question of obtaining and studying the properties of nanoparticles and composites based on them with the predicted surface remains relevant.

Among such composites, a special place belongs to magnetically sensitive on the basis of Fe₃O₄, due to their biocompatibility and controllability of form, because one of the forms of external stimulation of physical targeting of drug delivery to cells is the magnetic field. In particular, composites based on Fe₃O₄ showed immobilizing activity against IgG, which has a wide range of opsonizing and neutralizing antibodies against bacteria, viruses and other pathogenic microorganisms [2]. Fe₃O₄ and Fe₃O₄/SiO₂ were synthesized in order to immobilize normal human immunoglobulin in phosphate buffer medium and physiological saline. An important step was the study of the dimensional characteristics of the obtained composites. The size and shape of the nanoparticles were determined by using a transmission electron microscope JEOL 1200 EX. Studies of morphology and size distribution of nanoparticles were performed in aqueous solutions. Samples of TEM were diluted in deionizer water, lowering it on a carbon mesh with a carbon coating (EM Resolutions Ltd) and dried at room temperature for 12 hours.

The TEM images show Fe₃O₄ nanoparticles having a spherical shape with an average diameter of 10.8 nm without significant aggregation. As a result of the modification, there is an increase in the diameter of Fe₃O₄/SiO₂ particles to 13.08 nm without changing the shape and size distribution.

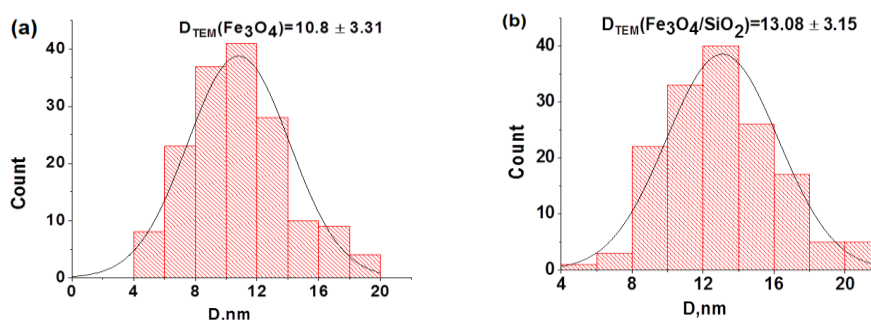


Fig. The corresponding particle size distribution Fe₃O₄ (a) and Fe₃O₄/SiO₂ (b).

1. Bayramoglu, G., Salih, B., Arica, M. Y. Catalytic Activity of Immobilized Chymotrypsin on Hybrid Silica-Magnetic Biocompatible Particles and Its Application in Peptide Synthesis//Appl. Biochem. Biotechnol. – 2019. – 190. – P. 1224–1241.

2. Jofre C.F., Regiart M., Fernández-Baldo M.A., Bertotti M., Raba J., Messina G.A. Electrochemical microfluidic immunosensor based on TES-AuNPs@Fe₃O₄ and CMK-8 for IgG anti-Toxocara canis determination //Anal. Chim. Acta. – 2020. – 1096. – P. 120–129.

ROLE OF MACHINE LEARNING IN MODERN CHEMISTRY

Tsuber V.Y.

Ukrainian Medical Stomatological Academy, victoriya_tsuber@gmail.com

Machine learning (ML) is an application of artificial intelligence in which systems are able to learn by themselves from experience without being explicitly programmed. Machine learning creates algorithms that learn automatically without human assistance. Such algorithms are able to find new knowledge in massive quantities of data. Deep learning (DL) is a principal method of machine learning. In it, deep neural networks (DNN) are built of multiple layers. The signal that goes forth through the layers enables for extraction of higher-level features from the raw data. DNN have been used in multiple domains including drug design, bioinformatics, analysis of medical images and genetic data, prediction of material properties etc. In these fields, the DNN algorithms fared as well and sometimes even better than human experts [1]. There have been multiple domains where deep learning is applied to solve long-standing problems in chemistry. The arising big chemical databases have been successfully used to decipher data patterns with DL methods in quantum chemistry [2], molecular dynamics simulations [3], identification of new drug candidates [4], protein structure prediction, *in silico* discovery of novel molecules, to name but a few.

Ab initio quantum mechanical calculations have the potential to correctly predict structure and properties of chemical compounds, but their usage is limited by their high computational cost. For complex chemical compounds, ML is successfully used to decrease the high computational cost of *ab initio* methods such as DFT [5]. For instance, the accuracy of predictions of ground state and excited state properties of organic molecules made with DL methods surpassed that of *ab initio* calculations for small molecules [6]. In it, DNN models successfully calculated not only atomization energies of the organic molecules, but also their polarizabilities, ionization potentials and electron affinities [6]. In addition, DNNs can calculate energies from molecular orbitals [7] or represent the wavefunction [8].

Another excellent achievement of application of DL methods to solving chemical problems is their precise prediction of three-dimensional shape of proteins from their amino acid sequences by Google AI branch DeepMind. Proteins are vital to all metabolic functions and perform them due to their unique 3D shapes, as “structure is function” is an axiom of molecular biology. X-ray crystallography and cryo-electron microscopy are used to decipher molecular structures of proteins. However, the structures of about 170 thousand proteins have been investigated over the last sixty years, while there are over 200 million known proteins in total in all living species [9]. The ability to predict a 3D structure of a protein solely from its amino acid sequence has been the holy grail of protein chemistry. A host of diverse computational methods have been tried to solve the problem of protein structure prediction but they generally failed to predict accurately the structure of most proteins except for the smallest ones. Since 1994, researchers participate in the Critical Assessment of Structure Prediction contest (CASP) to compare their methods for protein structure predictions. The accuracy of the predictions is measured in global distance test (GDT), that measures the degree to which a predicted structure is similar to the structure data obtained through the use of experimental methods. By 2016, GDT scores of not more than 40 out of 100 (which is an absolute match) only could be reached for complex proteins [9]. Google DeepMind’s program, called AlphaFold first participated in the 2018 CASP using DL methods. AlphaFold fared better than about a hundred other teams in 2020, with a score of more than 90 in GDT for the majority of the proteins used in the contest [10]. DeepMind’ algorithm has learned on over 170 thousand protein sequences and structures from a huge public database. The algorithm belongs to attention networks, a DL method that breaks a larger problem into its constituent parts, then merges the discrete solutions to obtain the global outcome [10].

The progress of the data-driven discoveries greatly depends on the quality and size of the growing number of public chemical databases. PubChem is one of the largest public repositories [11]. PubChem is a database of chemical species and their activities in biological assays. PubChem consists of three interconnected domains, Substance, Compound and BioAssay. The system is

maintained by the National Center for Biotechnology Information (NCBI), a component of the National Library of Medicine, which is part of the United States National Institutes of Health (NIH). Structure and compound datasets can be downloaded freely from PubChem via FTP. PubChem contains scores of data on small molecules with fewer than one hundred atoms. Another important public database is BindingDB [12]. It contains data on measured protein-ligand affinity associated with specific drug targets. BindingDB contains binding data for millions of small molecules and thousands of proteins. It also contains multiple tools with which the information can be searched, analyzed and integrated. ChEMBL [13] is a public database containing information on binding modes and functions for scores of bioactive compounds. The information is regularly extracted from the published literature, then sorted and organized so as to meet needs of researchers in drug discovery and chemical biology. Currently, the database contains millions of bioactivity measurements for more than one million compounds and thousands of protein targets.

Machine learning methods are set to attain an important place in chemistry. However, machine learning paradigm has its limitations. First and foremost, machine learning methods are known as “black box” methods, which means that performance of algorithms used in ML analyses do not have means of being tracked and explained. Secondly, high demand for computation power makes many ML methods out of reach for smaller institutions. Thirdly, ML algorithms need enormous amount of data in order to produce accurate results and therefore cannot be applied in domains where data procurement is complicated. Fourthly, results obtained in ML analysis of massive databases may reveal hidden patterns in the data but seldom bring about completely new knowledge.

1. Bengio Y., LeCun Y., Hinton G. Deep learning // *Nature*. – 2015. – 521(7553). – P.436–444.
2. Dral P. Quantum chemistry in the age of machine learning // *J. Phys. Chem. Lett.* – 2020. – 11, №6. – 2336–2347.
3. Lin S., Weitao Y. Molecular dynamics simulations with quantum mechanics/molecular mechanics and adaptive neural networks // *J. Chem. Theory Comput.* – 2018. – 14, №3. – P.1442–1455.
4. Freedman D. Hunting for new drugs with AI // *Nature*. – 2019. – 576, №7787. – P.49–53.
5. Pereira F., Xiao K., Latino D., Wu C., Zhang Q., Aires-de-Sousa J. Machine learning methods to predict density functional theory B3LYP energies of HOMO and LUMO orbitals // *J. Chem. Inf. Model.* – 2017. – 57, №1, P.11–21.
6. Montavon G., Rupp M., Gobre V., Vazquez-Mayagoitia A., Hansen K., Tkatchenko A., Müller K.-R., Anatole von Lilienfeld O. Machine learning of molecular electronic properties in chemical compound space // *New J. Phys.* – 2013. – 15, №9, P.95003.
7. Welborn M., Cheng L., Miller T. F. Transferability in machine learning for electronic structure via the molecular orbital basis // *J. Chem. Theory Comput.* – 2018. – 14. – P.4772–4779.
8. Sugawara M. Numerical solution of the Schrödinger equation by neural network and genetic algorithm // *Comput. Phys. Commun.* – 2001. – 140. – P.366–380.
9. Service R.F. “The game has changed.” AI triumphs at solving protein structures // *Science*. – 2020. – 370, №6521. – P.1144–1145.
10. “DeepMind’s protein-folding AI has solved a 50-year-old grand challenge of biology”. MIT Technology Review. Retrieved 2021-03-03.
11. Kim S., Thiessen P. A., Bolton E. E., Chen J., Fu G., Gindulyte A., Han L., He J., He S., Shoemaker B.A., Wang J., Yu B., Zhang J., Bryant S.H. PubChem Substance and Compound databases // *Nucleic Acids Res.* – 2016. – 44. – P.1202–1213.
12. Gilson M. K., Liu T., Baitaluk M., Nicola G., Hwang L., Chong J. BindingDB in 2015: A public database for medicinal chemistry, computational chemistry and systems pharmacology // *Nucleic Acids Res.* – 2016. – 44. – P.1045–1053.
13. Papadatos G., Gaulton A., Hersey A., Overington J.P. Activity, assay and target data curation and quality in the ChEMBL database // *Comput. Aided. Mol. Des.* – 2015. – 29. – P.885–896.

СЕЛЕКТИВНИЙ ІНГІБІТОР Ca^{2+} -ПОМПИ ПЛАЗМАТИЧНОЇ МЕМБРАНИ – КАЛІКС[4]АРЕН С-956 – ПІДВИЩУЄ КОНЦЕНТРАЦІЮ Ca^{2+} У МІОЦИТАХ МАТКИ

Веклич Т.О., Гольден О.В., Кардаш О.О.

Інститут біохімії ім. О.В. Палладіна НАН України, veklich@biochem.kiev.ua

Гладеньком'язова клітина (ГМК) – динамічна система, здатна швидко реагувати на зміни концентрації вільного кальцію в цитозолі ($[\text{Ca}^{2+}]_i$). У клітинах міомерія ключову функцію у точній регуляції рівня $[\text{Ca}^{2+}]_i$ та видаленні іонів Ca^{2+} з цитозолу після скорочення виконує високоафінний транспортний ензим $\text{Ca}^{2+}, \text{Mg}^{2+}$ -АТРаза плазматичної мембрани (ПМ) [1].

З огляду на важливу регуляторну роль $\text{Ca}^{2+}, \text{Mg}^{2+}$ -АТРази ПМ в ГМК матки, селективні інгібітори даного ензиму можуть знайти застосування як у сфері фундаментальних досліджень для подальшого вивчення особливостей функціонування помпи, так і у сфері прикладних досліджень для розробки фармакологічних препаратів.

Відомі на сьогодні штучні інгібітори ензиму (еозин Y, ортованадат, антагоністи кальмодуліну) хоча і є низькомолекулярними сполуками, мають обмежене використання через низьку селективність дії [2]. З цієї точки зору цікавими є каліксарени – низькомолекулярні малотоксичні супрамолекулярні сполуки, які здатні утворювати комплекси «господар-гість» із іонами металів і органічними речовинами, та є циклоолігомерами пара-заміщених фенолів та формальдегіду [3]. Численні літературні дані вказують на перспективність застосування цих макроциклічних сполук як ефекторів ензимів, імітаторів рецепторів, ензимів, стабілізаторів органічних полімерів, як платформи ДНК-чипів тощо [4].

У попередніх досліджах, ми показали, що калікс[4]арен С-956 ефективно пригнічує $\text{Ca}^{2+}, \text{Mg}^{2+}$ -АТРазну активність ($I_{0,5} = 15 \text{ мкМ}$) і практично не впливає на ензиматичні активності Na^+, K^+ -АТРази і «базальної» Mg^{2+} -АТРази ПМ міоцитів матки. Проте механізм його дії є нез'ясованим. Зважаючи на те, що Ca^{2+} -помпа ПМ відіграє важливу роль у контролі концентрації іонів Ca^{2+} у цитоплазмі ГМ важливо з'ясувати, чи буде впливати калікс[4]арен С-956 на внутрішньоклітинну концентрацію Ca^{2+} у ГМК.

Метою цієї роботи було дослідити вплив калікс[4]арену С-956 на внутрішньоклітинну концентрацію Ca^{2+} і гідродинамічний діаметр ГМК.

Калікс[4]арен С-956 (5,11,17,23-тетра(трифтор)метил-(феніл-сульфоніліміно)метиламіно-25,27-діоктилокси-26,28-дипропоксикалікс[4]арен) (рис. 1) був синтезований та охарактеризований із використанням методів ЯМР та інфрачервоної спектроскопії у відділі хімії фосфоранів Інституту органічної хімії НАН України (зав. відділом – академік НАН України В.І. Кальченко).

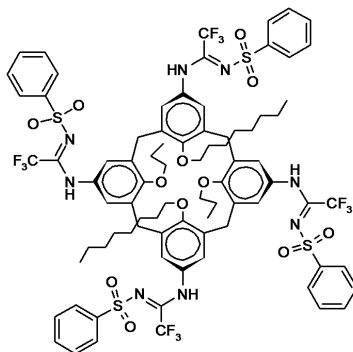


Рис. 1 Структурна формула калікс[4]арену С-956

Біохімічні дослідження були проведені у відділі біохімії м'язів Інституту біохімії ім. О.В. Палладіна НАН України (зав. відділом – академік НАН України С.О. Костерін).

Експерименти були виконані на суспензії ПМ клітин міометрія. Міоцити виділяли з матки невагітних лабораторних щурів із застосуванням колагенази та соєвого інгібітора трипсину за методом Моларда [5].

Суспензію ГМК для проведення конфокально-мікроскопічних досліджень (об'єм суспензії 100 мкл) іммобілізували протягом 2 год на предметному склі, обробленому полі-L-лізином (200 мкл), при температурі 25 °С. Неприкріплені міоцити відмивали розчином В ((мМ): 136,9 NaCl, 5,36 KCl, 0,44 K₂HPO₄, 0,26 NaHCO₃, 0,26 Na₂HPO₄, 0,03 CaCl₂, 5,5 глюкоза), після чого до іммобілізованих клітин додавали 100 мкл розчину В та обробляли зондами Hoechst 33342 (тестує ядро клітини) та fluo-4 AM (тестує зміну концентрації Ca²⁺ у клітині) для покращення навантаження у розчині також був 0,2 % Pluronic, чекали 20 хв та проводили вимірювання у режимі Multi Track на лазерному скануючому конфокальному мікроскопі LSM 510 META ("Carl Zeiss", Німеччина).

Для ідентифікації саме ГМК для аналізу обирали клітини веретеноподібної форми з чітко окресленим, профарбованим ДНК-чутливим флуоресцентним зондом Hoechst ядром. Для реєстрації відносних змін концентрації Ca²⁺ у цитоплазмі запускали серію послідовних знімків, під час якої вносили аліквоту розчину С-956 у концентрації 20 мкМ (2 мкл).

Характеристичні розміри міоцитів (гідродинамічний діаметр) оцінювали за допомогою лазерного кореляційного спектрометра "ZetaSizer-3" (Malvern Instruments, Великобританія) з обчислювальним блоком-корелятором марки computing correlator type 7032 се. Використовували гелій-неоновий лазер ЛГН-111 (Р = 25 мВт, λ = 633 нм). Діапазон вимірювання приладу становить від 1 нм до 20 мкм. Реєстрацію та статистичну обробку автокореляційної функції розсіяного від суспензії клітин лазерного опромінення проводили протягом 1 хв, 5-разово під кутом розсіювання 90°. Автокореляційну функцію обробляли за допомогою стандартної комп'ютерної програми PCS-Size mode v1.61.

Статистичний аналіз одержаних даних проводили із залученням загальновідомих стандартних методів. Кінетичні та статистичні розрахунки здійснювали в режимі програмного забезпечення MS Excel.

З метою визначення характеру впливу калікс[4]арену С-956 на концентрацію вільного кальцію в клітині було використано метод конфокальної мікроскопії. За допомогою Ca²⁺-чутливого зонда fluo-4 була встановлена зміна внутрішньоклітинної концентрації Ca²⁺ під впливом калікс[4]арену С-956. Було показано, що під дією калікс[4]арену С-956 (20 мкМ) відбувається транзйентне різке зростання флуоресцентної відповіді Ca²⁺-чутливого зонда fluo-4 AM у клітині (рис. 2).

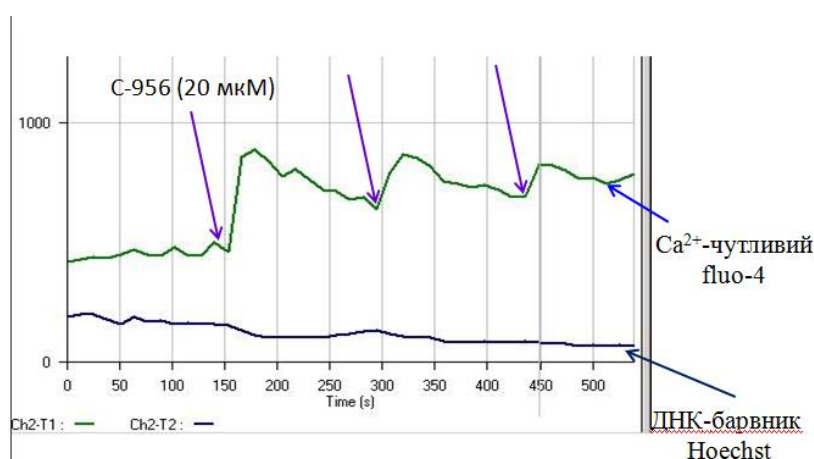


Рис. 2 Зміна флуоресценції зондів в міоциті матки, зареєстрована за допомогою конфокальної мікроскопії: ДНК-чутливого Hoechst та Ca²⁺-чутливого fluo-4 AM. Наведено результати типового експерименту

Протягом 2,5 хв концентрація Ca^{2+} знижується, що свідчить про залучення компенсаторних механізмів (типу мітохондрії, натрій-кальцієвого обмінника ПМ). За повторного внесення аліквоти калікс[4]арену С-956 концентрація Ca^{2+} у клітині зростала менше. Отже, калікс[4]арен С-956 зумовлює підвищення концентрації Ca^{2+} у ГМК.

У контролі, де використовувалася калікс[4]аренова «чаша» С-150 (20 мкМ), яка згідно з нашими результатами не мала вираженого впливу на активність Ca^{2+} , Mg^{2+} -АТРази ПМ, такого підвищення флуоресцентного сигналу fluo-4 не спостерігалось (результати не наведено). Також незмінним лишився рівень флуоресценції Hoechst, який був локалізований в основному в ядрі ГМК, та фону.

Ці результати підтвердили, що під впливом калікс[4]арену С-956 відбувається різке підвищення концентрації Ca^{2+} у клітині, яке пов'язане зі зниження базальної активності Ca^{2+} , Mg^{2+} -АТРази ПМ та саркоплазматичного ретикулулу. Разом з тим протягом наступних 100 сек концентрація Ca^{2+} знижувалась до початкового рівня, що свідчить про залучення компенсаторних Ca^{2+} -транспортувальних систем в міоцитах до релаксації кальцієвого сигналу, які мають нижчу афінність до Ca^{2+} та реагують, головним чином, на його високі концентрації в клітині (Ca^{2+} -уніпортер мітохондрій, Na^+ - Ca^{2+} -обмінник ПМ).

Вплив калікс[4]аренів на іон-транспортні системи міоцитів може детермінувати їх вплив на форму клітин. Зміну форми ГМК через зміну водно-осмотичного балансу дозволяє встановлювати лазерна кореляційна спектроскопія, за допомогою якої можливо фіксувати зміни ефективного гідродинамічного діаметру ГМК. За даними літератури визначено, що фактори, які підвищують скоротливу відповідь гладеньких м'язів, так само наочно змінюють ефективний гідродинамічний діаметр ГМК.

Результати експериментів показали, що в разі внесення утеротоніка окситоцину (100 нМ) ефективний гідродинамічний діаметр у суспензії ГМК зменшувався на $28,73 \pm 4,49$ % ($M \pm m$, $n = 6$) відносно контрольного значення (рис 3).

У контролі середнє значення ефективного гідродинамічного діаметру міоцитів становить близько 9 мкм. Ми вимірювали гідродинамічний діаметр ГМК протягом 1 хв 5 разів, звідки розраховували середнє значення. Так, у якості контролю на розчинник аплікація аліквоти ДМСО не призводила до істотних змін досліджуваного параметру – гідродинамічний діаметр змінювався на $3,5 \pm 1,6$ % ($M \pm m$, $n = 6$) відносно контролю (рис. 3). Водночас використання інгібітора Mg^{2+} , АТР-залежної Ca^{2+} -помпи ПМ ГМК калікс[4]арену С-956 (50 мкМ) призводить до зменшення гідродинамічного діаметру на $45,54 \pm 9,38$ % ($M \pm m$, $n = 6$) відносно контрольного значення (рис. 3).

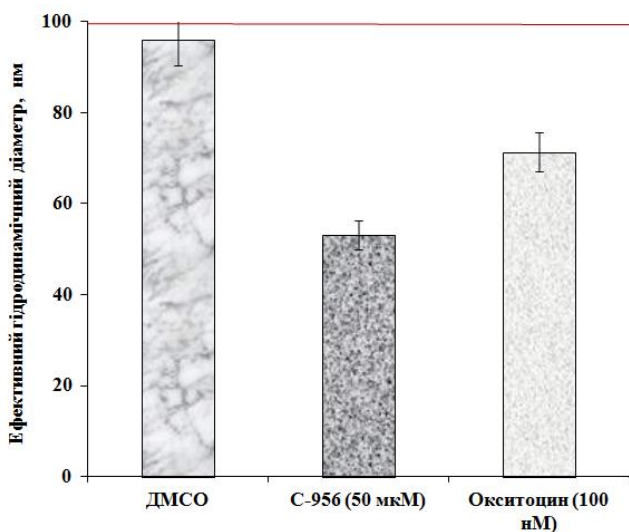


Рис. 3 Зміна гідродинамічного діаметру ГМК за дії різних ефекторів ($M \pm m$, $n = 6$)

За 100 % прийнято контрольне значення гідродинамічного діаметру ГМК за відсутності дії ефекторів.

Отже, калікс[4]арен С-956 зменшує ефективний гідродинамічний діаметр ГМК подібно до дії утеротоніка окситоцину. Подібна зміна гідродинамічного діаметру може трактуватися як сукупність подій, які супроводжують процеси скорочення/розслаблення ГМК, а саме зміну водно-осмотичного балансу, перебудови елементів цитоскелету. Оскільки раніше було показано, що зміна гідродинамічного діаметру ГМК під впливом скоротливих агентів корелює з станом скорочення гладеньких м'язів, то подібні результати свідчать про перспективні можливості використання калікс[4]арену С-956 як регулятора скоротливої активності гладеньких м'язів матки.

Перевіряючи спорідненість зазначеного ензиму до АТР, іонів Mg та Ca в залежності від концентрації калікс[4]арену С-956, а також його вплив на кооперативний ефект та на максимальну швидкість гідролізу АТР, ми встановили, що у всіх трьох випадках спостерігалось суттєве зменшення максимальної швидкості гідролізу АТР, що у поєднанні з відсутнім впливом на константи спорідненості свідчить про неконкурентний механізм інгібування калікс[4]ареном С-956 Ca^{2+} , Mg^{2+} -АТРазної активності (дані не наведені).

Отже, отримані результати свідчать, що калікс[4]арен С-956 – перспективний ефективний селективний інгібітор Ca^{2+} , Mg^{2+} -АТРазної активності, який зумовлює підвищення внутрішньоклітинної концентрації Ca^{2+} та зменшення гідродинамічного діаметру. Вказаний інгібітор матиме важливе значення для з'ясування мембранних механізмів катіонного обміну у гладеньких м'язах, зокрема, під час вивчення ролі ПМ в забезпеченні електромеханічного спряження в них, а також в регуляції іонного гомеостазу в гладеньком'язових клітинах.

Автори вдячні академіку НАНУ проф. С.О. Костеріну за обговорення результатів дослідів та творчі дискусії.

1. Костерін С.О., Бабіч Л.Г., Шликов С.Г., Данилович Ю.В., Векліч Т.О., Мазур Ю.Ю. Біохімічні властивості та регуляція Ca^{2+} -транспортувальних систем мембранних структур гладеньком'язових клітин // Монографія. – Київ: – Наукова Думка, 2016. – 210 с.

2. Векліч Т.О., Мазур Ю.Ю., Костерін С.О. Mg^{2+} , АТР-залежна кальцієва помпа плазматичної мембрани гладеньком'язових клітин. II. Регуляція активності // Укр. біохім. журн. – 2015. – 87, № 2. – С. 5-25.

3. Костерін С.О., Кальченко В.І., Векліч Т.О., Бабіч Л.Г., Шликов С.Г. Калікс[4]арени як модулятори АТР-гідролізних систем гладеньком'язових клітин // Монографія. – Київ: – Наукова Думка, 2019. – 266 с.

4. Rodik R.V., Boyko V.I., Kalchenko V.I. Calixarenes in Biotechnology and Bio-Medical Researches // Front. Med. Chem. – 2016. – 8. – P. 206-301.

5. Mollard P., Mironneau J., Amedee T., Mironneau C. Electrophysiological characterization of single pregnant rat myometrial cells in short-term primary culture // Am. J. Physiol: Cell Physiology. – 1986. –19(1). – P. 47-54.

ДОСЛІДЖЕННЯ СТАБІЛЬНОСТІ РОЗЧИНУ ГЛЮКОЗИ ДЛЯ ІНФУЗІЙ

Владимирова Т.Ю., Лесишина Ю.О.

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

Як відомо, глюкоза посилює перебіг окисно-відновних процесів в організмі, поліпшує антитоксичну функції печінки, покращує скорочувальну діяльність міокарду, є легкозасвоюваним джерелом енергії.

У медичній практиці застосовують водні розчини глюкози різної концентрації, які використовують для ін'єкцій при гіпоглікемії, нестачі вуглеводного харчування, інтоксикаціях печінки, геморагічному діатезі, зневодненні, колапсі, шоку тощо. 5% розчин глюкози ізотонічний плазмі крові, 10%- і 20%-ві розчини підвищують осмотичний тиск крові і збільшують діурез. Як лікарські засоби застосовують розчини глюкози аптечного виготовлення, які готують в асептичних умовах масо-об'ємним способом, і промислового виробництва.

Мета роботи полягала у вивченні стабільності 5%-ого водного розчину глюкози для ін'єкцій вітчизняного виробництва (без додавання стабілізатора) протягом 1 року. Лікарський засіб зберігався у скляному контейнері об'ємом 250 мл, закупореному резиною пробкою, обтиснутою алюмінієвим ковпачком за температури $(25 \pm 2)^\circ\text{C}$ та відносній вологості $(60 \pm 5)\%$

Дослідження включало визначення таких показників як: прозорість, кольоровість; значення рН розчину – потенціометричним методом, вміст 5-гідроксиметилфурфуролу (5-ГМФ) і супровідних речовин – спектрофотометричним методом за величиною оптичної густини (А) розчину; наявність механічних включень (видимі і невидимі частки), стерильність, а також кількісне визначення глюкози у розчині – поляриметричним методом, відповідно вимог нормативної документації.

Результати дослідження наведені в таблиці.

Термін зберігання	Прозорість	Кольоровість	pH	5-ГМФ, А	Глюкоза, г/мл (%)	Механічні включення	Стерильність
ГП	прозорий	Не інтенсивний за еталоном	4,64	0,0048	0,0499	Витримує вимоги	стерильний
3 місяці	прозорий	Не інтенсивний за еталоном	4,62	0,0076	0,0500	Витримує вимоги	стерильний
6 місяців	прозорий	Не інтенсивний за еталоном	4,46	0,0179	0,0500	Витримує вимоги	стерильний
9 місяців	прозорий	Не інтенсивний за еталоном	4,38	0,0212	0,0501	Витримує вимоги	стерильний
12 місяців	прозорий	Не інтенсивний за еталоном	4,25	0,0274	0,0500	Витримує вимоги	стерильний

Таким чином, у ході дослідження стабільності 5%-го розчину глюкози для інфузій, виготовленого в асептичних умовах, було встановлено, що у процесі зберігання лікарського засобу протягом 1 року за означених умов не спостерігається значних змін фізичних, фізико-хімічних, фармако-технологічних та біологічних показників якості, значення яких відповідає встановленим нормам за розробленим проектом методів контролю якості.

ПОХІДНІ ФОРМАЗАНІВ В ЯКОСТІ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ РЕЧОВИН

Дістанов В.Б., Мироненко Л.С., Породнов А.О., Дзьобань Т.В.

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»,

distanov@ukr.net

Відомо, що формазани та їх похідні володіють неабиякою біологічною активністю в якості антибактеріальних та противірусних препаратів тощо.

Значна частина досліджень присвячена дії формазанів на грампозитивні (*B. subtilis*, *M. luteus*, *B. sphaericus*, *S. aureus*) та грамнегативні (*C. violaceum*, *K. aerogenes*, *P. aeruginosa*, *E. coli*, *K. pneumoniae*, *S. Paratyphi A*) [1-4].

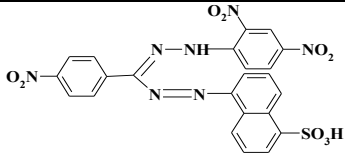
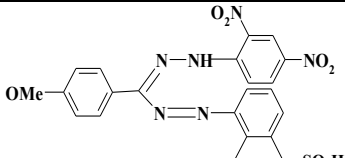
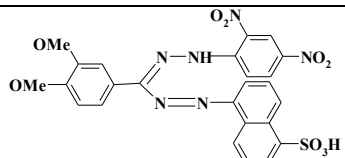
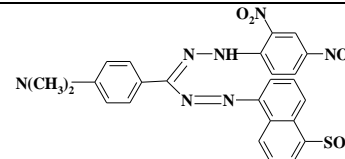
Основна складність розробки антибактеріальних та противірусних препаратів пов'язана з варіацією вірусу, його мутагенністю та призвичаюватися до антибіотиків.

Зараз гостро стоїть проблема лікування людини після хірургічних втручань або після опікових травм. Перепоною цього є деякі бактерії (в першу чергу *P. Aeruginosa*, *E. Coli*), які заважають загоюванню поранених місць та не дають можливості скорішого одужання людини.

Як показали наші попередні дослідження [5-6], деякі формазани являються перспективними для боротьби з наступними культурами: *P. Aeruginosa*, *E. coli*, *S. aureus*, *B. subtilis*, *C. Albicans* (таблиця 1).

Таблиця

Бактеріостатичний ефект синтезованих формазанів

Формазан	Зона затримки мікробної діяльності, мм				
	Культура				
	<i>P.aeruginosa</i>	<i>E.coli</i>	<i>S.aureus</i>	<i>B.subtilis</i>	<i>C.albicans</i>
	19	21	22	17	22
	21	22	23	18	21
	24	23	25	21	23
	23	23	24	21	22
Std - стандартна доза пре-парату ципрофлоксацину (100 мкг/диск)	21	22	20	21	21

Отримані нами результати показують, що такі сполуки в порівнянні з стандартними зразками (Std - стандартна доза препарату ципрофлоксацину (100 мкг/диск)) та результатами

закордонних дослідників, знаходяться на рівні, а в деяких випадках перебільшують показники бактеріостатичної ефективності інших похідних формазанів.

Проведені нами розрахунки біологічної активності за програмою PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances) похідних формазану – солей тетразолію (рисунок 1) та їх металокомплексів (рисунок 2) – довели, що вони також володіють неабиякою біологічною активністю (з імовірністю 60-80 %) в якості противірусних, антибактеріальних, протитуберкульозних препаратів тощо.

При синтезі солей тетразолію варіювались замісники в альдегідній частині формазану (NO_2 , OCH_3 , $\text{N}(\text{CH}_3)_2$, Hal). При отриманні металокомплексів використовувались солі різних металів (Cu , Zn , Ni , Co , Fe),

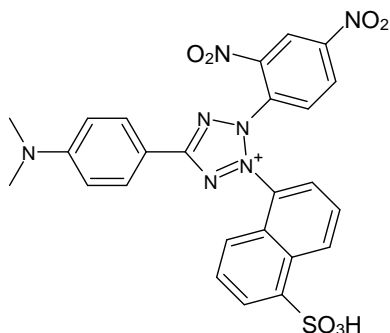


Рис. 1 Структурна формула 1-(4-диметиламінофеніл)-3-(2,4-динітрофеніл)-2-(5-сульфо-нафтален-1-іл)-тетразолію

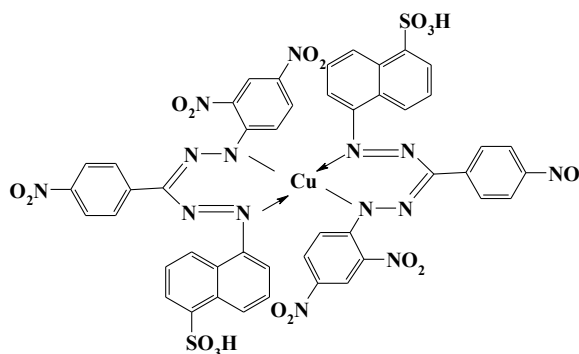


Рис. 2 Структурна формула металокомплексу 1-(5-сульфонафтил)-3-(4-нітрофеніл)-5-(2,4-динітрофеніл)формазану

Попередні дослідження показали, що синтезовані солі тетразолію та металокомплекси формазанів також мають гарну антимікробну активність [7].

1. Mang Shi et al. Redefining the invertebrate RNA virosphere // *Nature*. – 2016. – 540, – P. 539–543.
2. Gurusami Mariappan, Rejaul Korim, Nand Madhwa Joshi, Faruk Alam, Rajib Hazarika, Deepak Kumar, Tiewlasubon. Synthesis and biological evaluation of formazan derivatives. *Journal of Advanced Pharmaceutical Technology & research*. – 2010. – vol. 1, issue 4. – P. 396-400.
3. Revanasiddappa B. C., Subrahmanyam E. V. S. Synthesis and biological studies of some novel formazans // *Oriental Journal of chemistry*. – 2010. – vol. 26(1). – P. 243-246.
4. Amarish B. Samel, Nandini R. Pai Synthesis and Antimicrobial Activity of some novel Formazan Derivatives // *Journal of Chemical and Pharmaceutical Research*. – 2010. – vol. 2, № 4. – P. 60-67.
5. Дістанов В. Б., Немченко Н. В., Фалалєєва Т. В., Мироненко Л. С. Синтез нових похідних формазанів – потенційних біологічно активних речовин. Тези доповідей IV Всеукраїнської науково-практичної конференції «Актуальні проблеми науково-промислового комплексу регіонів – 2018». Рубіжне: Інститут хімічних технологій Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля, 2018. С. 26-30.
6. Дістанов В.Б., Голубенко Є.А., Пунько В.С., Івченко П.П., Мироненко Л.С. Синтез та дослідження противірусних препаратів // *Матеріали IV всеукраїнської наукової конференції «Теоретичні та експериментальні аспекти сучасної хімії та матеріалів ТАСХ-2020»*, Дніпро, С. 207-210
7. Way2Drug – Predictive Services / PASS Online. URL: <http://www.pharmaexpert.ru/passonline/index.php>.

ВИЗНАЧЕННЯ АНТИРАДИКАЛЬНОЇ АКТИВНОСТІ ПРОПОЛІСУ ЗА МЕТОДОМ ДФПГ

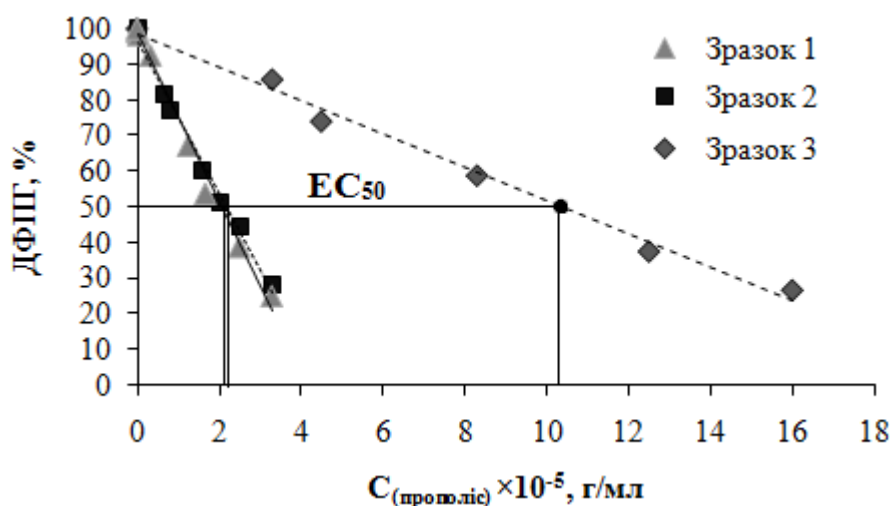
Зосенко О.¹, Позднякова А.¹, Куц О.^{1,2}

¹Донецький національний університет імені Василя Стуса, o.zosenko@donnu.edu.ua

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

Зростання попиту на натуральні продукти як альтернативу лікарським препаратам викликає інтерес до бджолиних продуктів, а саме до прополісу. Прополіс - це загальна назва для складної смолистої суміші, збагаченої слинними і ферментативними секретами бджіл. У своєму складі прополіс містить фенольні кислоти, флавоноїди, терпени, ліпідні сполуки та додаткові компоненти, такі як мікроелементи, вітаміни, білки, амінокислоти і цукри. Прополіс є джерелом природних антиоксидантів і як харчова добавка сприяє здоров'ю людини та запобігає захворюванням, пов'язаним з процесами окислення. Антиоксидантні властивості прополісу обумовлені наявністю у складі продукту поліфенольних компонентів, похідних кофеїнової кислоти та флавоноїдів.

У роботі досліджено зразки прополісу з Вінниччини (Зразок 1), Донеччини (Зразок 2), Івано-Франківщини (Зразок 3), Україна. Для оцінки антирадикальної активності (АРА) продукту використовували легкодоступний та широко розповсюджений метод з 2,2-дифеніл-1-пікрілгідразил радикалом (ДФПГ•), який заснований на вивченні реакції знебарвлення



стабільного хромоген-радикала ДФПГ• антиоксидантом (АО). Кінетику його витрачання досліджували методом УФ-спектроскопії при $\lambda_{\max}=520$ нм. УФ-спектри реєстрували на спектрофотометрі Analytic Jena SPECORD 50 з термостатуванням кювет (30.0 ± 0.1 °С). Визначення кількісної оцінки АРА ґрунтується на встановленні ефективної

Рис. Залежність глибини перетворення ДФПГ•, % за 30 хв від концентрації зразків прополісу при 30 °С та 520 нм

концентрації EC_{50} . В якості стандартного АО для порівняння АРА було

використано кверцетин, який відноситься до класу флавонолів. Концентрація прополісу, за якою відбувається знебарвлення вихідного розчину ДФПГ• на 50 % (EC_{50}) наведена в таблиці.

Таблиця

Значення ефективної концентрації EC_{50} для досліджених зразків

Досліджувана сировина	Стандарт (кверцетин), г/мл	Зразок 1, г/мл	Зразок 2, г/мл	Зразок 3, г/мл
EC_{50}	$(0,25 \pm 0,05) \times 10^{-5}$	$(2,07 \pm 0,05) \times 10^{-5}$	$(2,17 \pm 0,05) \times 10^{-5}$	$(10,34 \pm 0,05) \times 10^{-5}$

Порівняння отриманих значень EC_{50} вказує, що зразки прополісу з Вінниччини та Донеччини проявляють вищу АРА порівняно з прополісом з Івано-Франківщини. Наведені в літературі дані для інших регіонів і країн вказують на значну антиоксидантну активність досліджених зразків і свідчать про їх медико-біологічну цінність.

СПЕКТР ЗАСТОСУВАННЯ АНТИОКСИДАНТІВ

Зубрицька Л.О., Зьолко Т.В.

Житомирського базового фармацевтичного фахового коледжу,

zubrytska.liudmyla@pharm.zt.ua

Антиоксиданти – це поліфункціональні сполуки природного або синтетичного походження, які є інгібіторами вільнорадикального окиснення органічних речовин мономолекулярним киснем. Вони можуть існувати в організмі людини (біоантиокисники) або надходити ззовні [1].

Унаслідок хімічних реакцій, які постійно відбуваються в організмі, продуктами взаємодії окремих речовин можуть бути вільні радикали. Вони постійно утворюються у нашому організмі, руйнуючи здорові клітини. Вільні радикали – це атоми або групи атомів, які спричиняють ушкодження клітини, порушують функції імунної системи, що призводить до інфекційних і різних дегенеративних захворювань, у тому числі раку і серцево-судинних хвороб. Учені вважають, що ушкодження, які зумовлюються різними радикалами, є основою процесів старіння. Характерною особливістю вільних радикалів є висока хімічна активність, зумовлена наявністю вільних валентностей (неспарених електронів). Найдоступнішими способами нейтралізації вільних радикалів в організмі є: раціональне харчування, вживання вітамінів, правильне фізичне навантаження тощо [2].

До антиоксидантів належить велика кількість органічних сполук. На сьогоднішній день відомо більше 8 тисяч сполук, які по-різному діють на клітини організму.

Є 2 групи антиоксидантів: до першої належать речовини, які гальмують окиснювальні процеси в організмі; друга – нейтралізуюча, передає електрони вільному радикалу [3].

До недавнього часу існувала думка про те, що антиоксиданти містяться тільки в овочах і фруктах. Дослідження багатьох вчених показали, що багаті антиоксидантами практично всі рослинні продукти. Поширення антиоксидантів серед рослинного світу пояснюється тим, що в самих рослинах ці молекули виконують захисні функції, допомагаючи рослині боротися з шкідниками і ультрафіолетовим випромінюванням.

У кожному організмі існує антиоксидантна система захисту, яка контролює та гальмує вільнорадикальні реакції, зокрема вільнорадикальне перекисне окиснення, яке виникає в організмі під дією несприятливих факторів (стрес, шкідливі звички, несприятлива екологія тощо). Умовно антиоксидантну систему захисту поділяють на дві системи: ферментативну і неферментативну. Каталаза, супероксиддисмутаза, глутатіонредуктаза та інші ензими відносяться до ферментативної системи. Неферментативна група складається з жиророзчинних вітамінів А, К, Е, водорозчинних вітамінів С і РР, стеринів, каротиноїдів, біогенних амінів тощо. Наявність ферментативної та неферментативної систем забезпечує знищення радикалів та пероксидів, які непотрібні для організму людини [4].

Кожен лікарський препарат має свій термін придатності. Внаслідок процесу окиснення змінюється якість препарату, розкладаються компоненти ліків, можуть утворюватися токсичні сполуки. Лікарські препарати, які мають у своєму складі вітаміни, ненасичені жири, сполуки з альдегідними, фенольними групами є найбільш чутливі до окиснення. Щоб збільшити термін придатності ліків і затримати реакції окиснення, до лікарських препаратів додають антиоксиданти, які повинні відповідати наступним вимогам: бути безпечними, термостійкими, не мати подразливої дії, не викликати алергічних реакцій, не мати специфічного запаху і смаку, бути сумісними з іншими інгредієнтами лікарського засобу тощо. Введення антиоксидантів до складу лікарських препаратів не тільки збільшує їх термін придатності, а й покращує певні властивості ліків (наприклад, термостійкість). Фармацевтичне виробництво використовує як антиоксиданти для ліпофільних систем наступні сполуки: аскорбілпальмітат, аскорбілстеарат, бутилоксіанізол, бутилоксітолуол тощо. Доведено, що в лікарських препаратах, які не мають у своєму складі антиоксидантів, реакції окиснення відбуваються активніше і швидше.

Антиоксиданти широко використовуються в косметології. Вони входять до складу косметичних засобів для збільшення їх термінів придатності та для запобігання окиснення деяких компонентів косметики для догляду за обличчям. Серед антиоксидантів, які можуть використовуватися в косметології можна виділити: α -токоферол(вітамін Е), ретинол(вітамін А), тіотриазолін (морфоліній 3-метил-1,2,4-триазоліл-5-тіоацетат) тощо. Тіотриазолін виявляє антиоксиданту, мембраностабілізуючу, регенеруючу дії. Ця сполука гальмує пероксидне окиснення ліпідів, чинить захист клітин від негативного впливу вільних радикалів, зменшує інтенсивність запального процесу шкіри [6].

У косметології застосовується антиоксидант – олія з гранатних кісточок, яка у своєму складі містить велику кількість токоферолів, що надає клітинам тканин пружності, запобігає утворенню зморшок і сприяє загоєнню ран.

Природним джерелом вітаміну Е (представлений у вигляді α -токоферолу) є олія із зародків пшениці. Крім токоферолу до її складу входять: поліненасичені жирні кислоти, каротиноїди, фітостерини, цинк, залізо, сірка, вітаміни А, РР, вітаміни групи В, фолієва кислота, лецитин тощо. Олія із зародків пшениці має позитивний вплив на організм: стимулює скорочувальну активність міокарда, нормалізує ендокринний баланс, є корисною при захворюваннях органів травної системи[7].

У харчовій промисловості антиоксиданти застосовують для продовження терміну придатності, захисту від швидкого псування продуктів, яке виникає внаслідок реакцій окиснення та під дією мікроорганізмів.

Е306 (суміш токоферолів), Е 307 – антиоксиданти, які уповільнюють процеси окиснення продуктів харчування, що у великих кількостях містять олії та жири.

Е321 або бутилгідрокситолуол – антиоксидант, який використовується у харчовій промисловості, косметології, фармацевтичній промисловості. Бутилгідрокситолуол-синтетичний аналогом вітаміну Е. Свою антиоксидантну властивість проявляє внаслідок гальмування процесів самоокиснення ненасичених органічних сполук киснем та іншими пероксидними радикалами[8].

Отже, антиоксиданти мають широкий спектр дії та застосування у багатьох сферах різної діяльності; є важливими сполуками для нормального функціонування організму людини.

1. Деримедвідь Л.В., Самохін А.О. Антиоксиданти. Режим доступу: <https://www.pharmencyclopedia.com.ua/article/2826/antioksidanti>

2. Бойчук І.Д., Зубрицька Л.О. «Органічна хімія» – Київ, ВСВ «Медицина», 2013 – С.29

3. Антиоксиданти в косметиці і не тільки. Режим доступу: <https://sapone.com.ua/blog/antioksidanti-v-kosmetitsi>

4. Губерук В.О., Гуфрій Д.Ф. Перекисне окиснення ліпідів та антиоксидантна система захисту організму. Науковий вісник ЛНУВМБТ імені С.З. Гжизького. – 2008. – Т. 10. №3(38). Ч 1.– С.51-52.

5. Даценко, Я. А. Обґрунтування концентрації антиоксиданта в емульгелі на основі олійних екстрактів // Науковий підхід до сфери практичної косметології: актуальні питання й тренди : матеріали Міжнар. наук.-практ. конф., м. Харків, 11 берез. 2020 р. – Харків : НФаУ, 2020. – С. 65-66.

6. Марченко В.С., Кричківська Л.В., Белінська А.П., Обґрунтування комплексу антиоксидантів для стабілізації косметичного крему. Вісник НТУ «ХП». – 2015– С. 90-91.

7. Ониськів В., Покотило О., Властивості та жирно кислотний склад нетрадиційних олій. Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя. – 2014. - С. 171.

8. Частило Б.С., Грабко Н.В., Аналіз екологічних аспектів споживання кондитерських виробів за вмістом в їх складі харчових добавок. Бакалаврська кваліфікаційна робота. Одеський державний екологічний університет. – 2020. – с. 29-30.

ОТРИМАННЯ І ХАРАКТЕРИЗАЦІЯ НОВИХ БІОМАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ ІОДИДУ ХІТОЗАНУ З БІОЛОГІЧНО АКТИВНИМИ БАРВНИКАМИ

Калінкевич О.В.¹, Скляр А.М.², Калінкевич О.М.¹, Чіванов В.Д.¹, Зінченко Є.І.¹, Трофименко Я.В.¹, Данильченко С.М.¹

¹Інститут прикладної фізики НАН України, oksana.kalinkevich@gmail.com

²Сумський державний педагогічний університет

Барвники та полімери - два важливі класи органічних сполук із широким промисловим застосуванням. Ці речовини відіграють важливу роль у фармацевтичній, харчовій та текстильній промисловості. Вони впливають на багато біологічних процесів. Вивчення взаємодії барвників та полімерів є важливим як для їх практичного застосування, так і для розуміння фундаментальних проблем хімії. Полімери мають велике значення для очищення води, забрудненої барвниками [1]. Комбінації полімерів мають великий потенціал для виготовлення високоефективних матеріалів. Наприклад, полімери, що містять барвники, сьогодні широко використовуються в медицині, фарбуванні, аналітиці та процесах газового розділення. Оскільки ці застосування очевидно пов'язані з природою барвника, який входить до відповідних полімерів, спорідненість деяких полімерів до барвників використовується для очищення стічних вод після процедури фарбування [2]. Барвники в полімерних матрицях використовуються для створення органічних світлодіодів [3], для виготовлення функціональних оптичних матеріалів, у фотоелектриках та для створення гібридних сонячних елементів, датчиків [2, 4, 5]. Полімерні композити, що містять органічні барвники, мають широке застосування в оптоелектроніці, оптичних волокнах, датчиках, аерокосмічних пристроях, медицині та промисловості.

Хітин - другий за поширеністю у природі біополімер після целюлози, а хітозан - це катіонний полісахарид, який утворюється з хітину шляхом його деацетилювання і складається переважно з повторюваної одиниці - (1,4) -2-аміно-2-дезоксид-Д-глюкози (або Д-глюкозамін). Хітозан широко використовується як сорбент металів та органічних сполук (включаючи барвники), у біомедицині, у тканинній інженерії, як носій ліків та генів, як антибактеріальний засіб, у текстильній промисловості, для обробки тканини та паперу, у харчовій промисловості як добавка до їжі та харчових плівок тощо [6-9]. Нові сполуки для фарбування отримують на основі хітозану та його похідних у поєднанні з різними барвниками. Природні та синтетичні барвники є предметом інтенсивних досліджень. Хімічна модифікація барвників є ефективним і недорогим способом поліпшення їх властивостей, підвищення біосумісності та антибактеріальної активності.

Фуксин - трифенілметановий барвник. Основний фуксин (пурпуровий) є протигрибковим засобом і активний щодо стафілококів. Традиційний розчин Кастеллані містить борну кислоту, фенол, фуксин, резорцин, ацетон, спирт і воду. Про антимікробні властивості фуксину та фарби Кастеллані відомо давно. Але є нові цікаві застосування фуксину. Поєднання барвника Кастеллані як антисептика з хітозаном раніше не розглядалося.

Метиленовий синій (МС) - основний тіазиновий барвник з досить цікавими властивостями та місцями застосування в різних областях. МС використовується як антисептик з моменту свого першого відкриття в 1876 році, і зараз він продовжує знаходити нові застосування як антимікробний засіб. Використання МС у нанотехнологіях базується на його флуоресценції, окислювально-відновному потенціалі та властивостях агрегації.

Виходячи з вищезазначеного, надзвичайно цікаво отримувати гібридні матеріали на основі МС та хітозану, біологічного полімеру, який також широко використовується і має ряд корисних властивостей. Водночас даних про створення таких матеріалів надзвичайно мало. В основному хітозан та хітин, а також їх похідні розглядаються як сорбенти МБ та засоби очищення навколишнього середовища від барвників.

В результаті нескладної процедури синтезу були отримані нові композиційні матеріали на основі йодиду хітозану і органічних барвників (метиленовий синій і фуксин в складі

фукорцин (рідина Кастеллані), що мають антибактеріальні властивостями і біологічну активність. Отримані матеріали були охарактеризовані методами скануючої електронної мікроскопії, рентгенівської дифракції, термопрограмованої десорбційної мас-спектрометрії, ІЧ-спектроскопії, спектроскопії видимого і УФ світла. Були досліджені властивості набухання, розчинності, виходу барвників в різних середовищах.

Наша робота покликана вдихнути нове життя у добре відомі людству органічні барвники з біологічною активністю. Композиційні матеріали на основі хітозану, що містять органічні барвники та йод, можуть бути основою структурованих пористих губок та плівок і використовуватися в різних галузях (наприклад, «зелена» електроніка, біомедичні застосування тощо).

1. Mahbuba S., Shamima K.A.A., Rub M.A., Khan M.A., Hoquea A., Asiri A.M. Interaction of polymer (polyvinylpyrrolidone) with azo dye (reactive yellow): a physicochemical study // *Russian Journal of Physical Chemistry A*. – 2019. – 93, №13. – P. 2718–2725.

2. Fleischmann C., Lievenbrück M., Ritter H. (2015) Polymers and dyes: developments and applications // *Polymers*. – 2015. – 7. – P. 717-746.

3. Pschenitzka F., Sturm J.C. Solvent-enhanced dye diffusion in polymer thin films for color tuning of organic light-emitting diodes // *Appl. Phys. Lett.* – 2001. – 78, № 17. – P. 2584-2599.

4. Mohd-Nasir S.N.F., Sulaiman M.Y., Ahmad-Ludin N., Ibrahim M.A., Sopian K., Mat-Teridi M.A. Review of polymer, dye-sensitized, and hybrid solar cells // *International Journal of Photoenergy*. – 2014.

5. Mehedi Hasan M., Islam D., Ur Rashid T. (2020) Biopolymer-based electrolytes for dye-sensitized solar cells: a critical review // *Energy & Fuels*. – 2020. – 34, № 12. – P. 15634-15671.

6. Goy R.C., de Britto D., Assis O.B.G. A review of the antimicrobial activity of chitosan // *Polímeros: Ciência e Tecnologia*. – 2009. – 19, № 3. – P. 241-247.

7. Yilmaz Atay H. Antibacterial activity of chitosan-based systems // Jana S. and Jana S. (eds) *Functional chitosan*. – Singapore: Springer, 2019.

8. Ahsan S.M., Thomas M., Reddy K.K., Sooraparaju S.G., Asthana A., Bhatnagar I. Chitosan as biomaterial in drug delivery and tissue engineering // *Int. J. Biol. Macromol.* – 2018. – 110. – P. 97-109.

9. Croisier F., Jérôme C. Chitosan-based biomaterials for tissue engineering // *European Polymer J.* – 2013. – 49. – P. 780–792.

СИНТЕЗ І ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ФЛУОРЕСЦЕНТНИХ КОН'ЮГАТІВ ГЛЮКОЗАМІНУ З ВОДОРОЗЧИННИМИ ПОХІДНИМИ 3-ТІАЗОЛІЛКУМАРИНІВ

Кузів Я.Б., Дубей І.Я.

Інститут молекулярної біології і генетики НАН України, ya.b.kuziv@imbg.org.ua

Флуоресцентні кон'югати цукрів є важливими інструментами біологічних досліджень і медичної діагностики [1]. Зокрема, їх використовують для вивчення клітинного транспорту глюкози [2], візуалізації пухлин [3], забарвлення клітин [4, 5], дослідження локалізації глюкозних транспортерів на клітинній мембрані [6].

Раніше ми синтезували водорозчинні похідні 3-гетарилкумаринів **1-3**, які придатні для ковалентного мічення біомолекул [7]. В даній роботі отримали кон'югати D-глюкозаміну з цими флуоресцентними барвниками, використовуючи метод активованих естерів. Активацію COOH-групи монокалієвих солей барвників проводили N,N'-дициклогексилкарбодіімідом (DCC) у присутності N-гідрокисукциніміду (NHS) з утворенням N-оксисукцинімідних естерів. Оскільки K⁺-солі сполук **1**, **2** та **3** нерозчинні в ДМФ, додавали двократний молярний надлишок дибензо-18-краун-6-ефіру відносно іону K⁺. Подальша селективна реакція активованих естерів з аліфатичною аміногрупою D-глюкозаміну (1.2 екв. відносно барвника) з утворенням амідного зв'язку проводилась у суміші водний буфер–ДМФ 1:7 (Схема 1). Кон'югати **4-6** виділяли обернено-фазовою хроматографією на триметилсиліл-силікагелі в системі CH₃CN–триетиламонійбікарбонат (ТЕАВ). Кон'югати добре розчинні у воді.

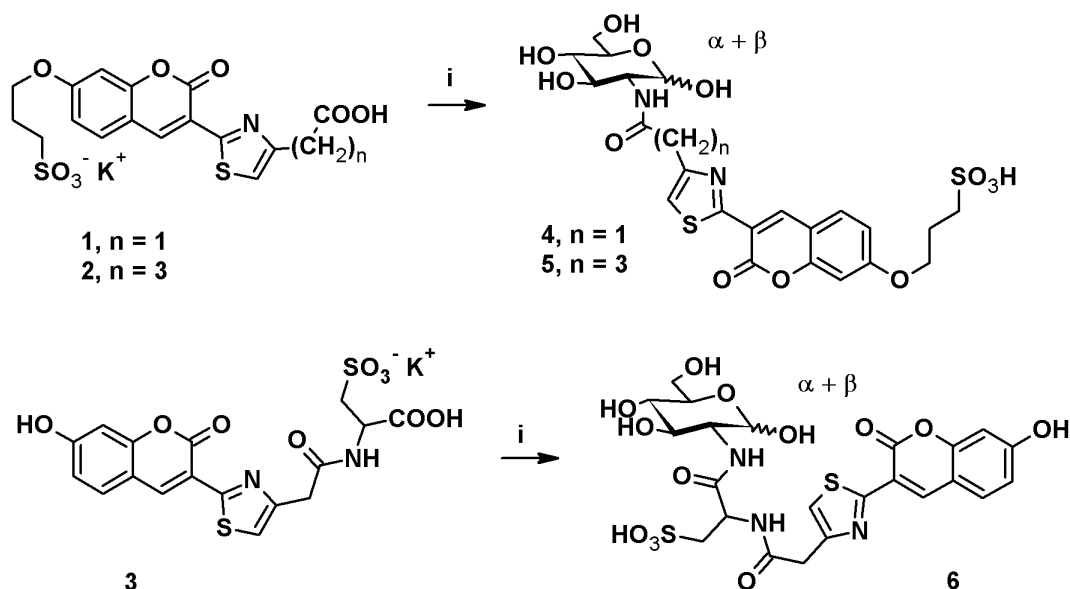


Схема 1. i. 1. DCC, NHS, дибензо-18-краун-6-ефір, ДМФ; 2. GlcN×HCl, ДМФ-ТЕАВ (рН 8.0).

Дані ¹H-ЯМР та LC-MS свідчать, що всі кон'югати є сумішами двох ізомерів, ймовірно, α- та β-аномерів, аналогічно до кон'югатів гідрофобних кумаринів [5]. Так, у ЯМР-спектрах деякі протони (NH, 4-Н (тіазол), 1'-Н, 1'-ОН) предсталені у вигляді двох окремих сигналів (4-Н-сигнал кумарину також частково розділяються). На хроматографічному етапі LC-MS-аналізу кожен кон'югат елюється двома піками з невеликою різницею часу утримання (0,1-0,2 хв) і однаковою молекулярною масою (*m/z*). Співвідношення ізомерів сполук знаходиться в межах від (1:4) до (1:9).

Спектрально-флуоресцентні властивості глюкозамінових кон'югатів вивчали в MeOH та фосфатних буферах (ФБ, 0,1 М, рН 4,75 та 10,5). Так, кон'югати **4** і **5** у метанолі мають близькі коефіцієнти екстинкції (ϵ) та λ_{\max} до **1** та **2** відповідно. Однак кон'югація по-різному впливає на квантовий вихід флуоресценції (Φ): він зростає у випадку **4** і зменшується для **5** у порівнянні з відповідними вільними барвниками. У фосфатних буферах спектральні

власливості **4** та **5** близькі до **1** та **2** відповідно, за винятком Φ , значення яких у кон'югатів вищі на $\sim 0,2$. У метанолі сполука **6** має близькі оптичні властивості до барвника **3**, за винятком Φ , який у кон'югату менший на $\sim 0,3$. У ФБ із рН 10,5 фенолятна форма цих кон'югатів також має близькі спектральні властивості до фенолятної форми барвника **3**. У кислому буфері (рН 4,75) значення ϵ та λ_{max} поглинання і збудження сполуки **6** близькі до відповідних значень вільного барвника **3**. Однак існує суттєва різниця між спектрами емісії в MeOH та кислому буфері (рН 4,75). Так, λ_{max} зміщується від 455 нм в MeOH до 479 нм у водному розчині, а спектри емісії мають різну форму, незважаючи на те, що спектри поглинання та збудження в цих розчинниках близькі (Рис. 1). Спектри емісії **6** при рН 4,75 виглядають як суперпозиція спектрів емісії в MeOH та при рН 10,5. Причиною цього ефекту є характерне для 7-гідроксикумаринів перенесення протону у збудженому стані з 7-ОН на карбонільну групу, що пояснюється естафетним рухом протону через молекули води.

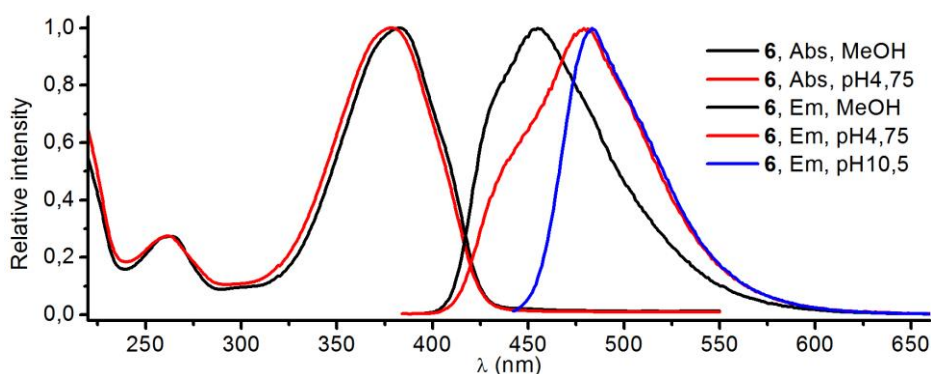


Рис. 1 Нормалізовані спектри поглинання (Abs) та емісії (Em) кон'юганту **6**

Отже в цій роботі вперше отримано й досліджено оптичні властивості кон'югатів D-глюкозаміну з водорозчинними кумаринами – потенційних реагентів для візуалізації клітин.

Роботу виконано за підтримки Програми наукових досліджень НАН України “Геномні, молекулярні та клітинні основи розвитку інноваційних біотехнологій” (грант №34/21).

1. Thomas B., Yan K.C., Hu X.L., Donnier-Marechal M., Chen G.R., He X.P., Vidal S. Fluorescent glycoconjugates and their applications // *Chem. Soc. Rev.* – 2020. – V. 49, № 2. – P. 593-641.

2. Yamada K., Saito M., Matsuoka H., Inagaki N. A real-time method of imaging glucose uptake in single, living mammalian cells // *Nature Prot.* – 2007. – V. 2, № 3. – P. 753-762.

3. Cheng Y., Shabir G., Li X., Fang L., Xu L., Zhang H., Li E. Development of a deep-red fluorescent glucose-conjugated bioprobe for: in vivo tumor targeting // *Chem. Commun.* – 2020. – V. 56, № 7. – P. 1070-1073.

4. Yamada K., Teshima T., Yamamoto T. Method for imaging cell using fluorescence-labeled sugar derivative having coumarin derivative bound thereto, and imaging agent // *United States Patent 10288604*, May 14, 2019.

5. Kuziv Ia.B., Novosylina O.V., Dubey I.Ya. Fluorescent conjugates of D-glucosamine with 3-thiazolylcoumarins: synthesis, characterization and potential use as cell imaging agents // *Biopolym. Cell.* – 2020. – V. 36, № 5. – P. 358-370.

6. Wu Q., Cai M., Gao J., Zhao T., Xu H., Yan Q., Jing Y., Shi Y., Kang C., Liu Y., Liang F., Chen J., Wang H. Developing substrate-based small molecule fluorescent probes for super-resolution fluorescent imaging of various membrane transporters // *Nanoscale Horiz.* – 2020. – V. 5, № 3. – P. 523-529.

7. Кузів Я.Б., Дубей І.Я. Синтез та спектральні властивості нових водорозчинних реагентів на основі 3-гетарилкумаринів для флуоресцентного мічення біомолекул. Біоактивні сполуки, нові речовини і матеріали (за ред. А.І. Вовка). Київ: Інтерсервіс, 2020, С. 116-120.

РАСЧЕТ ПОТЕНЦИАЛА БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ N-2-(4-АЦЕТИЛТИАЗОЛО-[5,4-В]-ИНДОЛИЛ)МОНОАМИДА ЯНТАРНОЙ КИСЛОТЫ

Найденов В.Э.¹, Каранкевич Е.Г.¹, Куваева З.И.¹, Шахаб С.Н.²

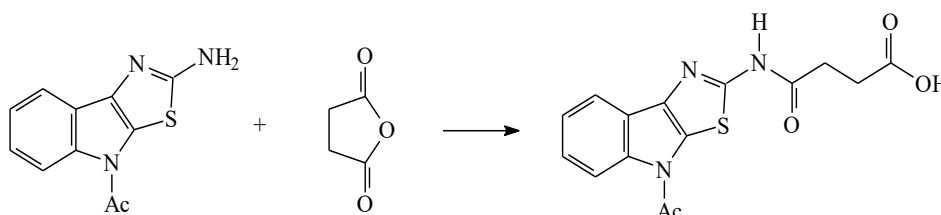
Государственное научное учреждение «Институт физико-органической химии
Национальной академии наук Беларуси», extract@ifoch.bas-net.by

²Учреждение образования «Международный государственный экологический институт
им. А.Д.Сахарова» Белорусского государственного университета, siyamakshahab@mail.ru

Производные группы индолов имеют потенциал биологической активности, что позволило разработать на их основе ряд лекарственных средств. Следует отметить, что среди 200 наиболее коммерчески успешных лекарственных препаратов, 13 имеют фрагмент индола. Значительный интерес представляют конденсированные системы индола, такие как тиазоло[5,4-б]индолы, проявляющие анксиолитическую, антигипоксическую и актопротекторную активность [1, 2].

Разработанные подходы к синтезу тиазоло[5,4-б]индола, описаны в литературе [3]. Одним из путей получения соединений, проявляющих новые фармакологические свойства или обладающих большей терапевтической активностью, является синтез их производных путем добавления фармакологически активного фрагмента. В качестве такого соединения нами была выбрана янтарная кислота, которая обладает рядом биологически активных свойств, в том числе и антигипоксической активностью.

Получение производного тиазоло[5,4-б]индола осуществляли согласно схеме (1) в среде апротонного растворителя при нагревании. После перекристаллизации, выход N-2-(4-ацетилтиазоло-[5,4-б]индолил)моноамида янтарной кислоты составил 45%.



где Ac = CH₃-C(O)-

Строение полученного соединения было подтверждено на основании данных ИК- и ЯМР-спектроскопии, которые приведены в таблице 1.

Таблица 1

Спектроскопические данные:

Метод	N-2-(4-ацетилтиазоло-[5,4-б]индолил) моноамид янтарной кислоты	
ИК-спектроскопия, см ⁻¹	2932 (-CH ₂ -CH ₂ -); 1685 (COOH); 1569 (амид II), 1569 (пиррол), 1373, 1371(-CH-), 744 (аром.)	
ЯМР-спектроскопия химические сдвиги ¹ H, δ, м.д.	2,60 т (2H, CH ₂ C(O)); 2,72 т (2H, CH ₂ C(O)O); 2,82 с (3H, CH ₃); 7,39 тд, (1H, H ⁷); 7,41 тд (1H, H ⁶); 7,78 дд (1H, H ⁵); 7,97 уш. (1H, H ⁸); 12,40 уш. (2H, NH, OH)	

На основании квантово-химических расчетов с использованием метода DFT/ B3LYP/6-31+g(d), были рассчитаны физико-химические характеристики N-2-(4-ацетилтиазоло-[5,4-b]-индолил)моноамида янтарной кислоты, включая коэффициент распределения вода/октанол изменения энтальпии и свободной энергии Гиббса, электростатический потенциал, проведено изучение распределение электронной плотности для определения возможных реакционных центров молекулы. В таблице 2 приведены полученные характеристики, на основании которых был выполнен анализ биологической активности производного тиазолоиндола.

Таблица 2

Физико-химические характеристики N-2-(4-ацетилтиазоло-[5,4-b]индолил)-моноамида янтарной кислоты (метод DFT/ B3LYP/6-31+g(d))

Граничные энергии молекулярных орбиталей	$E_{ВЗМО} = -5,94$ эВ; $E_{НСМО} = -1,51$ эВ
Ширина запрещенной зоны	$\Delta E_{H-L} = -4,43$ эВ
Нуклеофильность	$N = 3,55$ эВ
Химический потенциал	$\mu = -3,73$ эВ
Энергия Гиббса	$G^{\circ} = -1442,66$ (а.е.)
Коэффициент распределения октанол/вода, logP	2,10
Полярная поверхность молекулы	$101,29 \text{ \AA}^2$
Количество атомов в молекуле	23
Молекулярный вес	331,35 а.е.м.
Количество акцепторов водородной связи	7
Количество доноров водородной связи	2
Количество вращающихся связей	4
Молекулярный объем	271,49

Применяя эмпирическое правило Липинского [4], рассчитанные параметры указывают на потенциальную биологическую активность полученного соединения. Его молекулярный вес ≤ 500 , что указывает на хорошую проницаемость через клеточные мембраны. Полярная поверхность молекулы производного тиазолоиндола меньше 160 \AA^2 . Количество доноров водородных связей ≤ 5 , количество акцепторов водородных связей ≤ 10 , коэффициент распределения октанол/вода < 5 .

Таким образом, N-2-(4-ацетилтиазоло-[5,4-b]индолил)моноамид янтарной кислоты, может рассматриваться как биологически активное соединение и быть перспективным для дальнейшего исследования в качестве субстанции для лекарственных препаратов.

1. Карчава А.П. Мелконян, Ф.С.Юрская М.А. Новые стратегии синтеза N-алкилированных индолы // Химия гетероциклических соединений. – 2012. – №3. – С.415–433.

2. Гаврев А.И., Марышева В.В., Шабанов П.Д. Актопротекторное действие антигипоксантов тиазолоиндольного ряда // Экспериментальная и клиническая фармакология. – 2010. – Т. 73, №2. – С. 25–30.

3. Лопатик Д.В., Куваева З.И., Бондарева О.М., Надёнов В.Э., Тычинская Л.Ю. Синтез ацильных производных тиазоло[5,4-b]индола // Весці Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Серыя хімічных навук. 2019. – Т. 55, №4. С. 436-441

4. Lipinski C.A., Lombardo F., Domini B.W., Feeney P.J. Experimental and computational approaches to estimate solubility and permeability in drug discovery and development settings // J. Advanced drug delivery reviews. – 2001. – Vol.46, №3. – P. 3-26.

СИНТЕЗ НОВИХ КОНДЕНСОВАНИХ ПОХІДНИХ 1,2,3-ТРИАЗОЛУ ТА ПЕРСПЕКТИВИ ЇХ ВИКОРИСТАННЯ У ВІДКРИТТІ СПОЛУК ІЗ ПРОТИПУХЛИННОЮ ТА АНТИМІКРОБНОЮ ДІЄЮ

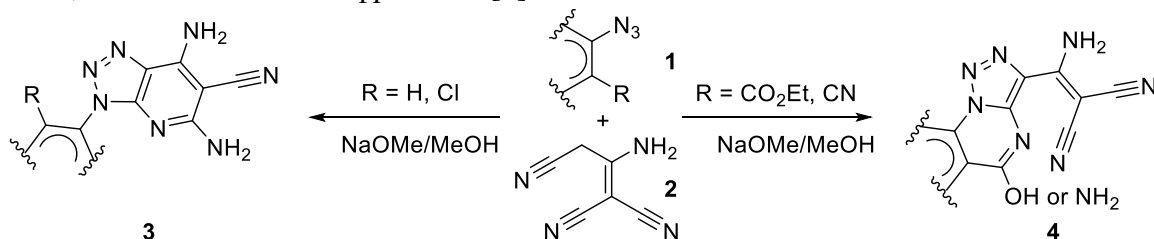
Походило Н.¹, Тутичак М.¹, Манько Н.², Фінюк Н.²,
Обушак М.¹, Стойка Р.²

¹Кафедра органічної хімії, Львівський національний університет імені Івана Франка,
nazariy.pokhodylo@lnu.edu.ua

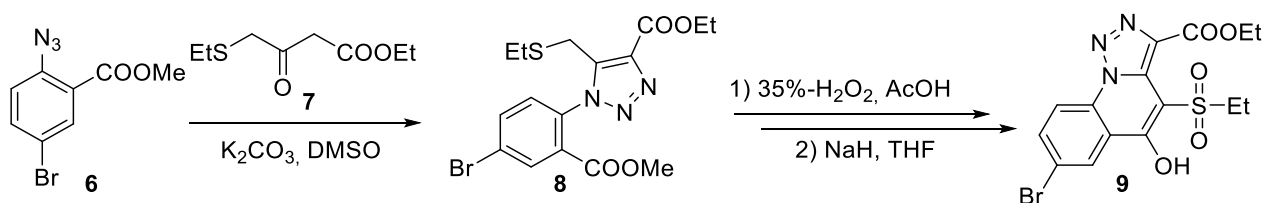
²Інститут біології клітини НАН України

Упродовж останніх двадцяти років 1,2,3-триазоли, конденсовані з іншими гетероциклами, активно досліджуються в біомедичних цілях [1]. Слід відзначити, що у практику відкриття ліків вони увійшли майже сто років тому, коли було розпочато дослідження 8-азапуринів (1,2,3-триазоло[4,5-*d*]піримідинів) як хіміотерапевтичних засобів для лікування різних захворювань. Від тоді пошук нових біологічно активних сполук у ряді конденсованих 1,2,3-триазолів триває і донині. Так, наприклад, були виявлені сполуки, що діють проти вірусу гепатиту С, інгібують бензодіазепінові та аденозинові рецептори, і в останній період особливо активізувалися дослідження з пошуку серед конденсованих 1,2,3-триазолів сполук із протипухлинною та антимікробною дією.

Зручним підходом до синтезу конденсованих 1,2,3-триазолів є аніонні конденсації азидів із метиленактивними сполуками по типу Дімрота з подальшим аелюванням нового гетероциклічного циклу. Слід зауважити, що аелювання конденсованої гетероциклічної системи може відбуватися однореакторно за принципом доміно. Так, нещодавно нам вдалося реалізувати новий тип такої реакції. Встановлено, що під час реакції арилазидів **1** з димером малонітрилу **2**, в ході основного каталізу, утворений проміжний триазол зазнав спонтанної циклізації, що приводило до поліфункціональних [1,2,3]триазоло[4,5-*b*]піридинів **3** [2]. Згодом показано, що у випадку ароматичних азидів із карбоксильною або нітрильною групою в *орто*-положенні реакція відбувалася з утворенням виключно системи [1,2,3]триазоло[1,5-*a*]піримідину **4** [3]. Так, одержано нові [1,2,3]триазоло[1,5-*a*]хіназоліни та ізомерні тієно[2,3-*e* та 3,2-*e*][1,2,3]триазоло[1,5-*a*]піримідини, що мають поліфункціональний 1-аміно-2,2-диціановінільний фрагмент [3]:

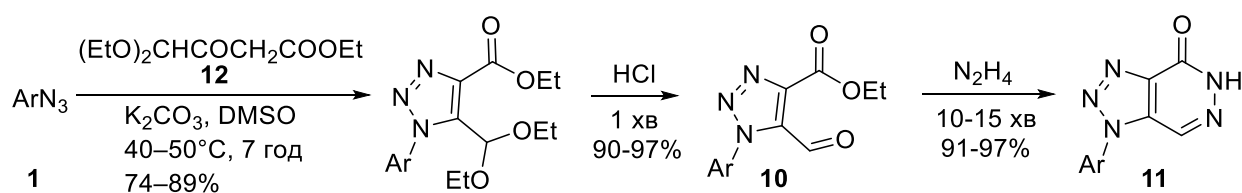


Формування конденсованих систем 1,2,3-триазолів на основі *орто*-заміщених ароматичних азидів може здійснюватися шляхом послідовних перетворень. Для прикладу, при взаємодії метилового естеру 2-азидобензойної кислоти **6** з етил 4-(етилтіо)-3-оксобутаноатом **7** нами одержано 5-(етилтіометил)-1*H*-1,2,3-триазол **8**, який в результаті подальшого окиснення сульфідного фрагмента H₂O₂ та дією гідриду натрію утворює систему [1,2,3]триазоло[1,5-*a*]хіноліну **9** [4]:

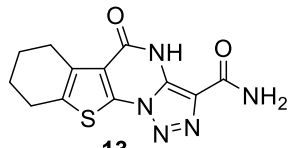


Аелювання нового кільця по С=С зв'язку триазолу можливе введенням у четверте та п'яте положення функційних груп. Нами, зокрема, розроблений зручний метод селективного

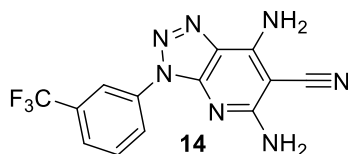
синтезу етил 1-арил-5-форміл-1*H*-1,2,3-триазол-4-карбоксилатів **10** та на їх основі – 1-арил-1,5-дигідро-4*H*-[1,2,3]триазоло[4,5-*d*]піридазин-4-онів **11** із високим загальним виходом, реакцією арилазидів **1** з етил 4,4-дієтокси-3-оксобутаноатом **12** з подальшим вивільненням альдегідної групи і замиканням піридазинового кільця дією гідрозину [5]:



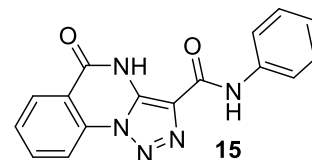
Розроблені нами методи дозволили швидко згенерувати комбінаторні бібліотеки конденсованих 1,2,3-триазолів і провести скринінг їх протипухлинної та антимікробної дії. Так, серед похідних 1,2,3-триазоло[1,5-*a*]піримідину виявлено сполуку **13**, яка мала селективну цитотоксичну дію на пухлинні клітини SK-MEL-5 меланому людини [6]. Представники системи [1,2,3]триазоло[4,5-*d*]піридазину проявляли селективну цитостатичну дію щодо клітин EKVX аденокарциноми легень людини. Сполука **14** була найбільш токсичною, оскільки інгібувала проліферацію 71% клітин раку легень у концентрації 10^{-5} M та пригнічувала ріст клітин HeLa раку шийки матки з показником токсичності IC_{50} 20,4 мкМ [7]. Важливо згадати, що ці сполуки є відносно толерантними до непухлинних клітин: для прикладу, інгібували проліферацію клітин HEK293 нирки ембріона людини в концентраціях майже у 100 разів вищих за концентрацію доксорубіцину, що є комерційним цитостатичним препаратом неселективної дії. Серед представників [1,2,3]триазоло[1,5-*a*]хіназоліну було знайдено сполуку **15**, яка проявляла антимікробну дію, інгібуючи ріст понад 63% грам-позитивної бактерії штаму *Staphylococcus aureus*, а також похідні, що є перспективними проти збудника криптококоз *Cryptococcus neoformans var. grubii*.



13
GP = -31.50%
SK-MEL-5 (Melanoma)



14
GP = 29.14%
EKVX (Lung Cancer)



15
GI = 63.1%
Staphylococcus aureus

1. Shafran, E.A., Bakulev, V.A., Rozin, Y.A. Shafran Yu. M. Condensed 1,2,3-triazoles (review). Chem. Heterocycl. Comp. – 2008. – 44, № 9. – P. 1040–1069.
2. Pokhodylo N.T., Shyyka O.Ya. New cascade reaction of azides with malononitrile dimer to polyfunctional[1,2,3]triazolo[4,5-*b*]pyridine // Synth. Comm. – 2017. – 47, № 11. – P. 1096–1101.
3. Pokhodylo N.T., Shyyka O.Ya., Tupyshak M.A., Obushak M.D. Selectivity in domino reaction of ortho-carbonyl azides with malononitrile dimer leading to [1,2,3]triazolo[1,5-*a*]pyrimidines // Chem. Heterocycl. Compd. – 2018. – 54, № 2. – P. 209–212.
4. Pokhodylo N.T., Obushak M.D. A convenient synthesis of [1,2,3]triazolo[1,5-*a*]quinoline // Russ. J. Org. Chem. – 2019. – 55, № 8. – P. 1241–1243.
5. Pokhodylo N.T., Shyyka O.Ya., Obushak M.D. Convenient synthetic path to ethyl 1-aryl-5-formyl-1*H*-1,2,3-triazole-4-carboxylates and 1-aryl-1,5-dihydro-4*H*-[1,2,3]triazolo[4,5-*d*]pyridazin-4-ones Chem. Heterocycl. Compd. – 2018. – 54, № 8. – P. 773–779.
6. Shyyka O.Ya. Pokhodylo N.T., Finiuk N.S. Anticancer activity evaluation of thieno[3,2-*e*][1,2,3]triazolo[1,5-*a*]pyrimidines and thieno[2,3-*e*][1,2,3]triazolo[1,5-*a*]pyrimidine derivatives // Biopolym. Cell. – 2019. – 35, № 4. – P. 321–330.
7. Pokhodylo N., Shyyka O., Finiuk N., Stoika R. Selected 5-amino-1-aryl-1*H*-1,2,3-triazole scaffolds as promising antiproliferative agents / N. Pokhodylo, // Ukr. Biochem. J. – 2020. – 92, № 5. – P. 23–32.

БІОЛОГІЧНИЙ ВПЛИВ ВІТАМІНУ С НА ОРГАНІЗМ ЛЮДИНИ

Стрижак С.В., Куленко О.А.

Полтавський національний педагогічний університет імені В. Г. Короленка

pnpukafedrahimii@gmail.com

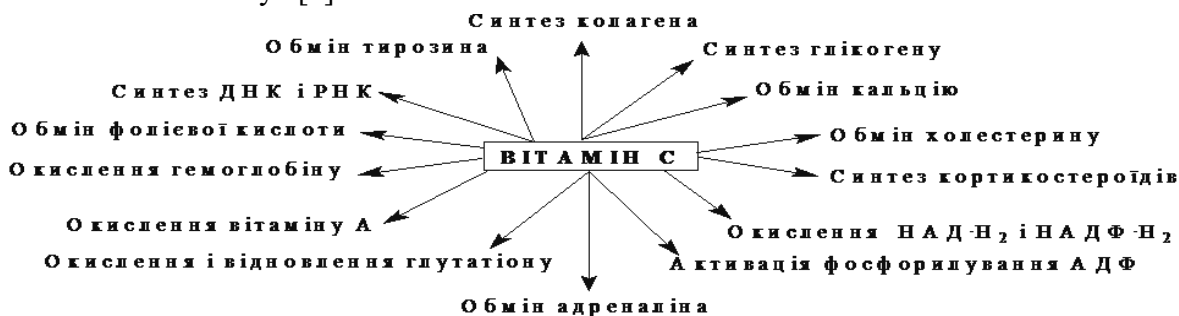
Вітамін С (аскорбінова кислота) – найвідоміший, знайомий нам з раннього дитинства вітамін. Відкриття вітаміну С (аскорбінової кислоти) пов'язано із з'ясуванням природи цинги – захворювання, викликаного відсутністю в раціоні свіжих овочів і фруктів. А. Сент-Дьєрдьї в 1927 – 1928 рр. отримав речовину з кори наднирників, соку апельсину і капусти. Згодом вона була названа «аскорбіновою кислотою» [1].

Вітамін С належить до групи водорозчинних вітамінів, тобто не має здатності накопичуватися в організмі. Незначний дефіцит аскорбінової кислоти може викликати деякі порушення здоров'я. Біологічна дія аскорбінової кислоти пов'язана з її участю у транспорті електронів в окисно-відновних реакціях. Аскорбінова кислота задіяна у багатьох процесах біологічного окислення, забезпечує синтез нейромедіаторів, кортикостероїдів, статевих гормонів, холестерину, перебіг процесів кровотворення й утворення гемоглобіну, синтез білка колагену з проколагену, нуклеїнових кислот, необхідна для функціонування щитоподібної залози. Крім того, доведена також участь вітаміну С у синтезі або реалізації дії простагландинів, а також простацикліну. Разом із вітамінами А та Е вітамін С забезпечує антиоксидантний захист мембран клітин, підвищуючи активність у печінці ферментів глутатіонпероксидази, каталази і пероксидази. Аскорбінова кислота як природний антиоксидант є інгібітором вільнорадикальних процесів і відіграє важливу роль у регуляції таких загальнобіологічних функцій, як ріст, розмноження та розвиток організму. Встановлено, що аскорбінова кислота зменшує вміст холестерину в крові, активуючи перетворення його в інші речовини, особливо в жовчні кислоти. Доведена роль аскорбінової кислоти у фагоцитозі, синтезі антитіл та інших імунних процесах.

Біологічну роль аскорбінової кислоти найчастіше пов'язують з участю в окисно-відновних процесах. Але ферментів, у яких кислота відігравала б роль коферменту, досі не виявлено. Встановлено, що вона служить донором водню для відновлення різних біологічних субстратів. Зокрема відомо, що аскорбінова кислота може відновлювати дисульфідні зв'язки до сульфідних груп, активуючи цим самим ряд ферментів. У свою чергу дегідроаскорбінова кислота може ферментативно відновлюватись у тканинах організму за участю глутатіону. Біологічна роль аскорбінової кислоти тісно пов'язана з обміном білків, вуглеводів, мінеральних речовин. За участю аскорбінової кислоти перебігають процеси гідроксилювання з утворенням цілого ряду біологічно активних речовин. Так, через гідроксилювання триптофан перетворюється в 5-гідрокситриптофан, який служить основою для утворення медіатора серотоніну. Аскорбінова кислота необхідна для процесів гідроксилювання під час перетворення холестерину в стероїдні гормони, для перетворення 3,4-дигідроксифенілетиламіну в норадреналін. Вона сприяє звільненню заліза із феритину та трансферину, що забезпечує проникнення його в тканини. У кишечнику за участю аскорбінової кислоти відбувається відновлення Fe^{3+} до Fe^{2+} , що необхідно для його всмоктування. Відновлення фолієвої кислоти до коферментної форми ТГФК також відбувається за участю аскорбінової кислоти. Без аскорбінової кислоти не відбувається процес гідроксилювання проліну і лізину, а отже, і перетворення проколагену в колаген, який є головним позаклітинним компонентом сполучної тканини [1].

Вітамін С відіграє в організмі надзвичайно важливу роль. Вітамін бере участь у багатьох реакціях проміжного обміну. Він є донором і акцептором протонів і електронів. Процес протікає з участю ферментів або іонів металів, хінонів, гомохромогенів. Вітамін С бере участь у відновленні дисульфідних зв'язків в молекулах білка і, перш за все, ферментів. Є складовою частиною активного центру ферменту, який прискорює гідроліз окремих тіоглікозидів. При недостатній кількості або відсутності в раціоні вітаміну С порушується перехід проколагену в колаген, що призводить до збільшення порозності кровоносних судин і до кровотеч.

Порушується біосинтез колагену і гіалуронової кислоти. Виникають типові цинготні зміни скелета. Сповільнюється регенерація всіх тканин, оскільки затримується перетворення проліна в оксипролін. Сповільнюється біосинтез гормонів наднирників, дентину, процесів зсідання крові, гальмується діяльність багатьох ферментів. Важлива роль вітаміну С у вуглеводному обміні. Позитивно впливає на еритропоез і на утворення гемоглобіну, підвищення реактивності організму та зміцнення його захисних механізмів, сприяє виробленню антитіл, підвищує фагоцитарну активність лейкоцитів, посилюючи опірність організму хворобам. Вітамін С називають ще антиінфекційним вітаміном. Вітамін бере участь в обміні багатьох сполук [2]:



Оскільки він в організмі людини не синтезується, то необхідне постійне надходження його з продуктами харчування. При нестачі або тривалій відсутності вітаміну С виникають гіпо- та авітамінози. Розвиваються вони найчастіше в зимовий або ранній весняний період, коли вміст вітаміну в харчових продуктах значно знижується. Тривала відсутність вітаміну протягом 3 – 5 місяців призводить до розвитку захворювання, що дістало назву цинги, або скорбуту. Явно вираженій формі захворювання передує прихований період з непомітними симптомами, які можуть тривати кілька місяців. Це загальне нездужання, головний біль, постійне відчуття втоми, млявість, порушення сну, апатія, біль у різних ділянках тіла, особливо в м'язах нижніх кінцівок. Найхарактернішою ознакою цинги є ураження кровоносних судин, особливо капілярів, яке супроводжується ламкістю їх стінок і підвищенням проникності. Зміни в капілярах призводять до виникнення підшкірних точкових крововиливів. Спостерігаються також зміни в кістковій та інших мезенхімальних тканинах (хрящах, сухожиллях, дентині зубів), що зумовлено значним зменшенням вмісту колагену. Спостерігається ураження ясен – гінгівіт, що призводить до їх розриву, оголення і розхитування зубів, кровоточивості ясен. Зміни з боку травного каналу характеризуються катаральним станом слизової оболонки шлунку і кишківника, змінюються секреторна і моторна функції шлунку, виникає дискінезія кишківника.

Вітамін С міститься у багатьох фруктах і овочах, включаючи апельсини, полуницю, ківі, болгарський перець, броколі, капусту та шпинат. Рекомендований добовий прийом вітаміну С становить 75 мг для жінок і 90 мг для чоловіків. Хоча, зазвичай, рекомендується споживати вітамін С разом зі звичайними продуктами, багато людей звертаються до різноманітних харчових добавок для задоволення потреб свого організму [2].

У разі більш поширених сьогодні гіповітамінозів і субклінічної забезпеченості цим вітаміном спостерігається зниження працездатності, втомленість, слабкість у ногах, дратівливість, кровоточивість ясен, гінгівіт, гіпохромна анемія, зниження стійкості до інфекцій. Субклінічна забезпеченість аскорбіновою кислотою є доволі поширеним явищем в Україні і спостерігається в значній частині населення, включаючи дітей дошкільного і шкільного віку, вагітних і матерів, які годують груддю. Найважливішою причиною гіповітамінозу вітаміну С є аліментарний фактор, а саме – низьке споживання овочів, фруктів, а також руйнування вітаміну в процесі кулінарної обробки продуктів.

1. Боечко Ф.Ф. Біологічна хімія: навч. посібник. – 2-е вид., перероб і допов. / Ф.Ф. Боечко. – К.: Вища шк., 1995. – 536 с.
2. Девис С. Вітамін С: Хімія і біохімія: пер. с англ. / С. Девис, Д. Остин, Д. Патридж. – М.: Мир, 1999. – 176 с.

ПОШУК НОВИХ РЕГУЛЯТОРІВ РОСТУ РОСЛИН СОНЯШНИКУ СЕРЕД ПОХІДНИХ ОКСАЗОЛО[4,5-*d*]ПІРИМІДИНУ

Циганкова В.А., Андрусевич Я.В., Коніч В.М., Штомпель О.І., Волощук І.В., Пільо С.Г., Велігіна Є.С., Качаєва М.В., Броварець В.С.

Відділ №2 хімії біоактивних азотовмісних гетероциклічних основ Інституту біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря НАН України, vTsygankova@ukr.net

Проведено пошук нових регуляторів росту рослин соняшнику (*Helianthus annuus* L.) сорту Бастіон серед похідних оксазоло[4,5-*d*]піримідину: сполука № 1 – 2-[4-(2,5-дифенілоксазоло[4,5-*d*]піримідин-7-іл)піперазин-1-іл]етан-1-ол, MW= 401,47; сполука № 2 – 7-(4-етилпіперазин-1-іл)-2,5-дифенілоксазоло[4,5-*d*]піримідин, MW=385,47; сполука № 3 – 2,5-дифеніл-7-піперазин-1-іл-оксазоло[4,5-*d*]піримідин, MW=357,42; сполука № 4 – 2-(4-метилфеніл)-7-піперазин-1-іл-5-феніл-оксазоло[4,5-*d*]піримідин, MW=371,45; сполука № 5 – 5-(4-метилфеніл)-7-піперазин-1-іл-2-феніл-оксазоло[4,5-*d*]піримідин, MW=371,45; сполука № 6 – 2,5-ди-(4-метилфеніл)-7-піперазин-1-іл-оксазоло[4,5-*d*]піримідин, MW=385,47; сполука № 7 – 5-феніл-7-піперазин-1-іл-2-(4-метилфеніл)оксазоло[4,5-*d*]піримідин, MW=371,45; сполука № 8 – 7-(4-метилсульфоніл-піперазин-1-іл)-2,5-дифенілоксазоло[4,5-*d*]піримідин, MW=435,51; сполука № 9 – 7-(4-фенілсульфонілпіперазин-1-іл)-2,5-дифенілоксазоло[4,5-*d*]піримідин, MW=497,58; сполука № 10 – 7-(4-метилсульфоніл[1,4]діазепан-1-іл)-2,5-дифенілоксазоло[4,5-*d*]піримідин, MW=449,54; сполука № 11 – 2,5-дифеніл-7-[4-(4-метилфеніл)сульфоніл]-піперазин-1-іл-оксазоло[4,5-*d*]піримідин, MW=511,61; сполука № 12 – 7-(4-фенілсульфоніл-[1,4]діазепан-1-іл)-2,5-дифенілоксазоло[4,5-*d*]піримідин, MW=511,61; сполука № 13 – 2,5-дифеніл-7-[4-(4-метилфеніл)сульфоніл]-[1,4]діазепан-1-іл-оксазоло[4,5-*d*]піримідин, MW=525,63.

Рістрегулюючу активність похідних оксазоло[4,5-*d*]піримідину, застосованих у концентрації 10^{-8} М, порівнювали з активністю фітогормону ауксину ІОК (2-(1*H*-індол-3-іл)оцтова кислота), застосованого в аналогічній концентрації 10^{-8} М. Встановлено, що найвищу рістрегулюючу активність виявили хімічні сполуки № 4, 5, 6, 7, при застосуванні яких у концентрації 10^{-8} М підвищувались у середньому ростові показники рослин: довжини проростків – на 7-9 %, довжини коренів – на 25,2-61,3 %, відповідно, по відношенню до контролю. Порівняльний аналіз рістрегулюючої активності хімічних сполук та фітогормону ІОК показав, що активність сполук № 4, 5, 6, 7, застосованих у концентрації 10^{-8} М, перевищувала активність фітогормону ІОК, застосованого в аналогічній концентрації 10^{-8} М; спостерігалось підвищення у середньому показників довжини проростків – на 3-5 %, довжини коренів – на 13,2-50 %, відповідно, по відношенню до ІОК.

Можливо припустити, що висока рістрегулююча активність досліджуваних сполук № 4, 5, 6, 7, пояснюється наявністю різних замісників в їх хімічних структурах. Сполука №4 містить по 7 положенню оксазоло[4,5-*d*]піримідину діазепіновий залишок, сполуки № 5, 6 та 7 метильовані по фенільним фрагментам. Так, сполука № 5 містить *p*-толіл по 5 положенню та феніл по 2 положенню оксазоло[4,5-*d*]піримідину. Сполука № 6 містить по 2 та 5 положеннях містить *p*-толільні замісники, а у сполуки № 7 *p*-толільна група знаходиться по 2 положенню оксазоло[4,5-*d*]піримідину. Встановлено також позитивний вплив хімічної сполуки № 7 на підвищення вмісту хлорофілу та каротиноїдів у листках рослин соняшнику у середньому: хлорофілу а – на 27 %, хлорофілу б на – 53,2 %, хлорофілів а+б – на 36,3 %, каротиноїдів – на 86,4 %, відповідно, по відношенню до контролю. Порівняльний аналіз показав, що активність сполуки № 7, застосованої у концентрації 10^{-8} М, перевищувала активність фітогормону ІОК, застосованого в аналогічній концентрації 10^{-8} М; спостерігалось підвищення показників: хлорофілу а – на 16,6 %, хлорофілу б – на 42,3 %, хлорофілів а+б – на 25,7 %, каротиноїдів – на 45,4 %, відповідно, по відношенню до ІОК.

Ймовірно, наявність метильних залишків у бокових фенільних замісниках відіграє важливу роль у зв'язуванні цих сполук з активними сайтами мішеней. Також показано, що модифікація діазепанового та піперазинового замісників по 7 положенню оксазоло[4,5-*d*]піримідину призводить до зниження активності таких сполук.

СРАВНЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ПРОИЗВОДНЫХ БРОМТИАЗОЛОИНДОЛА

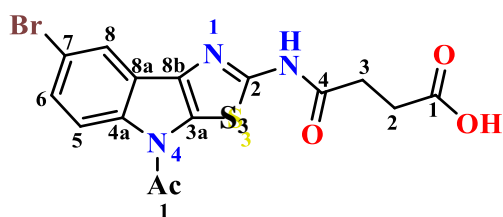
Шахаб С.Н.¹, Каранкевич Е.Г.², Куваева З.И.², Лопатик Д.В.²

¹Учреждение образования «Международный государственный экологический институт им. А.Д.Сахарова» Белорусского государственного университета, siyamakshahab@mail.ru

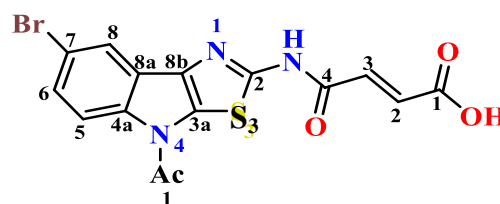
²Государственное научное учреждение «Институт физико-органической химии Национальной академии наук Беларуси», extract@ifoch.bas-net.by

Многообразие видов биологической активности природных соединений, содержащих индольный фрагмент, способствует развитию методов синтеза производных индола, которые по спектру биологического действия во многом превосходят природные индолы. В плане получения соединений, проявляющих антигипоксическую и анксиолитическую активность перспективными могут быть бромпроизводные тиазолоиндола [1]. Широко используемый способ получения новых биологически активных веществ, это введение фармакофорных групп в структуру соединения, имеющего фармакологически активный фрагмент. В некоторых случаях полученное соединение может иметь не только более высокий потенциал фармакологической активности, но и обладать расширенным спектром фармацевтического действия.

С целью получения новых биологически активных веществ были разработаны способы получения производных бромтиазолоиндола с фрагментами янтарной и малеиновой кислот [2]. Имеющиеся в литературе сведения указывают на биологическую активность указанных соединений [3]. Структурные формулы полученных веществ приведены на рис.1.



N-2-(7-бром-4-ацетилтиазоло[5.4-*b*]-индолил)моноамид янтарной кислоты (Suc-ABTIA)



N-2-(7-бром-4-ацетилтиазоло[5.4-*b*]-индолил)моноамид малеиновой кислоты (Mal-ABTIA)

Рисунок 1

Синтез осуществляли следующим образом:

N-2-(7-бром-4-ацетилтиазоло[5,4-*b*]-индолил)моноамид янтарной кислоты (Suc-ABTIA): 2-амино-7-бром-4-ацетилтиазоло[5,4-*b*]индол 6,2 г (0,02 моль) и двукратный избыток 4,0 г (0,04 моль) янтарного ангидрида в 40 мл ДМФА нагревали (130-145°C) при перемешивании в течение 1 часа. После охлаждения до 15°C отделяли осадок. Продукт промывали нагретым до 40-45°C этанолом и сушили. Получали вещество белого цвета с т.пл. > 320°C. Выход 60%. Найдено, %: С 43,88, Н 2,36, N 9,70, S 7,79. С₁₅Н₁₂BrN₃O₄S. Вычислено, %: С 43,90, Н 2,92, N 10,24, S 7,80.

ИК-спектроскопия: 2925 (-CH₂-CH₂-), 1698 (COOH), 1678 (амид I), 1561, 1504 (пиррол), 1435, 1367 (-CH-), 1294, 1242, 1205, 986 (аром).

¹Н ЯМР-спектроскопия, δ, м.д.: 2,60 т (2H, CH₂CO); 2,72 т (2H, CH₂C(O)O); 2,77 с (3H, CH₃); 7,48 дд (1H, H⁶); 7,81 с (1H, 8); 7,78 дд (1H, H⁵); 7,90 уш. (1H, H⁵); 12,22 уш. (1H, OH); 12,44 уш. (1H, NH).

N-2-(7-бром-4-ацетилтиазоло[5,4-*b*]-индолил)моноамид малеиновой кислоты (Mal-ABTIA): 5 г (0,016 моль) 2-амино-7-бром-4-ацетилтиазоло[5,4-*b*]индола и 5,0 г (0,05 моль) малеинового ангидрида суспензировали в 30 мл ДМФА нагревали (110-120°C) при перемешивании в течение 2,5 часа. Отделенный осадок промыт нагретым до 40-45°C

этиловым спиртом. После сушки на воздухе получали порошкообразное вещество желтого цвета с т.пл. 312°C. Выход 70%. Найдено, %: С 43,94; Н 2,47; N 10,08; S 7,90. C₁₅H₁₀BrN₃O₄S. Вычислено, %: С 44,12, Н 2,45, N 10,73, S 7,84.

ИК-спектроскопия: 1700 (СООН), 1639 (амид I), 1585 (амид II), 1505 (пиррол), 1432, 1396, 1372 (-СН-), 1343, 1264, 1206 (СН=СН), 792,734 (аром).

¹Н ЯМР-спектроскопия, δ, м.д.: 2,82 с (3Н, СН₃); 6,50 д (1Н, СНС(О)); 6,53 д (1Н, СНС(О)О); 7,53 дд (1Н, Н⁶); 7,88 д (1Н, Н⁸); 7,90 уш. (1Н, Н⁵); 12,90 уш. (2Н, NH, OH).

На основании полученных спектроскопических данных были сделаны квантово-химические расчеты. Электронные и геометрические параметры полученных молекул были рассчитаны с использованием метода DFT/ B3LYP/6-31+g(d) в основном состоянии. Полученные физико-химические параметры приведены в таблице.

Таблица

Физико-химические характеристики (метод DFT/ B3LYP/6-31+g(d))

	E _{ВЗМО}	E _{НСМО}	ΔE	E нукл.	E эл.	ν _{min}	μ	G ^o
Suc-ABTIA	-6,07 эВ	-1,60 эВ	-4,47 эВ	3,42 эВ	1,65 эВ	15,13 см ⁻¹	-3,83 эВ	-4013,80 (a.e.)
Mal-ABTIA	-6,13 эВ	-2,91 эВ	-3,22 эВ	3,35 эВ	3,18 эВ	25,64 см ⁻¹	-4,52 эВ	-4012,59 (a.e.)

где: граничные энергии молекулярных орбиталей (E_{ВЗМО}; E_{НСМО}); Енукл.- нуклеофильность; Еэл.- электрофильность; наименьшие расчетные колебательные частоты (ν_{min}); химический потенциал (μ); энергия Гиббса (G^o).

На основании полученных физико-химических данных, которые характеризуют размер молекулы, ее способность к нуклеофильным и электрофильным взаимодействиям, можно говорить о потенциале биологической активности синтезированного соединения. Сравнивая полученные величины электрофильности, видно что для Mal-ABTIA электрофильность выше за счет наличия дополнительной сопряженной двойной связи в молекуле и возможности образования енольных структур. Расчетные значения E_{ВЗМО} для Suc-ABTIA выше, что согласуется с увеличением полученных значений нуклеофильности сравниваемых соединений. О стабильности полученных производных свидетельствуют значения наименьших расчетных колебательных частот.

Сравнивая фармакокинетические параметры полученных соединений, видно, что количество доноров и акцепторов водородной связи в обоих рассматриваемых бромпроизводных, одинаково. Различия наблюдаются в количестве вращающихся связей, число которых для Mal-ABTIA меньше (n_{вр}=3), чем для Suc-ABTIA (n_{вр}=3), молярный объем соответственно равен 283,18 и 289,37. При одинаковой полярной поверхности молекул (101,29 Å²) коэффициент распределения октанол/вода больше для бромпроизводного моноамида янтарной кислоты, чем для малеината, соответственно 2,89 и 2,87. Используя «правило пяти Липинского» [4], полученные соединения имеют потенциал биологической активности, поскольку их молекулярный вес ≤ 500 а.е.м., полярная поверхность ≤ 160 Å², количество доноров водородных связей ≤ 5, а акцепторов ≤ 10, и могут быть использованы в качестве активных компонентов лекарственных препаратов.

1. Синтез и фармакологическая активность производных тиазоло[5,4-*b*]индола / В. В. Марышева [и др.] // *Обзоры по клинич. фармакологии и лекарственной терапии.* – 2007. – Т. 5, № 2. – С. 2–19.

2. Лопатик Д.В., Куваева З.И., Бондарева О.М., Надёнов В.Э., Тычинская Л.Ю. Синтез ацильных производных тиазоло[5,4-*b*]индола // *Весці Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Серыя хімічных навук.* 2019. – Т. 55, №4. С. 436-441; <https://doi.org/10.29235/1561-8331-2019-55-4-436-441>.

3. Патент РФ № 2281951. 7-бром-4-ацетилтиазоло[5,4-*b*]-2-сукцинимид, защищающий организм от гипоксии и обладающий лечебным действием при токсическом отеке лёгкого: / В. В. Марышева, П. А. Торкунов, П. Д. Шабанов; дата публ.: 20.08.2006.

4. Lipinski C.A., Lombardo F., Domini B.W., Feeney P.J. Experimental and computational approaches to estimate solubility and permeability in drug discovery and development settings // *J. Advanced drug delivery reviews.* – 2001. – Vol.46, №-3. – P. 3-26.

**ОРГАНІЧНА ХІМІЯ,
ХІМІЯ ВИСОКОМОЛЕКУЛЯРНИХ
СПОЛУК**

STUDY OF SHRINKING OF POLYMERIC COMPOSITE MATERIALS STRUCTURED IN THE FIELD OF HDTV

Cherkashina A.N., Malykhina A.V., Rassokha O.M., Lebedev V.V., Lavrova I.O.

National Technical University "Kharkov Polytechnic Institute",

annikcherkashina@gmail.com

Shrinkage stresses in polymer composite materials (PCMs) arise during the curing process. The process of increasing shrinkage stresses begins from the moment of transition to the solid phase and continues until the completion of shrinkage. Shrinkage in PCM causes a change in the size of products, their shape, contributes to the appearance of cracks, various microdefects, a violation of the continuity of the adhesive contact at the polymer compound-substrate interface, which leads to a decrease in the durability of products. Therefore, special attention is paid to the study of shrinkage.

The influence of structuring methods of the studied PCMs, as well as the chemical nature of their components on the shrinkage processes of epoxy PCMs, has been determined. For an objective analysis of the processes occurring during the shrinkage of the studied PCMs, the test duration was 360 days. In all cases, the possible effect of shrinkage anisotropy was taken into account.

Experimental data characterize the influence of the structuring method and PCM composition on the value of linear shrinkage. Experimental data indicate that the method of structuring and the composition of PCMs have a significant impact on the nature and direction of the processes that determine their shrinkage. The change in shrinkage over time has a monotonic character without sharp changes in its value. This serves as an indirect confirmation of the fact that, during the structuring of epoxy PCMs by the convection method and in the field of HFC, the structure of the material is formed, which does not undergo significant changes over time.

Experimental data allow us to conclude that in the case of structuring epoxy binders by convection, the value of linear shrinkage is on average 25-30% higher than when structuring them in the field of high frequency current. In this case, the structuring of epoxy binders in the field of HFC leads to the fact that the rate of change in the dimensional stability in the initial period (up to 90 days) is significantly lower than that of those structured by the convection method.

This is explained by a more uniform structuring process in the field of high frequency current, which leads to the creation of a more thermodynamically stable system. It was also found that structuring of PCM in the field of high-frequency current significantly reduces the anisotropy of shrinkage in comparison with the convection method of structuring, which serves as an additional confirmation of the uniformity of structuring over the entire volume of PCM with the formation of a homogeneous structure of PCM.

It is known that the introduction of dispersed fillers into the composition of PCMs leads to a decrease in shrinkage. In this case, the structuring of the investigated PCMs in the field of HFC has a greater effect on the reduction of the shrinkage of the filled composites than in the case of their structuring by the convection method. The chemical nature of the hardeners, plasticizers and modifiers used affects the linear shrinkage and mainly determines the direction of the PCM structuring process.

The conducted studies of the shrinkage processes in PCM of epoxy binders for a long time (1 year) made it possible to establish a significant effect of the structuring method on the value of linear shrinkage and dimensional stability over time. It is shown that the structuring of the studied PCMs in the HFC field significantly reduces the linear shrinkage and ensures its invariability for a long time.

The research carried out will make it possible to develop composite materials based on epoxy binders, which are subject to increased requirements for accuracy and dimensional stability.

Molecules **3a–3f** possess two electrophilic centers, chlorosulfonyl and formyl groups, and are imidazole analogs of 2-formylbenzenesulfonyl chloride, an important reagent for the synthesis of 1,2-benzothiazole [10–12] and 1,2,3-benzothiadiazine derivatives [13] and protection of a phenolic hydroxy group [14].

1. Graeve R., Okyayuz-Baklouti I., Seiffge D. Пат. 5232922 (A) (1993). CIIA. [http:// espacenet.com](http://espacenet.com).
2. Romines K.R., Bundy G., Schwartz T.M., Tommosi R., Strohbach J., Turner S.R., Thaisrivongs S., Aristoff P.A., Johnson P.D., Skulnick H.J., Skaletzky L.L., Anderson D.J., Marris J., Gammill R.B., Luke G. Пат. 5852195 (A) (1998). CIIA. <http:// espacenet.com>.
3. Ragavendra B., Divya K.G., Radmaja A., Padmavathi V. //Ind. J. Chem. B. – 2016, – 55, – 1376.
4. Glenn M.P., Chang S.-Y., Horney C., Rivas K., YoKoyama K., Pusateri E.E., Flether S., Cumming C.G., Buckner F.S., Pendyala P.R., Chakrabarti D., Sebti S.M., Gelb M.M., Van Voorhis W.C., Homilton A.D. // J. Med. Chem. – 2006, – 49, – 5710.
5. Naganawa A., Matsui T., Saito T., Ima H., Tatsumi T., Yamamoto S., Murota M., Yamamoto H., Maruyama T., Ohuchida S., Nakai H., Kondo K., Toda M. //Bioorg. Med. Chem. – 2006. – 14. – 6628.
6. Chornous V.A., Bratenko M.K., Vovk M.V. //Russ.J.Org.Chem. – 2009. – 45. – 1210.
7. Baker R.U., Dodson R.M., Riegel B. //JACS. – 2046. – 68. – 2636.
8. Barry W.J., Finar I.L. //J. Chem. Soc. – 1954. – 138.
9. Черноус В.А., Паламар А.А., Яремий И.Н., Вовк М.В. Хим. фарм. журн. – 2013. – 47. – 28.
10. Klarmann B. //Chem. Ber. – 1952. – 85. – 162.
11. Rejeev K.G., Shashidhar S.M., Pius K., Kuruvilla B., Vivekananda M. //Tetrahedron, – 1994. – 50. – 5425.
12. Sato K., Yamane C., Jinni S., Imanishi I. //Chem. Pharm. Bull. – 1994. – 42.– 521.
13. Porcs-Makkay M., Lukach G., Pandur A., Simig G., Volk B. //Tetrahedron. – 2014. – 70. – 286.
14. Shashidhar M.S., Bhatt M.V. //J. Chem. Soc. Chem. Commun. – 1987. – 654.

**“HOST-GUEST” INTERCALATE OF CARBON NANOTUBE WITH
bis(η^5 -CYCLOPENTADIENYL)COBALT**

Mykhailenko O.V.,^{1,2} Kalenyk O.O.,¹ Babiy V.O.,² Honcharenko I.I.²

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv, alexm@ukr.net

²National Aviation University

There has been studied the type of complexation and arrangement of bis(η^5 -cyclopentadienyl)cobalt (Cobaltocene) molecules (Fig. 1.) in a double-walled (5,5)@(10,10) Carbon nanotube (DWCNT), (Fig. 2). There has been investigated the influence on complexation of “guest’s” temperature and concentration by using the MM+, PM3 and Monte-Carlo methods. Temperature growth (over ~490 K) causes gradual ruining of bonds between the “guest” (CNT) and the “host”, the latter being extruded from the intertubular space (Fig. 3). Further temperature growth up to 650-750 K is characterized with intercalate’s outer surface desorption, stabilizing the nanosystem in general and keeping the intertubular intercalate only (Fig. 4). The latter keeps electrostatically close to the intertube surface of (5,5) NT. It should be noted that the behaviour of the studied system generally resembles the behaviour of other similar complexes [1]. There have been calculated the UV-spectra of (5,5)@(10,10) CNT depending on intercalate concentration as well as the association constant for the “DWCNT –intercalate” system which makes $76.8 \text{ l}\cdot\text{mol}^{-1}$.

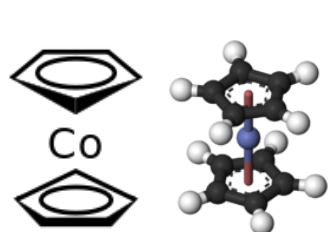


Fig. 1 Molecule of “guest” – Cobaltocene

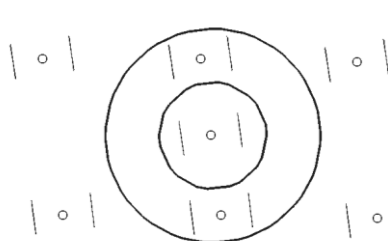


Fig. 2 Calculation structure of “host-guest” complex between (5,5)@(10,10) CNT and Cobaltocene

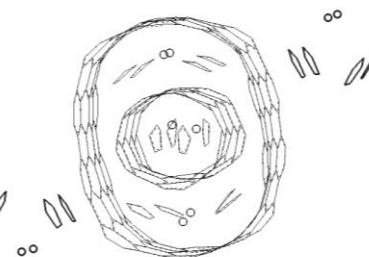
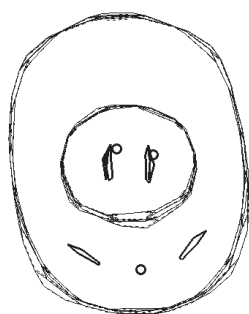
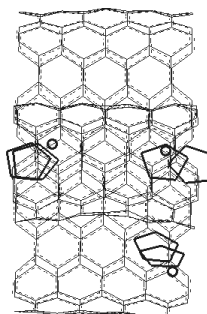


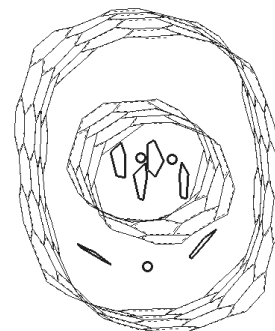
Fig. 3 Intermediate structure of “host-guest” complex between (5,5)@(10,10) CNT and Cobaltocene



a



b



c

Fig. 4 Finite structure of “host-guest” between (5,5)@(10,10) CNT and Cobaltocene (*a, b* – orthogonal projections; *c* – side view)

1. Mykhailenko O.V., Prylutsky Yu.I., Komarov I.V., Strungar A.V. Thermodynamic Complexing Of Monocyclopentadienylferrum (II) Intercalates With Double-Walled Carbon Nanotubes // 3rd International research and practice conference “NANOTECHNOLOGY and NANOMATERIALS NANO-2015” . – 2015. – August 26-29. – Lviv, Ukraine. – p. 540.

DESIGN OF FULLERENE-LACTATE COMPLEXES

Mykhailenko O.V.¹, Petrusenko S.R.¹, Vitushinska Ya.O.¹, Lagerna O.Yu.¹, Honcharenko I.I.²

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv

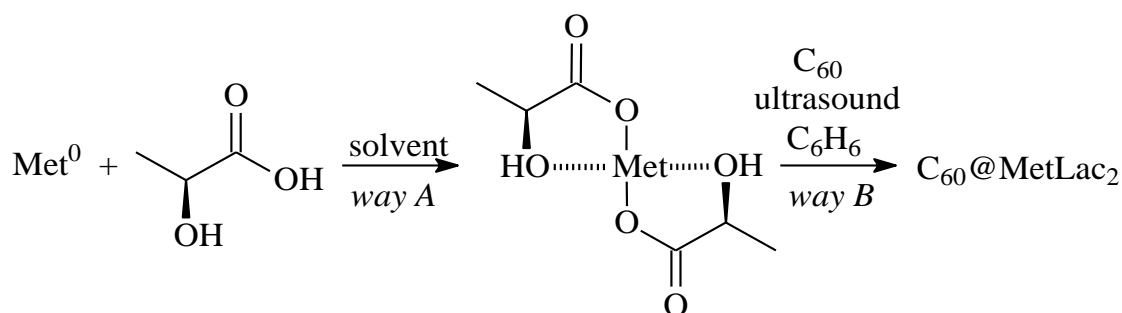
²National Aviation University, irynahoncharenko7@gmail.com

As you know, fullerene has unique physical, chemical and biological properties. Synthesis of new fullerene derivatives opens wide opportunities for their use as new drugs. On the other hand, such biological molecules as metal lactate have the ability to coordinate on the spherical aromatic surface of fullerene and form stable C₆₀-lactate complexes. Thus, we can obtain substances with new biological properties and use them as, for example, promising muscle relaxants during of the trauma therapeutically period.

Within this framework, we suggest using Mg²⁺, Ca²⁺, Sr²⁺, Zn²⁺ as a strong complexing agents, with lactic acid anion and fullerenes C₆₀ as ligands.

We have performed a quantum-chemical analysis of possible complexing of MetLac₂ (Met = Mg²⁺, Ca²⁺, Sr²⁺, Zn²⁺) with fullerene C₆₀, using MM+, PM3 and Monte-Carlo methods. There has been calculated the optimal structures, absorption spectra of C₆₀ with various amounts of MetLac₂ on the spherical surface of the latter. There has been found a constant of complex's stability which is 68.5 l·mol⁻¹ (for the MgLac₂); 55.3 mol⁻¹ (for the CaLac₂); 98.5 l·mol⁻¹ (for the SrLac₂); 108.2 l·mol⁻¹ (for the ZnLac₂) in accordance ($k_{korr} \geq 0,98$).

A series of *d*-block metal lactates was obtained *via*–“direct synthesis” strategy based on the use of metals/oxides as the starting materials (*way A*):



where Met⁰ = Mg, Ca, Sr, Zn; Solvent = CH₃OH, DMF, DMSO, H₂O.

A two-phase system consisting of an aqueous solution of lactate and a solution of fullerene in benzene was treated an ultrasound (frequency = 22 kHz, intensity = 50 W/cm², time = 1 min), see *way B*. Composition and structure of the compounds were characterized by means of elemental analyses, UV-Vis, IR spectroscopy, ¹³C-NMR.

The thesometric studies on the calcareous and cambaloid medial muscles of rats have been carried out to detect the influence of the obtaining complexes.

1. Mykhailenko O.V., Petrusenko S.R., Vitushinska Ya.O., Prylutsky Yu.I., Zavodovsky D.O., Mykhailenko O.O., Lagerna O.Yu. Design, Synthesis and Biological Properties of C₆₀-lactate Complexes // Chemistry, Physics and Technology of Surface. – 2019. – vol. 10, N 3. – P. 302-311.

2. Mykhailenko O.V., Petrusenko S.R., Vitushinska Ya.O., Prylutsky Yu.I., Zavodovsky D.O., Mykhailenko O.O., Lagerna O.Yu. Design, synthesis and biological properties of C₆₀-lactate complexes // Ukrainian Conference with International Participation Conference “Chemistry, Physics and Technology of Surface” (May 15-17, 2019). – P. 123.

MODIFICATION OF EPOXY RESINS WITH EPOXY-CONTAINING DILUENTS OF VARIOUS NATURE AND FUNCTIONALITY

Poloz O. Yu.

LTD «New Technologies», ua.apolo@gmail.com

Modification of epoxy resins by addition of low-viscosity mono-, di- and polyglycidyl ethers of aliphatic alcohols, alkylphenols is an effective way to improve the technological and operational properties of compositions based on them, in particular, wear-resistant ones.

It is essential that such modifiers contain conformationally flexible units of sufficient length between the epoxy functional groups involved in modification and curing. The use of polyglycidyl ethers of aliphatic alcohols also makes it possible to switch from classical epoxy networks to structures of the type of interpenetrating polymer networks.

Leading world companies have proposed epoxy-containing PMs of various chemical structures, the use of which for certain epoxy resins is carried out experimentally and requires significant material costs and time. Therefore, the selection of the necessary DM, taking into account their chemical structure, on the basis of predicted criteria, acquires a certain importance. These criteria are important physical and quantum chemical characteristics of DM - van der Waals volume, surface energy, solubility parameter, dipole moment, parameters of the electronic structure, which can be determined by calculation methods using the increments of atoms of these compounds, energies of molecular orbitals. This approach was used in this study. At the same time, the influence of these important characteristics of DM on their reactivity when interacting with amine hardeners was determined, the initial stages of the formation of wear-resistant epoxy compositions - wetting and spreading along model surfaces of fillers (silicon and boron carbides, corundum), which ultimately determine their structure and properties.

The aim of the work was to determine the main physical-, quantum-chemical characteristics of epoxy-containing DM from the world's leading manufacturers with the use of calculation and experimental methods, the use of these characteristics for a comparative assessment of the effect of DM on their reactivity when interacting with amines, the initial stages of the formation of wear-resistant epoxy compositions based on diene resin ED-20.

Investigations were carried out using calculation methods of atomic increments, semi-empirical PM3, experimental - "sitting" drop, static Wilhelmy method for determining the surface tension of DM.

By calculation methods, the main physical- and quantum-chemical characteristics of epoxy-containing DM were determined depending on their functionality (mono-, di-, tri- and tetra-functional), branching of the molecular structure, the number of low-polar hydrocarbon groups that were used, when assessing their effect on the reactivity when interacting with amine hardeners, the initial stages (wetting, spreading over the surface of substrates) of the formation of wear-resistant epoxy compositions.

It has been established that the calculated values of the surface energy correspond to the experimental values of the surface tension of the DM (deviations do not exceed $\pm 5\%$), which makes it possible to apply the calculated method of atomic increments for preliminary determination of this characteristic and its use in assessing the processes of wetting and spreading over surfaces of substrates.

Straight-line relationships have been established between the coefficient of spreading of DM over the investigated model high-hard surfaces and the surface tension of these compounds with a correlation coefficient of more than 0,99, which is the basis for predicting the values of their surface tension to ensure complete spreading over substrates.

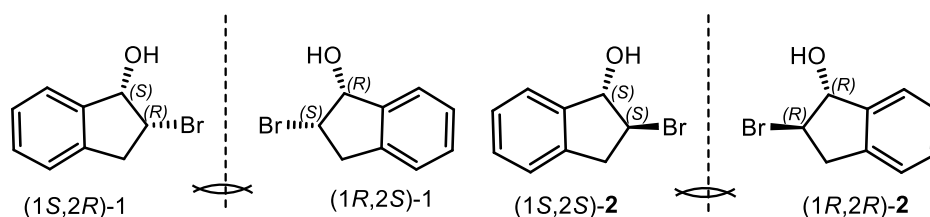
Was shown that when a given amine hardener (with its HOMO energy value) is introduced into a mixed epoxy composition (ED-20 + DM), the activity of ED-20 epoxy resin and epoxy-containing DM in curing reactions depends on their values of LUMO energies, and the determining factor is reaction of interaction of epoxy resin with a hardener.

ABSOLUTE CONFIGURATION OF VICINAL 2-BROMO-2,3-DIHYDRO-1H-IDEN-1-OLS

Prysiashnuk D.V., Kolodiazhnyi O.I.

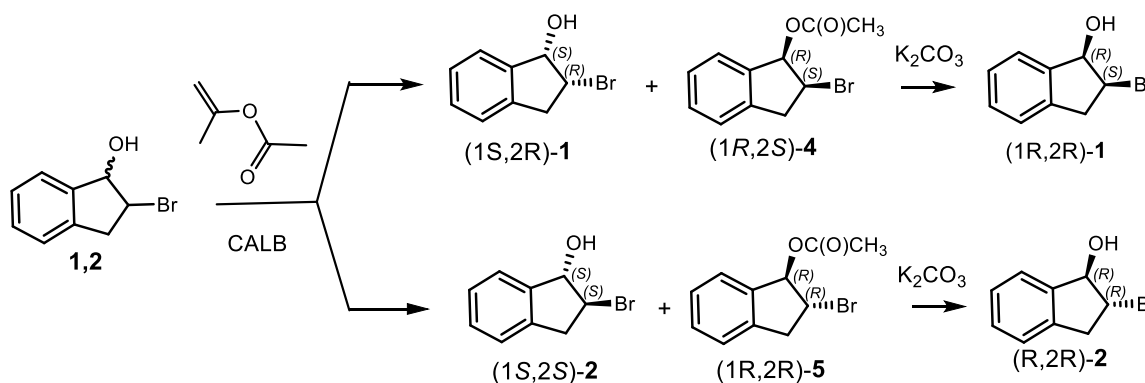
Institute of Bioorganic Chemistry and Petrochemistry, National Academy of Sciences of Ukraine,
Kyiv, Ukraine, olegkol321@ukr.net or a_vot_i_pdv@ukr.net

All four possible stereoisomers of *cis*- and *trans*-2-bromo-2,3-dihydro-1H-id-1-ols, which are important intermediates in the synthesis of biologically active compounds, were synthesized, and their configuration was studied by NMR, NOE-NMR, equations Karplus, enzymatic kinetic separation taking into account the Kazlauskas rule and X-ray structural analysis (Scheme 1).



Scheme 1

Biocatalytic *trans*-esterification with isopropynilidene acetate in the presence of *Burkholderia cepacia* and *Candida Antarctica B* lipases (Novozim 435) was used for the kinetic separation of racemates. As a result, the chiral *cis*- and *trans*-2-bromo-2,3-dihydro-1H-idene-1-ols were obtained in good yields. The enantiomeric purity of the compounds after kinetic resolution was on the level of 96-98% *ee*, and after additional recrystallization of the products ~ 99% *ee* (Scheme 2)



Scheme 2

Determination of the geometric configuration of bromindenoles was performed using ^1H and ^{13}C NMR spectroscopy. In the proton resonance spectra, the signals of the BrCH-CHOH group are at 4.25 (CHBr) and 6.3 (CHOH) ppm, Spin-spin coupling constant $^3J_{\text{HH}}$ of the vicinal protons in the the HC-CH group of *trans*-isomer is equal 5.5 ppm and the constant $^3J_{\text{HH}}$ is equal to 7 Hz, which corresponds to a dihedral angle of 145 degrees in the *trans*-2,1-bromindenol molecule, if we take into account the Karplus equation. In addition, the *trans* structure of bromindenol was confirmed by NOE experiments. The $^3J_{\text{HH}}$ constant in the *cis*-2-bromo-2,3-dihydro-1H-id-1-ol molecule is 3.5 Hz, which corresponds to a dihedral angle of 40 degrees between hydrogen atoms in the HC-CH group in good agreement with the conformational models shown in Fig. 1

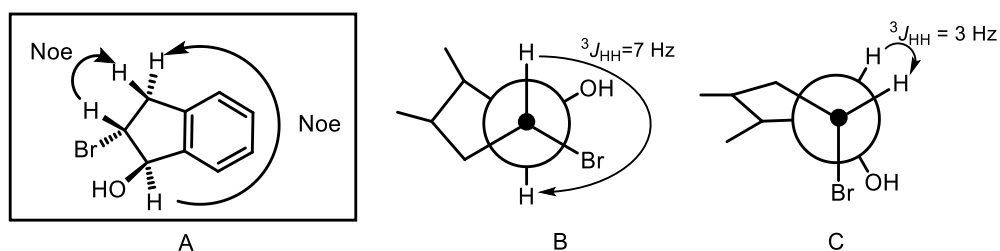


Fig. 1 NOE NMR Experiment and conformational models of **1,2**

The absolute configuration of *cis*- and *trans*-2-bromo-2,3-dihydro-1H-idene-1-ols was established by two methods - analysis of the results of enzymatic separation using the Kazlauskas rule [1] and X-ray structural analysis

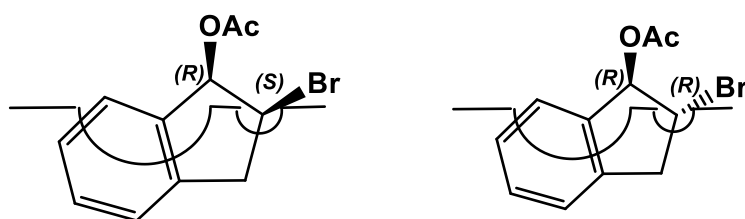


Fig. 2 Determination of the absolute configuration of 2-bromo-2,3-dihydro-1H-inden-1-ol stereomers using the Kazlauskas rule

It was found that the biocatalytic acylation proceeded according to the Kazlauskas rule, in accordance with which the (*R*)-stereomer entered the acylation reaction, while the (*S*)-alcohol remained unreacted, that was confirmed by X-ray structural analysis. The absolute configuration of all four stereomers, 2-bromo-2,3-dihydro-1H-id-1-ol, was established: (1*S*, 2*R*)-**1**; (1*R*, 2*S*)-**1**; (1*S*, 2*S*)-**2**; (1*R*, 2*R*)-**2**. The results of determining the absolute configuration using X-ray structural analysis and the Kazlauskas rule completely coincided, which confirms the high reliability of the Kazlauskas rule for determining the absolute configuration of secondary alcohols [2]

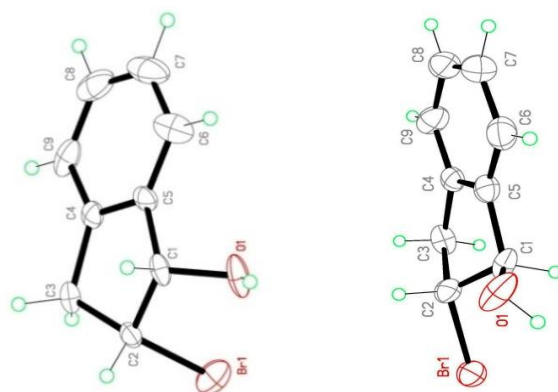


Fig. 3 Determination of the absolute configuration of 2-bromo-2,3-dihydro-1H-inden-1-ol stereomers by X-ray diffraction analysis

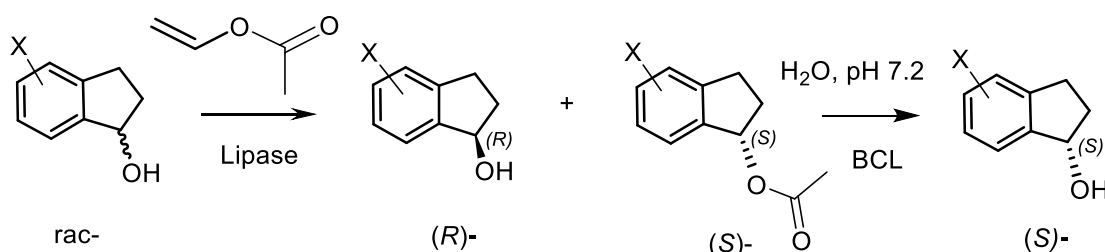
1. Kazlauskas R.J., Weissfloch A.N.E., Rappaport A.T., Cuccia, L. A. A rule to predict which enantiomer of a secondary alcohol // *J. Org. Chem.* – 1991. – 56, N8 – P. 2656-2665.
2. Kolodiazhna O. O., Kolodiazhna A. O., Kolodiazhnyi O. I. Enzymatic preparation of (1*S*,2*R*)- and (1*R*,2*S*)-stereoisomers of 2-halocycloalkanols // *Tetrahedron: Asymmetry.* – 2013. – 24, N1. – P.37–42.

DERACEMIZATION OF 2,3-DIHYDRO-1H-INDENOLS SUBSTITUTED IN AROMATIC CYCLE USING IMMOBILIZED LIPASES

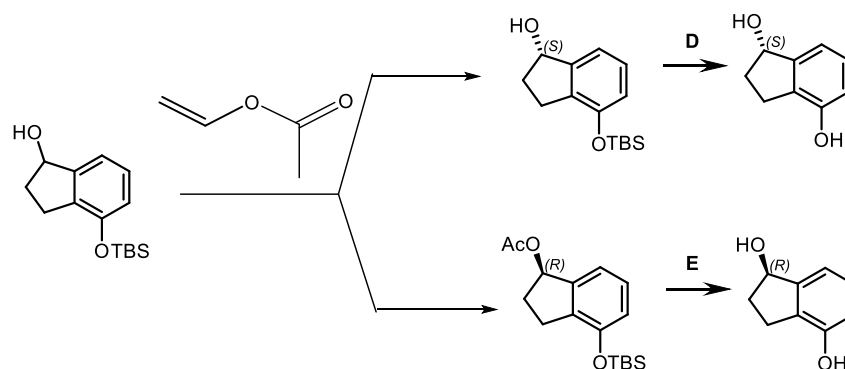
Prysiashnuk D.V., Kolodiazhnyi O.I.

Institute of Bioorganic Chemistry and Petrochemistry, olegkol321@ukr.net
National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine, a_vot_i_pdv@ukr.net

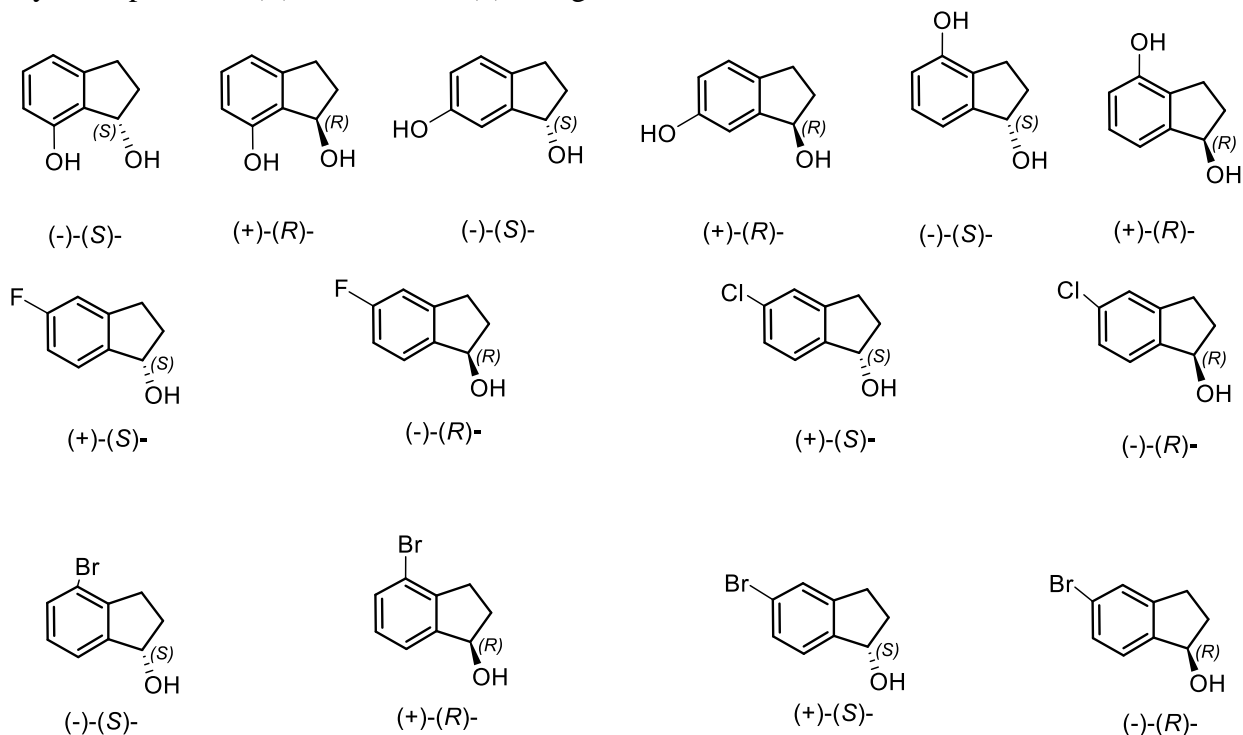
Optically active halogenated dihydroindenols and dihydroindenediols are components of many biologically active compounds. They attract close attention as synthetic blocks for the construction of important pharmaceutical preparations, peptide nucleic acids, and bioregulators. For example, indinavir is an oral drug used to treat human immunodeficiency virus infection. This protease inhibitor, a highly active antiretroviral therapy product, is used to treat HIV infection and AIDS. Here we report the convenient method for the synthesis of dihydroindenols based on the enzymatic resolution of the corresponding racemates. Racemic halodihydroindenols and dihydroindenediols were separated into enantiomers by catalyzed trans-esterification with vinyl acetate in diisopropyl ether in the presence of *Burkholderia cepacia* lipase (BCL) or CALB lipase-controlled enzymatic hydrolysis of acetates. The reaction of kinetic enzymatic hydrolysis of acetates was carried out in a two-phase system with a buffer solution of pH 7.2 in MTBE medium in the presence of a CALB biocatalyst (Novozym 435) at 45 °C.



Optimization of the deracemization process was achieved by the selection of biocatalysts, acylating reagents, solvents, temperature, as well as the introduction of sterically bulky silyl substituents into the aromatic ring. The introduction of a tert-butyldimethylsilyl group into the aromatic ring increased the efficiency of the racemates separation into enantiomers. It was found that tert-butyl methyl ether (MTBE) as a solvent, *Burkholderia cepacia* as a biocatalyst and a temperature of 35 °C are optimal conditions for the kinetic resolution of haloindenols and indandriols. In this case, (R)-halogenateddihydroindenols were isolated in 45% yield (90% in terms of stoichiometry) at 100% ee (enantiomeric excess) and (S)- halodihydroindene acetates were obtained in 40% yield (80% in terms of stoichiometry) at 93% ee after column chromatography. Chlorine and bromoindenols are colorless crystalline substances, the structure and chemical purity of which have been confirmed by NMR spectra. Optical purity was established by derivatization with Mosher acid, as well as chiral HPLC analysis on a Chiralpak OD-3 column (hexane: IPA: MeOH = 95: 2.5: 2.5), flow rate = 0.6 ml / min, $\lambda = 210$ nm). After recrystallization, the purity of the synthesized bromindanols was at the level of 99% ee.



As a result, a number of halodihydroindenols and dihydroindendiols of (*S*)- and (*R*)-absolute configuration and high enantiomeric purity was prepared. The absolute configuration of enantiomerically pure products was established using the Kazlauskas rule. The Kazlauskas' rule is an empirical model based on the postulate that enantioselectivity is proportional to the difference in size between large and medium substituents in the substrate, which in turn is determined by structure of the active site in the lipase. Using this rule of thumb, it was found that the biocatalytic acylation produces (*R*)-acetates and (*S*)-halogenindanol remains unreacted.



CHEMICAL AND MECHANICAL RESISTANCE OF BIOPOLYMERS BASED ON THE CONVENTIONAL EPOXY RESIN AND CYCLOCARBONATED SOYBEAN OIL

Purikova O.H., Gorbach L.A., Brovko O.O.

Institute of Macromolecular Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine,
olhapurikova@gmail.com

The large volume of polymeric material production increases the burden on the environment and causes certain environmental problems. Thus, the creation of environmentally “friendly” polymer materials is important in fundamental and, especially, in practical terms [1, 2]. As is well known the composite materials formed by a matrix and/or a filler derived from natural biomass are named as biocomposites [3]. Vegetable oils are one of the important renewable and natural chemicals due to their universal availability, inherent biodegradability and recycling, low price, low ecotoxicity and low toxicity toward humans [4]. Among them Soybean Oil (SbO) represents one of the cheapest, most abundant and easily functionalized natural chemical that makes it suitable for many technical applications [5]. Modified soybean oil containing active functional groups, such as cyclocarbonated ones, can be used to reduce the brittleness of epoxy materials obtained with amine hardeners. Five-membered carbonates offers very good miscibility with epoxy resins and react with aliphatic primary and secondary amines under mild conditions to form β -hydroxyurethane bonds, and thus can be linked to the resins [6, 7].

Commercial epoxy resin ED-20 (2,2'-di(4-glycidyl phenylene)-propane; DGEBA; mass fraction of epoxy groups is 20.0 - 22.5 %, Silkor, Ukraine), TEA (tris(2-hydroxyethyl) amine,

Novohim, Ukraine), mono(cyanoethyl)diethylene triamine (UP-0633M, «RIAP», Ukraine), were used as received without additional purification. Cyclocarbonated soybean oil (SbOc) was prepared and supplied by the group of researchers headed by Grishchenko V.K. [8], and contains 27.03 wt. % cyclocarbonate groups.

Mass fraction of functionalized SbO for all biocomposite samples was 10 wt.%. Mixture of hardeners (TEA+UP) used for all samples was 20 wt.% according to the monomer(s), where the mass ratio was 1 TEA : 1 UP. The homogenized reaction mixture was poured into molds and cured under three different temperature regimes. The curing mode **I** was performed at 25 °C for 4 hours; curing mode **II** at 80 °C for 2 hours, 7 hours for 100 °C; and curing mode **III** was for 1 hour at 80 °C, 1 hour at 100 °C, 3 hours at 120 °C, and 2 hours at 160 °C.

The commercial feasibility of the green polymer composites lies in their physical and chemical resistance behavior. As a result, a study on chemical resistance behavior against water, 10 wt.% H₂SO₄ and 10 wt.% NaOH, and swelling behavior of polymer biocomposites modified by cyclocarbonated soybean oil has been carried out in accordance with water absorption tests by ASTM D-570 – 98(2018) “Standard Test Method for Water Absorption of Plastics”. The percentage at equilibrium water absorption (W_{max}) was determined and the diffusion coefficient (D) was calculated using Eq. 1, and the values of these parameters are given in Table 1 for all synthesized samples.

$$D = 0,0494 \times \left(\frac{t_{1/2}}{l} \right) \quad (1)$$

where D is the diffusion constant of water (cm²/s) and ,
 l is the initial thickness of the dry polymer sample (μm),
 $t_{1/2}$ is the time corresponding to the $W_{max}/2$.

Figure 1 shows the kinetic curves of swelling in water (a), alkaline (b) and acidic media (c) of the compositions obtained by three curing modes. The character of the absorption curves indicates that all samples achieve sorption equilibrium without destruction in all aggressive media. It should be noted that the water absorption degree in distilled water of biocomposites increases compared to the corresponding samples without modifier. This increase can be attributed to the formation of a less dense netted structure of the epoxy matrix cured in the presence of SbOc. However, it is obvious that an increase in the curing temperature predictably leads to a denser crosslinking structure of the samples based on the pristine epoxy network as well as of biocomposites. Thus, equilibrium water absorption (W_{max}) decreases by 2.25 times and by 2.0 times for samples with ED-20/SbOc composition cured with mode II and III correspondently comparing with the same composition cured with mode I. Diffusion coefficient (D) indicated that the diffusion rate almost did not change for all synthesized samples in distilled water (Table 1).

Analysis of the results of the samples resistance to the alkaline medium (Fig. 1.b) showed that the nature of the absorption curves and the W_{max} value remains at the same level as in the aqueous medium for the corresponding samples. This can be due to the good resistance of the epoxy polymer matrix to alkaline aqueous media. Slight reduction of D values for biocomposites with increasing of curing temperature indicates that the equilibrium water absorption for the biocomposites occurs later. Namely, higher curing temperature leads to the formation of netted structure of biocomposites with more tortuous diffusion path that causes slowing down of solvent molecules diffusion inside the biocomposites.

The raise in curing temperature helps to decrease sorption degree for biocomposites in acidic environment as well as in alkali one. But the diffusion coefficient for biocomposites in an acidic medium, unlike in an alkaline medium, increases with curing temperature elevation, which indicates an increase in the diffusion rate in this medium. However, all synthesized samples revealed the highest sorption capacity in the acidic medium among others (Fig. 1.c), and as a consequence the least resistance to an acidic environment. It should be emphasized that ED-20/SbOc-I sample showed the least resistance to all aggressive media that may be due to the inefficient curing temperature (25 °C).

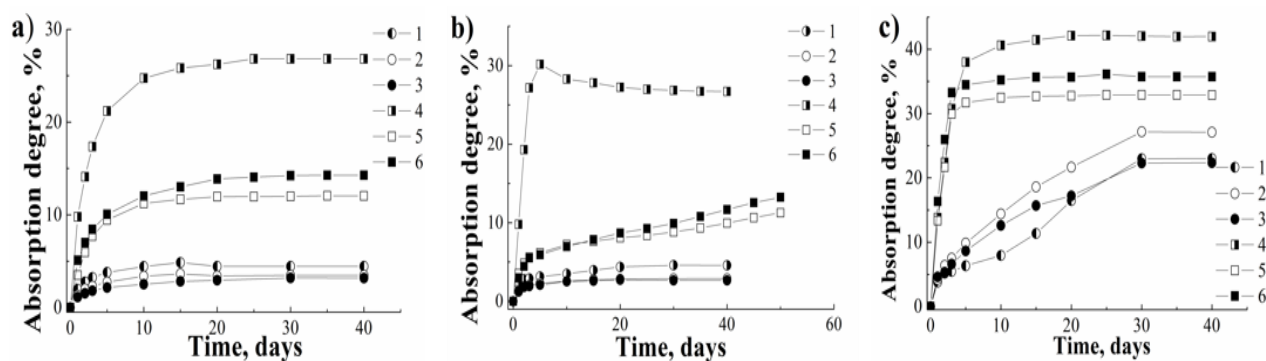


Fig. 1 Water absorption curves (a) in distilled water, (b) in alkaline medium, (c) in acidic medium of epoxy polymers based on the ED-20 and their biocomposites made with (TEA+UP) mixture of hardeners: 1, 2, 3 – pristine ED-20; 4, 5, 6 – ED-20/SbOc. 1, 4 – curing mode I; 2, 5 – curing mode II; 3, 6 – curing mode III

It should be noted, that none of the samples after exposure to aggressive media did not detect such defects in the surface of the films as cracking, delamination, discoloration, weight loss. Therefore, it can be concluded that destruction of the synthesized samples did not occur.

Table

Equilibrium water absorption (W_{max}) and diffusion coefficient (D) in different aggressive media of ED-20/SbOc biocomposites made with mixture of hardeners

Sample abbreviation	distilled water		alkaline medium		acidic medium	
	W_{max} , %	$D \cdot 10^{-10}$, $\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$	W_{max} , %	$D \cdot 10^{-10}$, $\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$	W_{max} , %	$D \cdot 10^{-10}$, $\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$
ED-20-I	4.9	4.9	4.6	6.4	23.0	0.5
ED-20-II	3.6	5.4	2.8	7.0	22.3	1.5
ED-20-III	3.2	4.7	2.7	9.4	27.2	0.9
ED-20/SbOc-I	26.8	5.8	30.2	6.7	42.1	5.8
ED-20/SbOc-II	12.0	4.8	11.3	2.9	32.9	6.8
ED-20/SbOc-III	14.2	3.9	13.2	1.0	35.8	7.1

The mechanical properties i.e. ultimate tensile strength (σ , MPa) and ultimate deformation (elongation, ε , %) for the prepared samples were performed using a “P-5” tensile testing machine according to ASTM D 638–99 (2000) and the results are presented in Fig. 2. The received data showed that the curing mode I was unsuccessful to obtain samples with the tensile strength which is characteristic of an epoxy polymers (Fig. 2). However, using of curing mode II and III leads to formation of biocomposites with mechanical properties maintained at the level of pristine epoxy polymer cured with mode III. The value of ultimate deformation changes negligibly.

Overall, the cyclocarbonated soybean oil (SbOc) was used to modify ED-20 epoxy resin. The effect of curing mode on the resistance to aggressive media and mechanical properties of the synthesized materials were studied. It is shown that the introduction of SbOc into the epoxy matrix leads to a certain decrease in the resistance of the synthesized biocomposites comparing with pristine ED-20 samples of the corresponding curing mode.

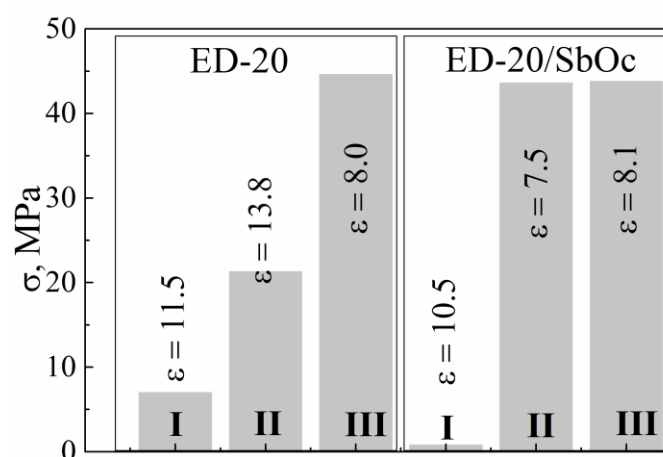


Fig. 2 Ultimate tensile strength (σ , MPa) and ultimate deformation (ϵ , %) of epoxy polymers based on the ED-20 and their biocomposites made with (TEA+UP) mixture of hardeners; **I**, **II** and **III** - curing modes

Biocomposites made with curing mode **I** are characterized with the lowest resistance to all investigated aggressive media: water absorption in the aqueous medium was $\sim 27\%$, in the alkaline $\sim 30\%$, and in acid $\sim 42\%$. However, elevating of curing temperature (mode **II** and **III**) leads to biocomposites formation with increased chemical resistance that can be due to the denser linked structure. Curing modes **II** and **III** also allowed to receive biocomposites with mechanical properties maintained at the level of pristine epoxy polymers

1. Hofer R., Selig M. *Green Chemistry and Green Polymer Chemistry // Polym. Sci.: A Comprehensive Reference*. – 2012. – 10. – P.5–14.
2. Meier M.A.R., Metzger J.O., Schubert U.S. Plant oil renewable resources as green alternatives in polymer science // *Chem. Soc. Rev.* – 2007. – 36. – P.1788–1800.
3. Mohanty A. K., Misra M., Drzal L.T. Sustainable bio-composites from renewable resources: opportunities and challenges in the green materials world // *J. Polym. Environment*. – 2002. – 10, №. 1. – P.19–26.
5. *Bio-based Plant Oil Polymers and Composites* – Edited by: S. Madbouly, Ch. Zhang, M.R. Kessler - Elsevier inc., 2016. – 213 p.
6. Bakhshi H., Yeganeh H., Mehdipour-Ataei S., Solouk A., Irani S. Polyurethane coatings derived from 1, 2, 3-triazole-functionalized soybean oil-based polyols: studying their physical, mechanical, thermal, and biological properties // *Macromol.* – 2013. – 46, № 19. – P.7777–7788.
7. Parzuchowski P.G., Jurczyk-Kowalska M., Ryszkowska J., Rokicki G. Epoxy Resin Modified with Soybean Oil Containing Cyclic Carbonate Groups // *J. Appl. Polym. Sci.* – 2006. – 102. – P.2904–2914.
8. Cornille A., Auvergne R., Figovsky O., Boutevin B., Caillol S. A perspective approach to sustainable routes for non-isocyanate polyurethanes // *Eur. Polym. J.* – 2017. – 87. – P.535–552.
9. Barantsova A.V., Grishchenko V.K., Busko N.A., Falchenko Z.V., Shevchenko V.V. Synthesis and investigation of functionalized oils derivatives of different nature as biofuel raw materials, development of polymeric materials based on them // *Catalysis and Petrochemistry*. – 2012. – № 21. - P.143–151.

THE DIASTEREOSELECTIVE INTERACTION OF NINHYDRIN AND ARYLGLYOXALS WITH THE DERIVATIVES OF *N*-HYDROXYUREA

Shtamburg V.G.¹, Shtamburg V.V.¹, Kravchenko S.V.², Anishchenko A.A.³, Mazepa A.V.⁴

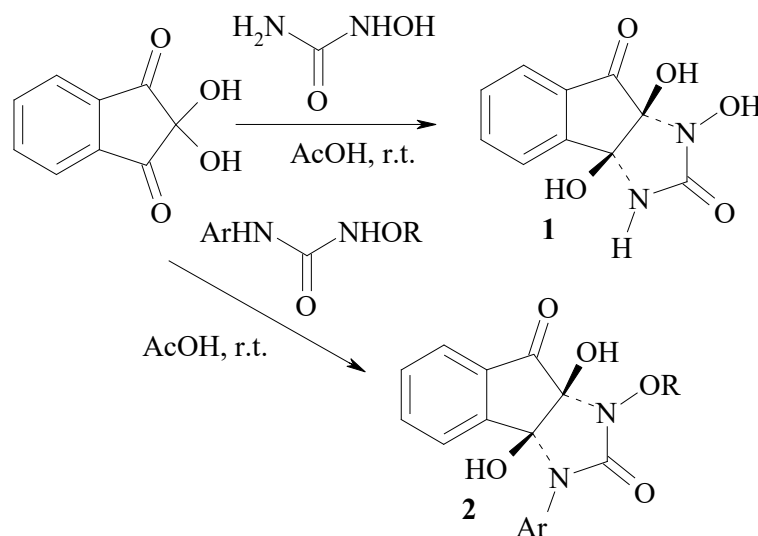
¹Ukrainian State Chemical Technology University

²Dnipro State Agrarian and Economic University, svtaylor@ukr.net

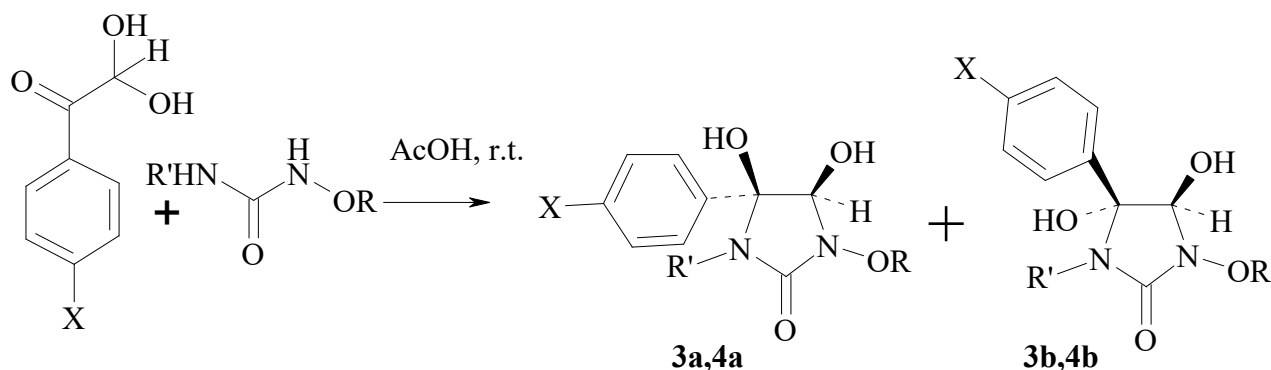
³Oles Honchar Dnipro National University

⁴A.V. Bogatsky Physico-Chemical Institute of NAS of Ukraine.

The ninhydrin interaction with *N*-hydroxyurea and *N*-alkoxy-*N'*-arylureas in acetic acid at 16–20°C gives only one of the possible diastereomers of 1,3a,8a-trihydroxy-1,3,3a,8a-tetrahydroindeno[1,2-*d*]imidazole-2,8-dione **1** and 1-alkoxy-3-alkyl-3a,8a-dihydroxy-1,3,3a,8a-tetrahydroindeno[1,2-*d*]imidazole-2,8-diones **2**, respectively. The XRD study of diastereomers **1,2** has shown that the C(3a)–OH and C(8a)–OH hydroxyl groups are *cis*-oriented to each other.



The arylglyoxals reacts with *N*-alkoxy-*N'*-arylureas and *N*-alkoxy-*N'*-alkylureas in the same conditions mainly yielding-3-alkoxy-1-aryl-4*S*,5*S*-dihydroxy-5-(4-nitrophenyl)imidazolidin-2-ones **3a** and 3-alkoxy-1-alkyl-4*S*,5*S*-dihydroxy-5-(4-nitrophenyl)imidazolidin-2-ones **4a**, respectively. The compounds **3a**, **4a** have 4-hydroxyl and 5-hydroxyl groups in the *cis*-conformation to each other. The *trans*-4,5-dihydroxydiastereomers **3b**, **4b** were observed in the products in the trace amounts.



R'=Ar (**3**), Alk (**4**)

R = Alk

X = NO₂, CO₂H, H

The structure of the compounds **3a**, **4a** was confirmed by the XRD study.

CONVENIENT SYNTHESIS OF IMIDAZO[1,5-A]PYRIMIDINE DERIVATIVES AND UNUSUAL C/N TO C/C RECYCLIZATION INTO 3H-IMIDAZO[4,5-B]PYRIDINE

Tolkunov V.S., Tolkunov A.S., Smirnova O.V., Tolkunov S.V.

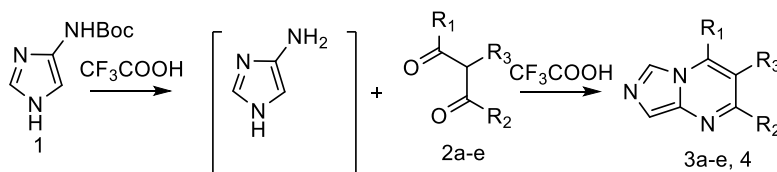
L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic Chemistry and Coal Chemistry, Ukraine,
s_tolkunov@yahoo.com

Imidazopyrimidines are structural analogs (isosteres) of purine bases, i.e. adenine and guanine, and, particularly, are being evaluated and/or used as, to mention a few, non-benzodiazepine GABA-receptor agonists, p38-kinase inhibitors for rheumatoid arthritis treatment or antibacterial agents. From the imidazopyrimidines family, imidazo[1,5-a]pyrimidines are poorly represented in the literature, most probably, due to the difficulties in obtaining 1H-imidazol-4(5)-amine derivatives.

In this report, we propose a convenient route towards obtaining of 3-substituted imidazo[1,5-a]pyrimidines **3a-e** by the condensation reaction of tert-butyl 1H-imidazol-4(5)-ylcarbamate (**1**) with malonaldehyde (or its tetraacetal) derivatives **2** in trifluoroacetic acid (Scheme 1).

As mentioned above, the proposed method involves in situ generation of 1H-imidazol-4(5)-amine via a trifluoroacetic acid catalysis under mild conditions, followed by its condensation with malonaldehydes. Thus, 3-substituted imidazo[1,5-a]pyrimidines (**3a-e**) were obtained with moderate to high yields (50-80%), as presented in Scheme 1.

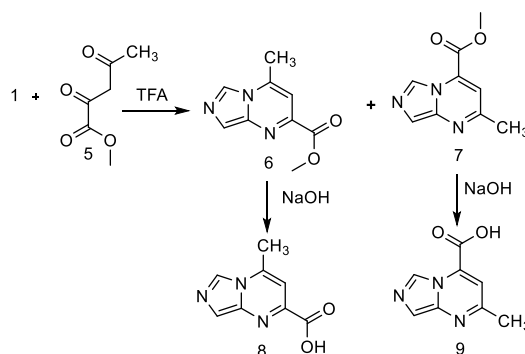
Scheme 1



3 $R_1=R_2=H$, R_3 **a** H, **b** CH_3 , **c** Cl, **d** Br, **e** CO_2Et . **4** $R_1=R_2=CH_3$, $R_3=H$.

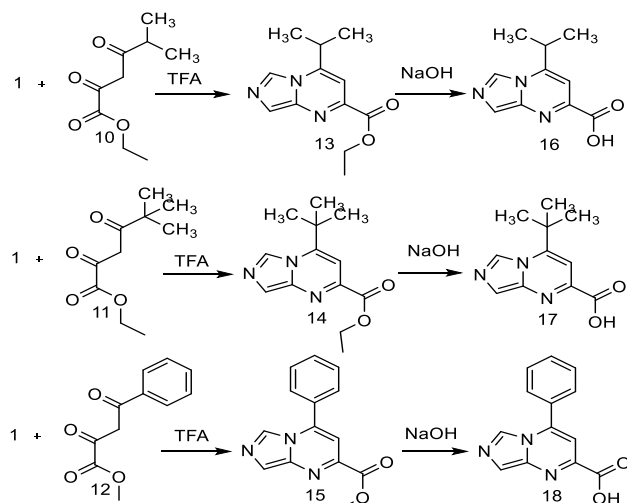
The interaction of **1** with methyl 2,4-dioxopentanoate (**5**) gives the mixture of regioisomers **6**, **7**, in the ratio of 1:1 (Scheme 2).

Scheme 2



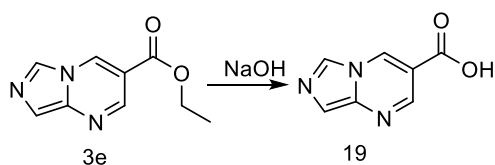
Thus, it becomes evident that the ratio of regioisomers mainly depends on the nature of the substituents surrounding 1,3-diketone moiety. Noteworthy, the reaction of Boc-amine **1** with ethyl 5-methyl-2,4-dioxohexanoate (**10**), ethyl 5,5-dimethyl-2,4-dioxohexanoate (**11**) or methyl 2,4-dioxo-4-phenylbutanoate (**12**) leads to the formation of the only regioisomer, i.e. ethyl 4-isopropylimidazo[1,5-a]pyrimidine-2-carboxylate (**13**), ethyl 4-tert-butylimidazo[1,5-a]pyrimidine-2-carboxylate (**14**) and methyl 4-phenylimidazo[1,5-a]pyrimidine-2-carboxylate (**15**) (Scheme 3). This phenomenon can be explained by a combination of sterical hindrances imposed by the isopropyl and tert-butyl moiety, and electronic factors of carboxymethyl groups in (**10-12**), thus leading to exclusive interaction of alpha-ketone moiety with amino-group of the in situ forming 4(5)-aminoimidazole.

Scheme 3



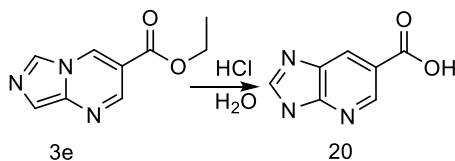
Basic hydrolysis of the obtained esters (**6,7, 13-15**) leads to the isolation of the corresponding carboxylic acids **8,9, 16-18** in high yields and purity (Scheme 4). Basic hydrolysis of ether **3e**, also leads to imidazo[1,5-*a*]pyrimidine-3-carboxylic acid (**19**).

Scheme 4



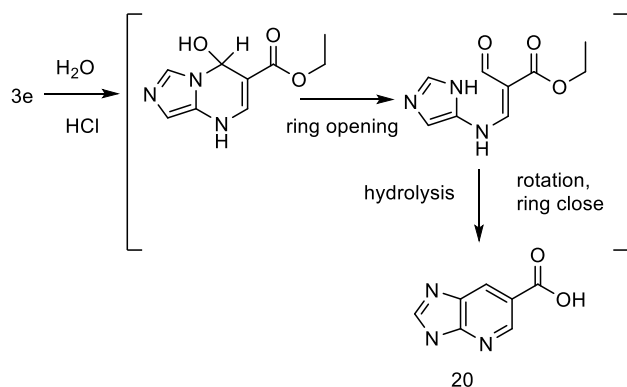
In contrast, the hydrolysis of ester **3e** in acidic conditions (2.5N HCl in dioxane/water) led exclusively to isomeric 3*H*-imidazo[4,5-*b*]pyridine-6-carboxylic acid (**20**) (Scheme 5).

Scheme 5



The formation of the 3*H*-imidazo[4,5-*b*]pyridine-6-carboxylic acid (**20**) is feasible via the Addition of Nucleophile and Ring-Opening / Ring-Closure (ANRORC scheme). In our case, it proceeds similar to Dimroth rearrangement, with the difference that Dimroth rearrangement is C-N/C-N bonds cleavage/formation, and ours is C-N/C-C bonds cleavage/formation, respectively (Scheme 6). This rearrangement take place only in acidic conditions.

Scheme 6



СИНТЕЗ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ ВИКОРИСТАННЯ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ ПОЛІМЕРНИХ КОМПОЗИТІВ ДЛЯ СІЛЬСЬКОГОСПОДАРСЬКОГО ВИРОБНИЦТВА

Брикова О.М.¹, Травінська Т.В.¹, Робота Л.П.¹, Савельєв Ю.В.¹,
Білявська Л.О.², Іутинська Г.О.²,

¹Інститут хімії високомолекулярних сполук НАНУ, alexandra.brykova@gmail.com

²Інститут мікробіології і вірусології ім. Д.К. Заболотного НАНУ

Вимогою часу сучасної агрохімії та метою науково-дослідної роботи є розробка та дослідження іономерних поліуретанових дисперсій (ПУ) оптимального складу та створення на їх основі біологічно активних полімерних композитів (БАПК) з використанням метаболітичних комплексів ґрунтових стрептоміцетів («Аверком-Н»-АВ), які впливають на ростові процеси і підвищують імунологічний статус сільськогосподарських культур та здатні до (біо)деградації в умовах довкілля після їх використання.

Екологічно безпечні ПУ було створено на основі екзополісахариду бактеріального походження – ксантану (Кс), де дисперсним середовищем і одним з полімерних складників є вода. БАПК пролонгованої дії одержано шляхом хімічної (ПУ/АВ_{хім.}) та фізичної (ПУ/АВ_{фіз.}) іммобілізації полімерним ланцюгом ПУ вітчизняного поліфункціонального біопрепарату Аверком-Н (з рістрегулюючою, адаптогенною та фітозахисною активністю) [1].

Оптимальний за складом та властивостям ПУ/Кс було одержано на основі поліоксипропіленгліколю-1000, толуїлендіізоціанату та 1,3-диметилпропіонової кислоти, шляхом подовження діізоціанатного олігоуретану Кс (2 мас. %). Одержану ПУ дисперсію було фізично модифіковано шляхом додаткового введення біологічно активного модифікатора – продукта взаємодії Кс (18 мас. %) та АВ [2].

Матрицями для БАПК служили синтезовані агрегативно стійкі, здатні до необмеженого розведення водою ПУ з розміром міцел 52-175 нм та водопоглинанням до 328 %, що є визначальним фактором деградації в умовах навколишнього середовища.

Втрата ваги, при інкубуванні зразків у ґрунт на протязі 12 місяців, досягає максимального значення у разі використання ПУ/Кс (2 + 18 (мас. %)) що підтверджує вплив Кс на перебіг деструкційних процесів. Введення екзополісахариду в макроланцюг при створенні ПУ/Кс ініціює процес деструкції під дією різних факторів навколишнього середовища, таких як підвищена вологість і температура, кислотна і лужна середа, грибів роду *Aspergillus* і *Penicillium*.

Використовуючи метод піролітичної мас-спектрометрії був вивчений процес термічної деструкції ПУ та ПУ/Кс після клімокамери та ідентифікований склад летких продуктів (рис.1).

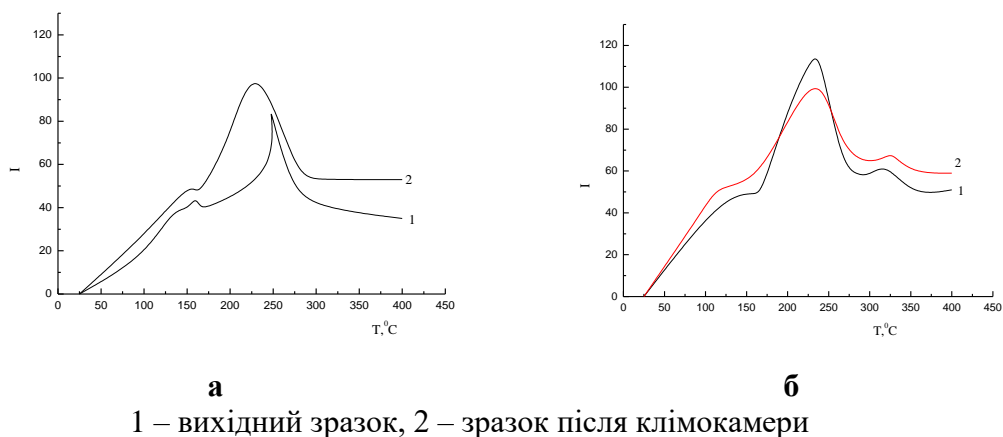


Рис.1 Температурна залежність інтенсивності іонного току виділення летких продуктів термодеструкції ПУ(а) та ПУ/Кс до та після клімокамери

Характер та інтенсивність виділення летких продуктів деструкції зразків ПУ та ПУ/Кс вказує, що введення Кс спричиняє структурні перетворення в матриці ПУ, які ініціюють деструктивні процеси під впливом УФ-опромінювання, температури та вологи за умов клімокамери. Слід визначити плавний перехід від першого максимуму до другого на термограмі ПУ, тобто область, що складається з дізоціанатних блоків, та область, яка містить олігоестерні блоки, безперервні і взаємно перекриваються. Введення Кс викликає чітке розділення двох стадій терморозкладання з проявом дізоціанатної (240°C) та олігоестерної (320°C) складових. Масспектри характеризуються іонними фрагментами, які притаманні ізоціанатній та олігоестерній складовим.

Проведено дослідження ефективності використання одержаних БАПК модифікованих біопрепаратом аверком-Н, який проявляє фітозахисну, рістстимулювальну та адаптогенну активність в лабораторних умовах. Ефективність дії одержаних БАПК оцінено по приросту стебел, коренів та біомаси проростків пшениці озимої сорту «Крижинка» після передпосівної обробки насіння по 300 мл на тону (табл.).

Таблиця 1

Показники росту пшениці після передпосівної обробки насіння

Варіант досліджу	Схожість насіння, %	Довжина корінців		Висота стебла		Сира маса 100 проростків	
		мм	% до контролю	мм	% до контролю	г	% до контролю
Контроль (вода)	93	43,8	100	29,9	100	1,6	100
Аверком-нова, 25 мл/т	97	53,8	123	32,5	109	1,8	112
ПУ, 300 мл/т	95	51,7	118	31,4	105	1,8	109
ПУ/Кс (2%+18% Кс)	96	52,4	120	33,9	113	1,8	116
ПУ+ АВ _{фіз.} , 300 мл/т	98	58,6	134	34,9	117	2,0	128
ПУ/Кс(2%+18% Кс) +АВ	99	67,5	154	41,6	139	2,2	134
ПУ+АВ _{хім.} , 300мл/т	98	58,2	133	34,3	115	2,0	126

Використання для обробки насіння пшениці біологічно активних полімерних композитів на основі іономерних вододиспергуючих поліуретанів та субстанцій мікробного походження сприяло підвищенню довжини коренової системи, так і стебел на 18-54 % та 5-39 %, відповідно, а також приросту біомаси на 9-34%.

Застосування розроблених новітніх біологічно активних полімерних композитів пролонгованої дії підвищує продуктивність агрофітоценозу, резистентність сільськогосподарських культур до біотичних і абіотичних стресів, підвищує врожайність, покращує якість отриманої продукції та поліпшує екологічний стану навколишнього середовища.

Дослідження виконуються в рамках цільової програми наукових досліджень НАН України «Нові функціональні речовини і матеріали хімічного виробництва».

1. Пат. 69639 UA, МПК C12N 1/20, C12P 17/02, C12P 17/18, C12P 19/62 (2006.01), C12R 1/465 (2006.10). Штам *Streptomyces avermitilis* – продуцент авермектинів, речовин антипаразитарної дії / Іутинська Г.О., Козирицька В.Є., Валагурова О.В., Муквич М.С., Білявська Л.О., Петрук Т.В. // Опубл. 2006. – Бюл. № 8

2. Пат. 145127 Україна, МПК C08L 75/08, C08L 99/00 Полімерна композиція / Савельєв Ю.В., Брикова О.М., Травінська Т.В., Робота Л.П., Марковська Л.А., Іутинська Г.О., Білявська Л.О. - Опубл. 2020. – Бюл. № 22

КАТІОННИЙ КРОХМАЛЬ ДЛЯ СТВОРЕННЯ НОВИХ МАТЕРІАЛІВ

Будішевська О.Г., Собуцький О.П., Костик О.А.

Національний університет «Львівська політехніка»

Olha.H.Budishevsk@lpnu.ua

Створення нових полімерних матеріалів для різних галузей діяльності людини – промисловості, будівництва, харчової промисловості, медицини, для вирішення екологічних проблем тощо є актуальною і важливою проблемою. Разом з тим відходи різноманітних полімерних матеріалів і полімерних предметів життєдіяльності людини на даний час створюють велику загрозу екології планети. Проблема таких відходів, які є карболоанцоговими полімерами в тому, що вони не є біодеградабельними, а період їх біорозкладу в природі надзвичайно тривалий. У зв'язку з цим важливою тенденцією сучасних наукових досліджень є створення нових матеріалів на основі полімерів або сполук природнього походження. Такі нові матеріали повинні бути біодеградабельними, не токсичними, мати швидкий розклад у природному середовищі на нетоксичні сполуки, мати невичерпні відновлювальні сировинні джерела, економічну привабливість.

Особливий інтерес для створення нових матеріалів представляє сировина рослинного походження, яка є нетоксичною, відтворюваною, біодеградабельною і низьковартісною. Одною з таких речовин рослинного походження є крохмаль. Відомо багато методів модифікації крохмалів, одержаних з різних рослинних джерел. Зокрема, катіонізовані крохмалі використовують переважно у паперовій і текстильній промисловостях, відомі також дослідження катіонних крохмалів як флокулянтів для осадження мінеральних суспензій.

У даній роботі окреслені результати досліджень з одержання катіонних крохмалів через взаємодію амінуючого реагенту (АР) 2-гідрокси-3-хлоропропілтриетиламоній хлориду з кукурудзяним крохмалем (Кр) та деяких аспектів його застосування.

Катіонний крохмаль одержували взаємодією АР і кукурудзяного крохмалю у присутності NaOH (рис. 1) [1].

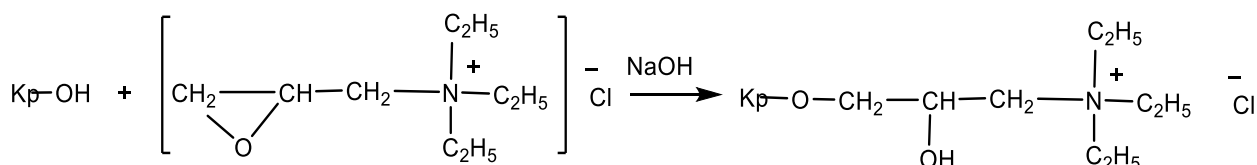


Рис.1. Схема взаємодії кукурудзяного крохмалю з 2-гідрокси-3-хлоропропілтриетиламоній хлоридом з утворенням катіонного крохмалю

Амінуючий реагент 2-гідрокси-3-хлоропропілтриетиламоній хлорид одержували однореакторним методом взаємодією триетиламіну, хлоридної кислоти та епіхлоргідрину у присутності води і каталізатора [1]. В результаті катіонування кукурудзяного крохмалю одержували колоїдно розчинний у воді катіонний крохмаль (КК) із ступенем заміщення атомів водороду в гідроксильних групах піранозних циклів крохмалю (СЗ) до 0,4. Показано, що СЗ залежить від співвідношення АР : крохмаль, NaOH : АР та кількості води.

Одержаний КК застосували для одержання рН чутливих гідрогелів через радикальну прищеплену кополімеризацію з акриловою кислотою при ініціюванні *трет*-бутилгідропероксидом у водному середовищі у присутності зшивача метилен-біс-акриламід. При набряканні у водному середовищі зшиті кополімери КК-пр-поліакрилова кислота (КК-пр-ПАК) формували прозорі, механічно міцні гідрогелі. Ступень рівноважного набрякання (СРН) КК-пр-ПАК залежав від рН середовища.

Каркас гідрогелю - кополімер КК-пр-ПАК містив ланцюги КК з катіонними фрагментами і ланцюги поліакрилової кислоти (ПАК) з С(О)ОН групами. Набрякання у

кислому середовищі зумовлено зростанням сольватації катіонних груп і колапсом $C(O)OH$, а зростання $СРН$ у лужному середовищі зумовлено іонізацією $C(O)O^-$ груп у ланцюгах ПАК. При рН 6,0 $СРН$ мінімальний, що можна пояснити мінімальною іонізацією унаслідок електростатичної взаємодії катіонних та $C(O)O^-$ груп.

Такі рН залежні гідрогелі можуть бути використані при створенні засобів лікування та догляду за шкірою як абсорбенти біологічно активних і лікарських речовин.

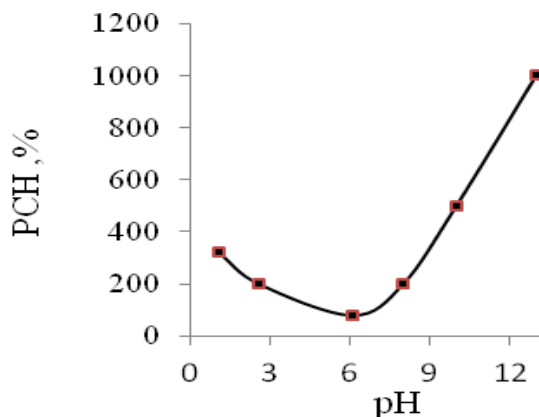


Рис. 1 Залежність ступеня рівноважного набрякання кополімеру КК-пр-поліакрилова кислота від рН середовища

Синтезований катіонний крохмаль із ступенем заміщення 0,21 досліджено як флокулянт для освітлення сироватки (осадження таких речовин, як молочна кислота, інші органічні кислоти, хлоридна кислота, глобуліни та сироватковий альбумін тощо) після виробництва кисломолочного сиру. Показано, що швидкість освітлення залежить від концентрації катіонного крохмалю і рН сироватки. Найбільша швидкість освітлення спостерігається при концентраціях катіонного крохмалю 43,7 - 58,0 мг/л і рН сироватки нижче ізоелектричних точок протеїнів сироватки — рН 3,8. Одержані результати дозволяють розглядати катіонний крохмаль, одержаний спрощеним методом як перспективний недорогий, біодеградабельний, нетоксичний флокулянт для осадження речовин сироватки після виробництва кисломолочного сиру і подальших досліджень використання катіонного крохмалю як флокулянта.

Катіонний крохмаль також досліджено як флокулянт для осадження з водних розчинів аніонактивного емульгатора алкілполіоксиетилсульфату (лауретсульфату). Показано, що при додаванні КК із ступенем заміщення 0,21 у водні розчини лауретсульфату найбільша повнота осадження лауретсульфату спостерігається у водних середовищах з кислотністю близько рН 4,0 при визначеній оптимальній концентрації флокулянта КК.

Таким чином катіонний крохмаль може бути запропонований для подальших досліджень як недорогий, біодеградабельний, нетоксичний флокулянт для стічних вод харчової промисловості і косметологічної галузі та для створення нових рН залежних гідрогелів.

1. Kostyk O. A., Budishevska O. H., Vostres V. B. Cationation of starch with an aminating reagent based on triethylamine and epichlorohydrin // *Voprosy khimii i khimicheskoi tekhnologii*. – 2019. – N 6. – P.113 – 120.

ДЕКОНТАМІНАЦІЙНІ СИСТЕМИ ДЛЯ ЗНИЩЕННЯ ГЛІФОСАТУ

Вахітова Л.М., Бессарабов В.І., Таран Н.А.

Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАН України,
lubovvakhitova@gmail.com

N-фосфометилгліцин (гліфосат) є одним з найпоширеніших препаратів гербіцидної дії, що до недавнього часу вважався як безпечний пестицид агрохімічної промисловості. Але дослідження останніх років підтверджують факти його безпосереднього впливу на розвиток ембріону та плоду (розлади аутичного спектру), а також на підвищення ризиків виникнення лімфогемопоетичних онкологічних захворювань [1]. Відповідно до класифікації ЄСНА гліфосат має також токсичний вплив на слизові оболонки організму та є шкідливим для водної флори і фауни [2].

Метою даного дослідження є вивчення реакційної здатності N-фосфометилгліцину в реакціях нуклеофільного розщеплення та окиснення за участю пероксиду водню (H_2O_2), гідроксид- (HO^-) та пероксид- (HOO^-) аніонів. Як реакційне середовище була досліджена мікроемульсія типу «олія у воді» складу: гексан (1,0 мас. %), n-бутанол (10,0 мас. %), цетилтриметиламоній бромід (5,5 мас. %). вода (83,5 мас. %).

Встановлено, що при наявності в мікроемульсійному середовищі тільки OH^- -аніону (рН 10-13) розкладання гліфосату здійснюється з край низькими швидкостями – $k_{HO^-}^2 < 10^{-5}$ (табл.). Тому логічно припустити, що в системі OH^-/H_2O_2 найбільш вірогідними механізмами розпаду N-фосфометилгліцину є нуклеофільний пергідроліз HOO^- аніоном та окиснення пероксидом водню H_2O_2 . У цьому випадку рівняння для спостережуваної константи швидкості k_i має вираз:

$$k_i = k_{HOO^-}^2 [HOO^-] + k_{H_2O_2}^2 [H_2O_2]_e, \quad (1)$$

де $k_{HOO^-}^2$ та $k_{H_2O_2}^2$ – константи швидкості реакцій другого порядку нуклеофільного заміщення та окиснення відповідно, $[HOO^-]$ та $[H_2O_2]_e$ – концентрації пероксид аніону та пероксиду водню при заданому значенні рН.

Розраховані згідно з рівн. (1) константи швидкості реакцій другого порядку нуклеофільного заміщення та окиснення наведені у табл.

Таблиця

Константи швидкості розкладання N-фосфометилгліцину

Система	Константа швидкості, 10^4 , л/моль с		
	$k_{HO^-}^2$	$k_{HOO^-}^2$	$k_{H_2O_2}^2$
Мікроемульсія	> 0,1	1,21	8,34
Вода [3]	> 0,1	2,00	12,5

Незважаючи на зниження реакційної здатності HOO^- та H_2O_2 в мікроемульсії, концентрування субстрату в об'ємі мікрокраплі (відповідно до значень констант зв'язування фосфорорганічних сполук) дозволяє прогнозувати прискорення нуклеофільного та окиснювального розкладання гліфосату в середньому в 50-100 разів в порівнянні з аналогічними процесами у воді.

1. Chang E.T., Delzell E. Systematic review and meta-analysis of glyphosate exposure and risk of lymphohematopoietic cancers // J Environ Sci Health B. – 2016. – 51, № 6. – P.402–34.
2. Glyphosate not classified as a carcinogen by ECHA. ECHA. URL: <https://echa.europa.eu/-/glyphosate-not-classified-as-a-carcinogen-by-echa>.
3. Bessarabov V., Vasylenko V., Vakhitova L. Et all. Development of a decontamination system for decomposing N-(phosphonomethyl)glycine // Eastern-European Journal of Enterprise Technologies. - 2019. - № 3(6). - С. 6-13.

КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ОЛІГОМЕРНИХ СПОЛУК ТА СИНТЕЗ ОЛІГОУРЕТАНІВ НА ЇХ ОСНОВІ

Віленський В.О., Стасюк А.В., Мазурик А.В., Мандрійчук Б.В.

Житомирський Державний Університет І. Франка

volodymyr-vilensky@ukr.net

Напрямок, про який я вважаю необхідним розвивати є дуже важливим і новим в стінах мого Університету. Це квантово-хімічне моделювання органічних олігомерних сполук і синтез олігоуретанів на їх основі. Мені приємно повідомити, що минулого року було підготовлено на природничому факультеті три магістри з даного напрямку. З результатами цих досліджень я хочу вас ознайомити, але спочатку коротко, чому були обрані біфункціональні олігомерні сполуки для синтезу олігоуретанів. Поліуретани, за поширеністю вживання знаходяться на четвертому місці в мвіті і досить складно придумати, де ці полімери не можуть бути примінені, це по-перше. По друге, реакція поліприсєднання / поліконденсації приваблива прямою взаємодією інтермономерів і стехіометричний склад інтермономерів (коінтермономерів) забезпечує отримання високомолекулярний продукт з прогнозованими хімічними і фізико-механічними властивостями.

Для виконання досліджені було обрано два типи гнучких блоків: олігоетиленгліколь $\text{H}(\text{OCH}_2 - \text{CH}_2)\text{OH}_{n=10}$ (OEG $\text{MM}=480\text{г}\cdot\text{моль}^{-1}$) олігоетилентерефталат $[-(\text{OC})-\text{C}_6\text{H}_4-(\text{CO})\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{O}-]_{n=10}$. (OETPh $\text{MM}=1900\text{г}\cdot\text{моль}^{-1}$). Як видно виразів, перший є простим, гнучким олігоетером, тоді як інший це складний, полярний і гетероланцюговий олігоестер.

В якості жорстких блоків: обрані найбільш поширені сполуки, а саме: ароматичні 2,4-[OCN-C₆O₄-NCO] (2,4-TDI); 2,6-[OCN-C₆O₄NCO] (2,6-TDI); 4,4'-[OCNC₆H₄-CH₂-C₆H₄-NCO] (4,4'-DPhMDI DPhMDI); та аліфатичний 1,6-[OCN-(CH₂)₆-NCO] (1,6-GMDI) діізоціанати.

Вихідні сполуки – олігоуретани (OUR) мали наступний склад: на 2 моля діізоціанатів залучали 1 моль олігомерних гліколей (OEG-480) або (OETPh-1900).

Побудовані моделі олігоетерів, діізоціанатів послідовно були піддані Geometry Optimization для визначення їх статичних та динамічних властивостей.

Створені відповідно до кожного олігоетеру і його діізоціанату певні олігоуретани були досліджені алгоритмом Molecular Mechanics Force Field (MM+Options). Отримані результати, які частково наведені нижче, дозволили залучити наступний алгоритм – Molecular Dynamics. Гнучкі та жорсткі сполуки і модельні OUR були досліджені в зальному часовому інтервалі $\text{Times}=2,9\text{ps}$, але температурні умови дослідження (Simulations) були різними, оскільки олігоетери мають у своєму складі слабкі етерні (-O-) групи.

Коротко про отримані результати. Дослідження виконувались в силовому полі MM+ олігомерних ланцюгів OEG-480 та OETPh -1900 результати в таблиці.

З наведених результатів чітко прослідковується зміни властивостей кінцевого продукту OUR, обумовлені впливом складових реагентів. Зрозуміло, що це не повний об'єм можливих змін в енергетичних, діелектричних електричних (μ, D) характеристиках олігоуретанів і це дослідження будуть нами продовжені. Ми розумієм важливість початих досліджень квантово-хімічних синтезів, оскільки ці дослідження дозволяють зазирнути за межу, де формуються індивідуальні властивості одиничних макромолекулярних станів речовин, які мають назву моно-високомолекулярні сполуки (m-VMC).

Таблиця 1

Характеристики гнучких блоків

Параметр	OEG-480	OETPh-1900
E_{total} , kcal/mol	30.819	86,447
μ_D	1,36	0,615
Electrostatic a.u.	-0,094	14,677
Dihedral angel	0,021	14,68
vdw force	18,27	47,77

Таблиця 2

Результати жорстких блоків OUR

Параметр	2,6-TDI	2,4-TDI	4,4'DPhMDI
E_{total} , kcal/mol	33,44	126,44	57,86
$E_{kinetic}$ kcal/mol	15,22	52,92	34,53
$E_{potential}$	18,22	73,52	23,33
μ_D	2,35	1,511	4,994
vdw _{force}	10,93	3,80	5,055

Таблиця 3

Результати OUR на основі OEG-480

Параметр	OEG-480→2,6TDI	OEG→2,4TDI
E_{opt} , kcal/mol	54,61	33,38
E_{total} , kcal/mol	154,88	120,0
$E_{potential}$, kcal/mol	90,20	75,24
$E_{kinetic}$, kcal/mol	64,68	44,76
μ_D	7,854	1,498
Electrostatic, a.u.,	-16,978	16,237
wdv forces	36,114	30,376

1. Smith, SJ; Sutcliffe, BT. "The development Of Computational Chemistry in the United Kingdom", Reviews in Computational Chemistry. – 1997. – 10. – 271-316.

2. Тим Кларк. Компьютерная химия. Практическое руководство по расчетам структуры и энергии молекулы. – М.: Мир, 1990. – 385 стр.

СИНТЕЗ НОВЫХ 1,2,3-ТРИАЗОЛОПИРИДИНОВЫХ ГИБРИДНЫХ МОЛЕКУЛ КАК ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ПРОТИВОРАКОВЫХ АГЕНТОВ

Гелеверя А.А., Кулинич В.О., Коваленко С.Н.

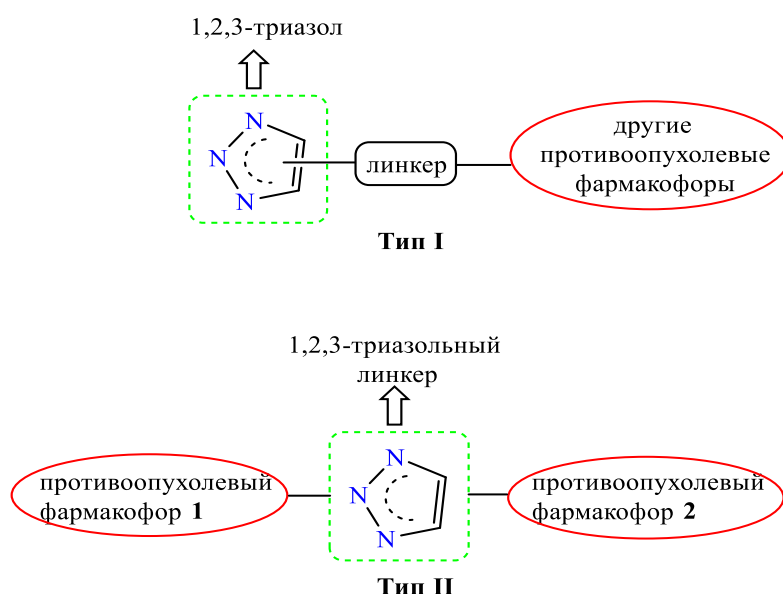
Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина, anna.gelevyral@gmail.com

В последнее время опубликовано ряд работ, посвященных синтезу и изучению противораковой активности 1,2,3-триазолопиридиновых гибридных молекул [1-3].

Исходя из идеи гибридных молекул, в которых ковалентно объединяют два или более фармакофора в единую молекулярную систему, были предложены два типа 1,2,3-триазольных гибридов:

Тип I – 1,2,3-триазольный фармакофор связывается с другими противораковыми фармакофорами через различные линкеры.

Тип II – 1,2,3-триазольный фармакофор используется как линкер, связывающий два противоопухолевых фармакофора.



Нами были разработаны синтетические подходы и получены систематические ряды новых гибридных молекул, содержащие 1,2,3-триазольный и пиридиновый фрагменты: 4-(1H-1,2,3-триазол-1-ил)пиридина, 4-(1H-1,2,3-триазол-1-ил)-1,4-дигидропиридина.

Структура полученных веществ была подтверждена с помощью ЯМР-спектроскопии на ядрах ^1H и ^{13}C , а также данными LC/MS.

Полученные 1,2,3-триазолопиридиновые гибридные молекулы являются перспективными биологически активными соединениями и представляют несомненный интерес для фармакологических исследований, в том числе и для поиска новых противораковых агентов.

1. Lal K., Yadav P. Recent advancements in 1, 4-disubstituted 1H-1, 2, 3-triazoles as potential anticancer agents //Anti-Cancer Agents in Medicinal Chemistry (Formerly Current Medicinal Chemistry-Anti-Cancer Agents). – 2018. – Т. 18. – №. 1. – С. 21-37.

2. Akhtar J. et al. Structure-activity relationship (SAR) study and design strategies of nitrogen-containing heterocyclic moieties for their anticancer activities //European journal of medicinal chemistry. – 2017. – Т. 125. – С. 143-189.

3. Prachayasittikul S. et al. Roles of pyridine and pyrimidine derivatives as privileged scaffolds in anticancer agents //Mini reviews in medicinal chemistry. – 2017. – Т. 17. – №. 10. – С. 869-901.

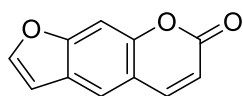
СИНТЕЗ ПОХІДНИХ ПСОРАЛЕНУ І АНГЕЛІЦИНУ В РЯДУ НЕОФЛАВОНІДІВ

Глібов Є.К.^{1,2}, Москвіна В.С.¹, Шокол Т.В.¹, Хиля В.П.¹

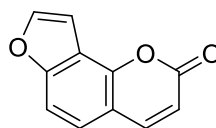
¹Київський національний університет ім. Тараса Шевченка, glibov09@gmail.com

²НВП «Снамін», м. Київ

Природні кумарини, що містяться головним чином у рослинах сімейств Аріасеae, Asteraceae і Rutaceae, привертають увагу своїм структурним різноманіттям і широким спектром біологічної активності. Серед них знайдено більше 130 представників 4-фенілкумаринів, які були виділені в окрему групу неофлавоноїдів. Особливе місце серед природних кумаринів посідають фурукумарини, що завдяки своїм фотосенсибілізуєчим властивостям широко застосовуються в терапії таких захворювань шкіри, як псоріаз, вітіліго, atopічний дерматит. Першими представниками фурукумаринів лінійної і ангулярної будови є псорален і ангеліцин.

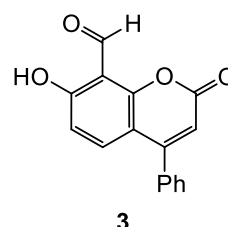
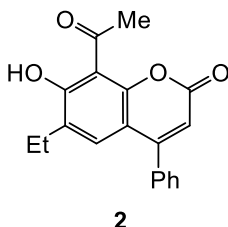
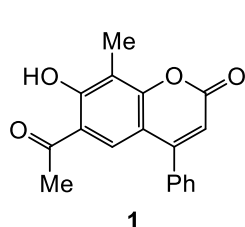


псорален

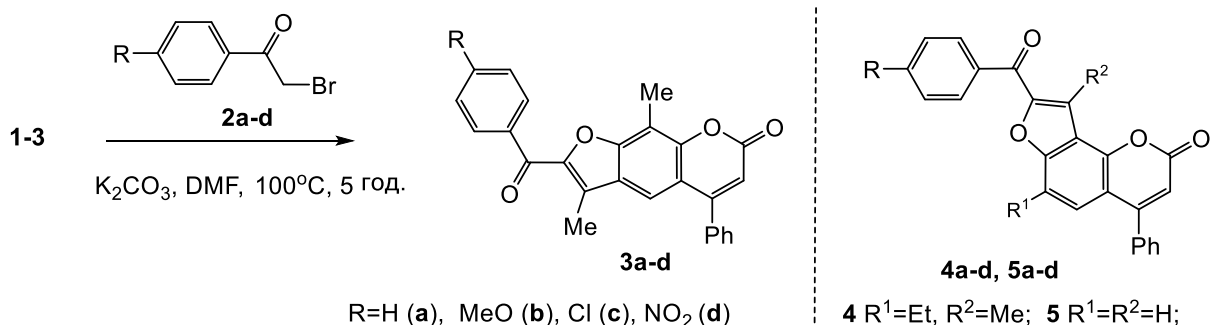


ангеліцин

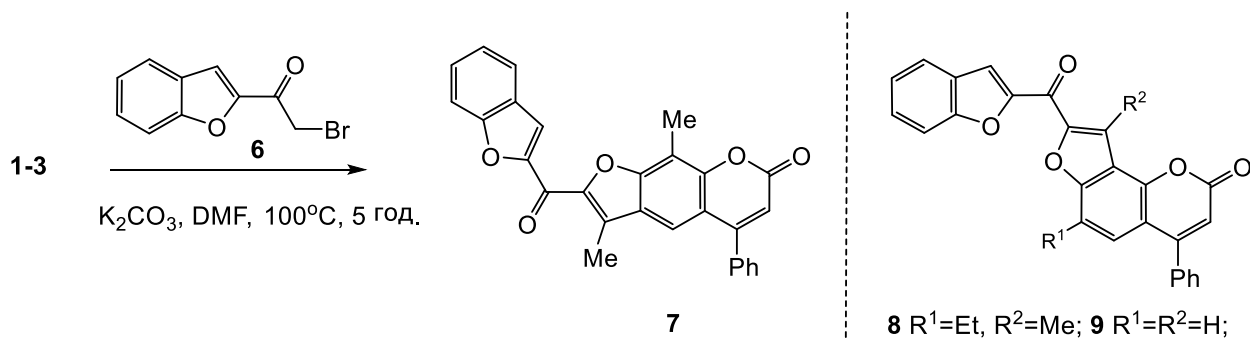
Метою цієї роботи є синтез похідних псоралену і ангеліцину в ряду неофлавоноїдів. Зручними вихідними сполуками для побудови системи фурунеофлавоноу виявились *орто*-гідроксиацетил(форміл)неофлавонони **1-3**. 6-Ацетил-7-гідрокси-8-метилнеофлавонон (**1**) і 8-ацетил-7-гідрокси-6-етилнеофлавонон (**2**) були синтезовані нами з відповідних 7-гідроксинеофлавононів у дві стадії при ацилюванні оцтовим ангідридом в піридині з наступним перегрупуванням Фріса, а 7-гідрокси-8-формілнеофлавонон (**3**) був отриманий формілюванням 7-гідроксинеофлавонону по реакції Даффа [1].



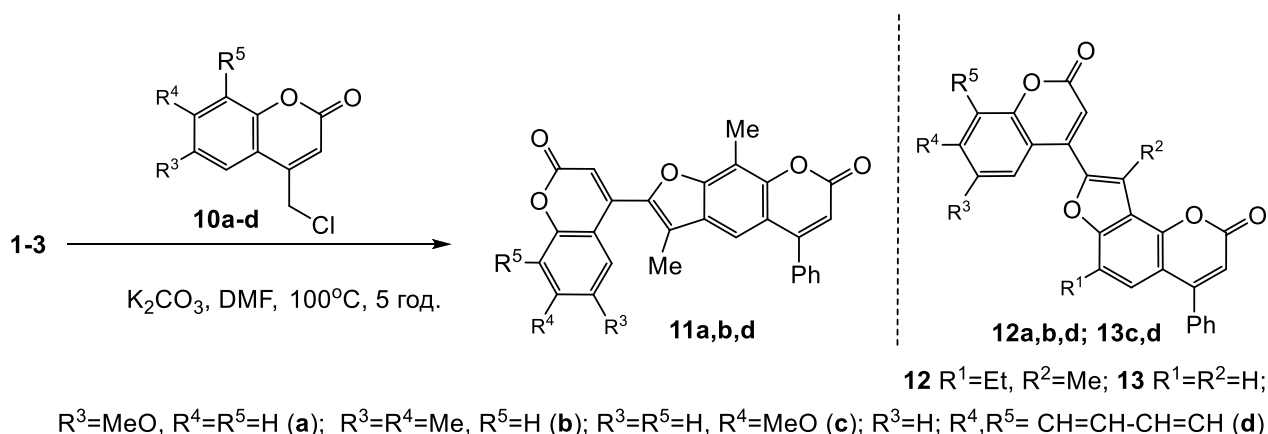
Сполуки **1-3** вводили в реакцію із заміщеними фенацилбромідами **2a-d** при нагріванні (100°C) в диметилформаміді в присутності поташу. В результаті одночасного алкілювання гідроксильної групи та конденсації за карбонільною групою 6(8)-ацетил(форміл)-7-гідроксинеофлавонону відбувалось анілювання фуранового циклу до кумаринової системи, що дозволило отримати 2-ароїл-3,9-диметил-5-феніл-7*H*-фуро[3,2-*g*]хромен-7-они **3a-d** і 8-ароїл-4-феніл-2*H*-фуро[2,3-*h*]хромен-2-они (**4a-d**, **5a-d**) в одну стадію з хорошими виходами.



Застосування 2-бромоацетилбензофурану (**6**) в реакції з *орто*-гідроксиацетил(форміл)-неофлавонами **1-3** привело до утворення фуроїлзаміщених фуронеофлавонів лінійної (**7**) та ангулярної будови (**8, 9**).



В результаті взаємодії неофлавонів **1-3** з 4-хлорометилкумаринами **10a-c** та їх бензоанельованим аналогом **10d** в розроблених нами умовах були отримані макромолекули, що являють собою ансамблі кумаринів з фуронеофлавоноїдним структурним фрагментом – сполуки **11-13**.



Таким чином нами успішно розроблена ефективна методика одностадійного синтезу похідних псоралену та ангеліцину в ряду неофлавоноїдів, модифікованих ароїльними, фуроїльним і кумариновими замісниками, потенційних біологічно активних сполук для потреб медичної хімії [2-4].

1. Moskvina V. S., Khilya V. P. Synthesis of pyrano[2,3-*f*]chromen-2,8-diones and pyrano[3,2-*g*]chromen-2,8-diones based on *o*-hydroxyformyl(acyl)neoflavonoids. // Chem. Nat. Compd.- 2008.- V. 44, № 1. - P. 16–23.

2. Shokol T. V., Moskvina V. S., Hlibov Ye. K., Khilya V. P. Neoflavonoid Angelicin Derivatives. // Chem. Nat. Compd.- 2019.- V. 55, № 4. - P. 716–718.

3. Глібов Є.К., Москвіна В.С., Шокол Т.В. Хиля В.П. Синтез 2-ароїл- та (2-оксо-2Н-4-хроменіл)фуоро[3,2-*g*]неофлавонів. // Доповіді НАН України – 2019.- № 11.- С. 66-72.

4. Shokol T. V., Moskvina V. S., Hlibov Ye. K., Frasinuk M. S., Khilya V. P. Synthesis of furoneoflavones modified by coumarin and (het)aroyl substituents. // Chem. Nat. Compd.- 2021.- V. 57, № 1. - P. 33–37.

СТВОРЕННЯ ВОДОДИСПЕРГУЮЧОГО ОРГАНОМОДИФІКОВАНОГО МОНТМОРИЛОНІТУ

Гончар О.М.

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України, lexgon@ukr.net

Одними з найпоширеніших типів нанонаповнювачів для створення полімерних органо-неорганічних нанокомпозитів є шаруваті силікати, зокрема монтморилоніт (ММТ) [1, 2]. Лінійні розміри неорганічних шарів ММТ складають близько 200 нм у довжину і 1 нм у ширину [3]. Завдяки такому співвідношенню площі до товщини ММТ має велику питому поверхню та є носієм наноструктури. Відсутність сумісності неорганічних і органічних компонентів – основна проблема, яку треба вирішувати при створенні таких матеріалів. Проблема сумісності органічної та неорганічної складової вирішується модифікуванням ММТ органічною речовиною.

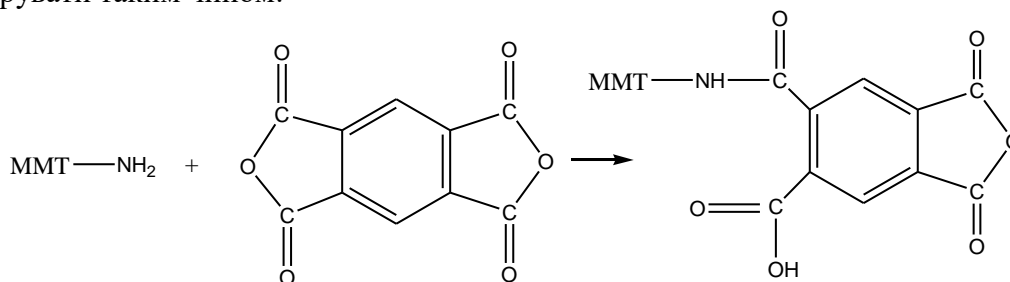
Роль модифікатора, що адсорбується на поверхні ММТ, є визначальною у процесах міжфазної взаємодії, розподіленні наночасток у полімерній матриці, здатності до розлуценні або ексfolіації нанонаповнювача. Тому, при створенні полімерних нанокомпозитів на основі конкретних типів полімерів надзвичайно важливо розробити шляхи модифікування поверхні неорганічних часток що приведуть до максимально ефективної реалізації нанонаповнювача.

Створення полімерних нанокомпозитів з підвищеними експлуатаційними властивостями на основі полярних гетероланцюгових полімерів і модифікованих шаруватих силікатів є дуже актуальною проблемою сучасного полімерного матеріалознавства. Використання модифікованого синтезованими нами модифікаторами ММТ, як нанонаповнювача для полярних поліконденсаційних полімерів є інструментом створення нових полімерних нанокомпозитів з високими експлуатаційними властивостями [4].

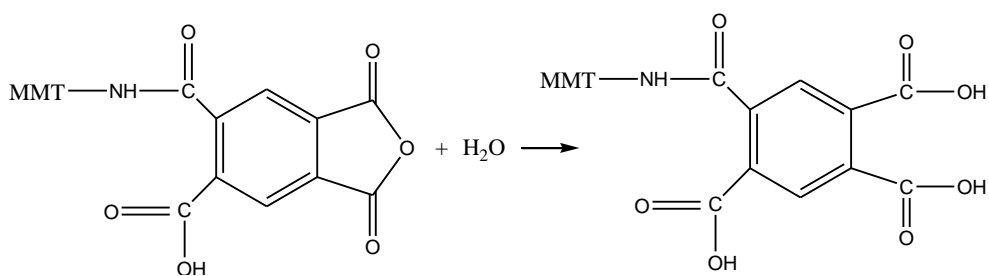
В даній роботі запропоновано використання нового синтезованого нами модифікатору ММТ, що містить у своєму складі одночасно полярні уретанові фрагменти та реакційно-здатні аміногрупи [5]. Доступні реакційно-здатні аміногрупи відкривають можливості для функціоналізації поверхні модифікованого ММТ за рахунок реакцій з різних органічних сполуками, що містять функціональні групи, здатні до взаємодії. Було використано діангідрид піромелітової кислоти (ДАПК) для надання поверхні ММТ гідрофільності. Одержаний гідрофільний модифікований ММТ, що здатний утворювати водні дисперсії може використовуватись для створення нанокомпозитів на основі іономерних поліуретанів (ПУ) з водного середовища. Утворення фізичних зв'язків з матрицею ПУ сприяє підвищенню експлуатаційних властивостей нанокомпозитів, зокрема фізико-механічних.

Для надання гідрофільності поверхні наночасток ММТ здійснювали обробку поверхні модифікованого олігоуретанамінуамоній хлориду (ОУААХ) ММТ, що має доступні реакційно-здатні аміногрупи, діангідридом піромелітової кислоти (ДАПК).

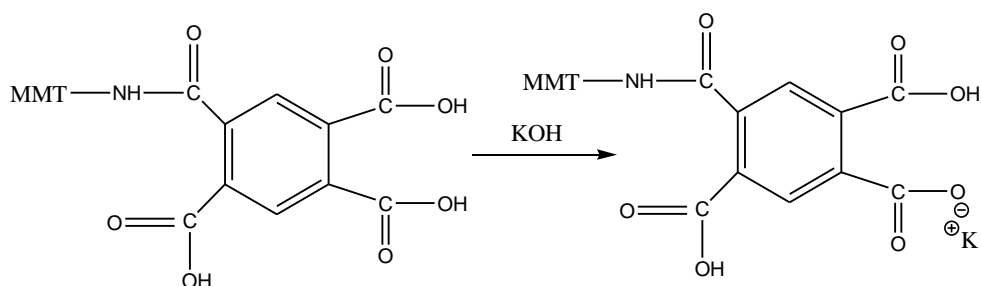
Обробка ДАПК здійснювалась в середовищі ДМФА, після тривалого диспергування ультразвуком суспензії модифікованого ОУААХ ММТ. Суспензія модифікованого ОУААХ ММТ оброблялась ультразвуком частотою 125 кГц протягом 30 хв. До суспензії модифікованого ММТ додавали розчин ДАПК в ДМФА із вмістом ДАПК 50 % мас. ДАПК додавали із надлишком у розрахунку - NH₂: ДАПК = 1:4. Суміш витримували одну добу при температурі 50°C. Загальну схему реакції аміногруп модифікатора ММТ з ДАПК можна проілюструвати таким чином:



Внаслідок функціоналізації модифікованого ОУААХ ММТ ДАПК на поверхні наночасток модифікованого ММТ з'являються функціональні ангідридні групи, які шляхом гідролізу утворюють карбоксильні групи:



Водні суспензії функціоналізованого ММТ обробляють розчином лугу (KOH) для забезпечення більшої гідрофільності поверхні, за рахунок утворення іонних груп:



Одержані водні дисперсії функціоналізованого ММТ після обробки ультразвуком використовувались для створення нанокомпозитів на основі ПУ з водного середовища.

Проведені фізико-механічні дослідження нанокомпозитів показали, що найбільше покращення фізико-механічних властивостей, до 40% спостерігається при вмісті функціоналізованого ММТ від (0,5 до 1) % мас.

Рентгенографічні дослідження показали, що карбоксильований монтморилоніт має значно більшу міжшарову відстань ($d_{001} = 1,7$ нм), ніж вихідна натрієва форма ММТ ($d_{001} = 1.3$ нм), та ОУААХ ММТ ($d_{001} = 1.5$ нм).

Для оцінки вмісту органічної складової модифікованого ММТ було проведено термогравіметричне дослідження (ТГА) останнього. Дані ТГА ілюструють те що вміст органічної складової становить близько 29 % мас., що практично відповідає його теоретичному вмісту.

Таким чином було створено функціоналізований гідрофільними сполуками модифікований монтморилоніт, що утворює водні дисперсії та може використовуватись для одержання нанокомпозитів з водного середовища на основі вододиспергуючих полімерів, зокрема іономерними поліуретанами.

1. Xiong J., Zheng Z., Jiang H. Reinforcement of polyurethane composites with an organically modified montmorillonite // *Composites: Part A* – 2007. – Vol. 38, N 1. – P. 132–137.

2. Тарасевич Ю.И. Строение и химия поверхности слоистых силикатов / Ю.И. Тарасевич. – Киев: Наукова думка, 1988. – 248 с.

3. Decker C., Zahouily K., Keller L. Ultrafast synthesis of bentonite-acrylate nanocomposite materials by UV-radiation curing // *J. Mater. Sci.* – 2002. – Vol. 37. – P. 4831–4838.

4. Thostenson E.T., Ren Z., Chou T-W. Advances in the science and technology of carbon nanotubes and their composites: a review // *Comp. Sci. Technol.* – 2001. – Vol. 61, N.13. – P. 1899–1912.

5. Гончар О.М. Модифікування поверхні монтморилоніту олігоуретаном, що містить функціональні аміногрупи // *Хімія, фізика та технологія поверхні.* – 2019. – Т. 10. № 1. – С. 87–93.

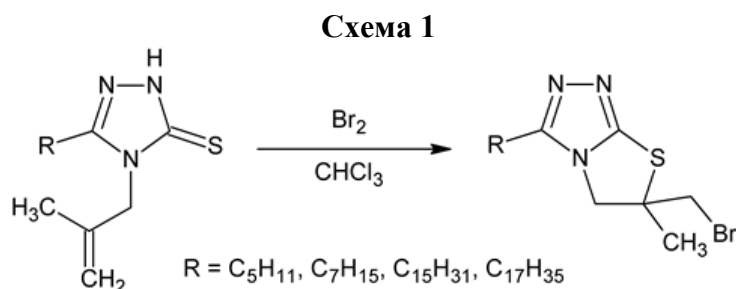
ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНІ РЕЧОВИНИ КЛАСУ [1,3]ТІАЗОЛО[2,3-С][1,2,4]ТРИАЗОЛУ

Григорка Г.В., Фізер М.М., Сливка М.В.

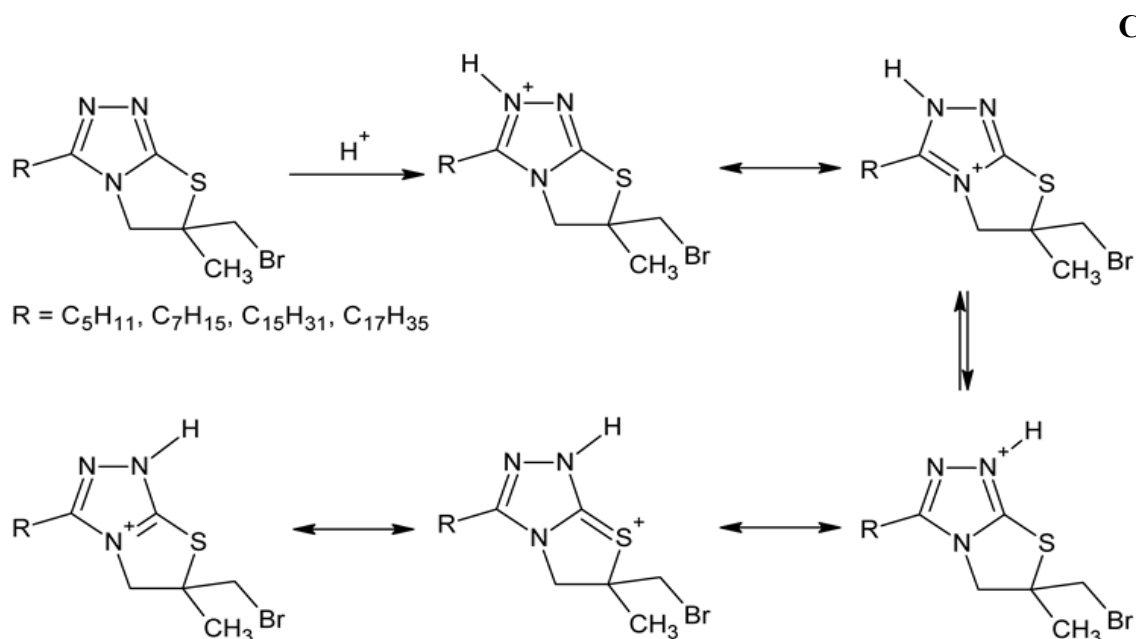
¹Кафедра органічної хімії, ДВНЗ «Ужгородський національний університет»

max.fizer@uzhnu.edu.ua

Поверхнево-активні гетероциклічні нітроген-вмісні сполуки дедалі більше привертають увагу дослідників [1,2]. За допомогою реакції галогено-циклізації нами синтезовано серію 3-алкіл заміщених 6-бромометил-6-метил-5,6-дигідро[1,3]тіазоло[2,3-с][1,2,4]триазолів. Синтез цільових сполук проводили виходячи із 5-алкіл-заміщених 4-металіл-1,2,4-триазол-3-тіонів. Дія броду у хлороформі викликає гетероциклізацію і анелювання тіазолонового фрагменту (схема 1).



Довгий алкільний замісник у третьому положенні гетероциклічної системи може розглядатися як «ліпофільний хвіст», а полігетероциклічна система є полярною і може розглядатися як «гідрофільна голова». Таким чином, такого роду сполуки володіють властивостями ПАР, особливо у кислому середовищі, так як проходить протонування триазольного циклу, і через це, додатково зростає полярність гетероциклічної системи (схема 2).



Будову та склад отриманих продуктів підтверджували та визначали спектральними методами (ЯМР ¹H на ¹³C) та елементним аналізом, відповідно.

1. Sharma V. D., Ilies M.A. Heterocyclic cationic gemini surfactants: a comparative overview of their synthesis, self-assembling, physicochemical, and biological properties // *Med. Res. Rev.* – 2014. – 34, №1. – С. 1–44.

2. El-Sayed R., Fadda A.A. Synthesis of pharmacological heterocyclic derivatives based surfactants // *J. Oleo Sci.* – 2016. – 65, №11. – С. 929–940.

ОСОБЛИВОСТІ N-ОКИСНЕННЯ АЗОТОВМІСНИХ СПОЛУК ПЕРОКСИКИСЛОТАМИ

Дутка В.С.¹, Мідяна Г.Г.², Дутка Ю.В.²

¹Львівський національний університет імені Івана Франка, vdutka@ukr.net

²Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії і вуглехімії
ім. Л.М. Литвиненка Національної академії наук України

Окиснення азотовмісних сполук пероксикислотами (ПК) часто використовують в лабораторній практиці. Окиснювальні реакції за участю ПК перебігають гладко, а розділення продуктів реакції порівняно легке. В нашій роботі вивчено кінетику N-окиснення піридину (Ру), хіноліну (Хн), акридину (АН), 8-оксихіноліну (8-ОХ), α -піколінової кислоти (АПК), дифеніламіну (Дфа) та аніліну (АН) аліфатичними ПК в різних органічних середовищах в інтервалі температур 303 – 328 К. Кінетика окиснення досліджуваних азотовмісних сполук добре описується кінетичним рівнянням швидкості реакції першого порядку. Константи швидкості окиснення досліджуваних сполук в ацетоні при різних температурах наведені табл.1.

Таблиця 1

Константи швидкостей окиснення азотовмісних сполук пероксидекановою кислотою в ацетоні при різних температурах. (Вихідні концентрації реагентів: 0,05 моль/л).

Азотовмісна сполука	$k \cdot 10^5, c^{-1}; \Delta k = \pm 0.03k$					
	303 К	308 К	313 К	318 К	323 К	328 К
Акридин	6,15	8,70	12,3	14,9	21,5	30,3
Хінолін	4,68	6,10	7,85	8,70	13,3	16,0
Піридин	4,0	5,75	6,90	8,90	12,5	-
8-Оксихінолін	1,16	1,71	2,08	2,67	3,48	4,24
*8-Оксихінолін	2,11	3,08	4,35	5,85	8,05	-
α -Піколінова к-та	-	-	0,72	1,00	1,29	1,82
Дифеніламін	2,36	3,16	3,80	4,80	6,05	-

* Розчинник - етилацетат; Похибка у визначенні констант не перевищувала 3%.

З найбільшою швидкістю процес окиснювання перебігає у АН, тоді як Хн та Ру константи швидкості окиснення нижчі. Для сполук, які містять в положенні до атома азоту ОН- чи карбоксильну групу 8-ОХ чи АПК окиснення сильно гальмується. За температурною залежністю констант швидкості окиснення (k) від температури було розраховано енергію активації процесу. Енергія активації окиснення (E_a) азотовмісних сполук в ацетоні лежить в межах 38,9 – 57,4 кДж/моль. Реакція N-окиснення досліджуваних азотовмісних сполук в бензені перебігає в 3 – 8 раз швидше. Енергії активації процесу окиснення в бензені та параметри активаційного комплексу наведені в таблиці 2. Числові значення E_a окиснення досліджуваних близькі до відповідних величин, знайдених в ацетоні. При вивченні реакції в різних органічних розчинниках між параметрами ΔH^\ddagger і ΔS^\ddagger перехідного комплексу існує лінійна залежність, яка вказує на наявність компенсаційного ефекту. Як і слід було очікувати величини ΔS^\ddagger - від'ємні.

Механізм реакції N-окиснення включає в себе швидке формування на першій стадії проміжної сполуки ПК-азотовмісна сполука, яка руйнується на другій стадії утворюючи продукти реакції. Друга стадія визначає загальну швидкість процесу. Перша стадія характеризується константою рівноваги, а друга – «істинною» швидкістю реакції.

Квантово-хімічні обчислення молекул 8-ОХ вказує на те, що між атомом гідрогену ОН-групи та атомом азоту ароматичного кільця існує внутрішньо-молекулярний водневий зв'язок. Наявність цього зв'язку гальмує швидкість N-окиснення 8-ОХ. Очевидно такий зв'язок існує і в молекулі α -піколінової кислоти, тому швидкість окиснення цієї сполуки невисока.

Таблиця 2

Активаційні параметри окиснення азотовмісних сполук пероксидекановою кислотою в бензені. (Вихідні концентрації реагентів – 0,05 моль/л)

Азотовмісна сполука	E_a $\Delta E_a = \pm 5,0$	кДж/моль, ΔH^\ddagger , кДж/моль	$-\Delta S^\ddagger$, Дж/моль·К	ΔG^\ddagger , кДж/моль
Акридин	40,5	37,8	153	87,3
Хінолін	44,4	41,7	145	88,4
Піридин	49,9	47,2	131	89,6
8-оксихінолін	37,9	35,2	171	90,4
Дифеніламін	41,1	38,4	160	90,0

Величини ΔH^\ddagger , ΔS^\ddagger , ΔG^\ddagger розраховані для 323 К.

Кінетика окиснення аніліну пероксикислотами перебігає ступінчато, і при великому надлишку ПК продуктом окиснення може бути нітробензен. В ході окиснення АН є стадії в яких утворюються вільні радикали. Такі системи можна успішно використовувати для ініціювання радикальної полімеризації. Реакція окиснення Дфа має механізм відмінний від механізму окиснення Ру, Хн та АН.

Використавши багато параметрові кореляційні рівняння було знайдено кореляційні залежності, які зв'язують основні фізико-хімічні параметри розчинників з константами реакції окиснення відповідних азотовмісних сполук ПК. Кореляційні рівняння були знайдені для Ру, Хн та АК.

ПОХІДНІ 6-АМІНОПІРИДО[2,3-*D*]ПІРИМІДИН-7-ОНУ ЯК ПОТЕНЦІЙНІ ІНГІБИТОРИ ПРОТЕЇНКІНАЗИ FGFR1

Зінченко Г.М.

Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря НАН України

hanna.nikolayevna@gmail.com

Протеїн кіназа FGFR1 один з чотирьох (FGFR1, FGFR2, FGFR3, FGFR4) основних представників родини рецепторів фактору росту фібробластів (FGFR), що належать до тирозинкіназ, котрі беруть участь у широкому діапазоні біологічних функцій. Рецепторні тирозинкінази складаються з позаклітинного домену, що зв'язує ліганд та домену, який експресується на клітинній мембрані [1]. Сигнальний шлях рецептора фактора росту фібробластів (FGFR) відіграє важливу роль в ряді фундаментальних фізіологічних механізмів, включаючи ембріональний розвиток, гомеостаз тканинного метаболізму, ендокринну функцію, ангіогенез та загоєння ран [2]. Дисрегуляція сигнального шляху FGFR є основною причиною онкогенезу, тому розробка, схем лікування, які можуть забезпечити потужне та незворотне інгібування передачі сигналів, керованих FGFR мають важливе значення [3]. Інтенсивні дослідження інгібіторів FGFR1 привели до відкриття кількох препаратів, похідних хіноліну (E3810), індолу (E7090) та піримідину (AZD4547), котрі знаходяться на різних стадіях клінічних досліджень, і мають перспективу застосування у медичній практиці для лікування автоімунних та онкологічних хвороб. Слід також зауважити, що серед 2-амінозаміщених похідних піридо[2,3-*d*]піримідин-7-ону нещодавно знайдені сильні селективні інгібітори FGFR1 [4] (Рис. 1).

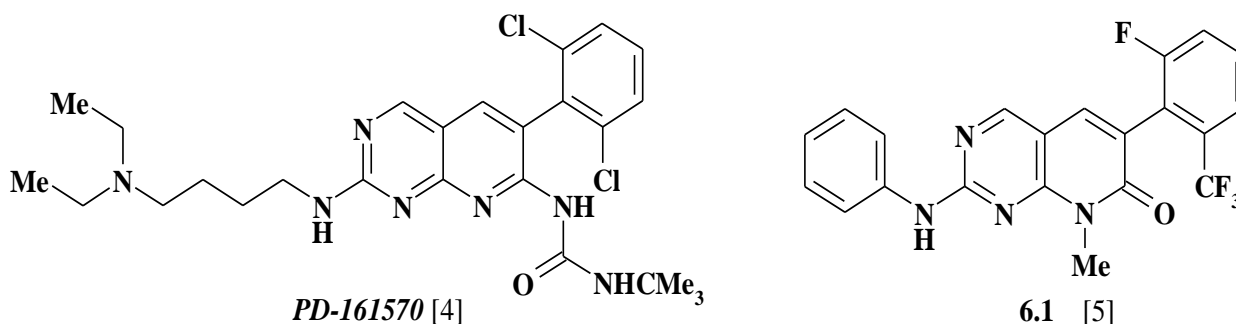


Рис. 1 Селективні інгібітори FGFR кінази

Сучасна стратегія пошуку нових ефективних лігандів FGFR1 заснована на низці інноваційних підходів, котрі поєднують методи *in silico*, органічний синтез та високоефективний біологічний скринінг [5].

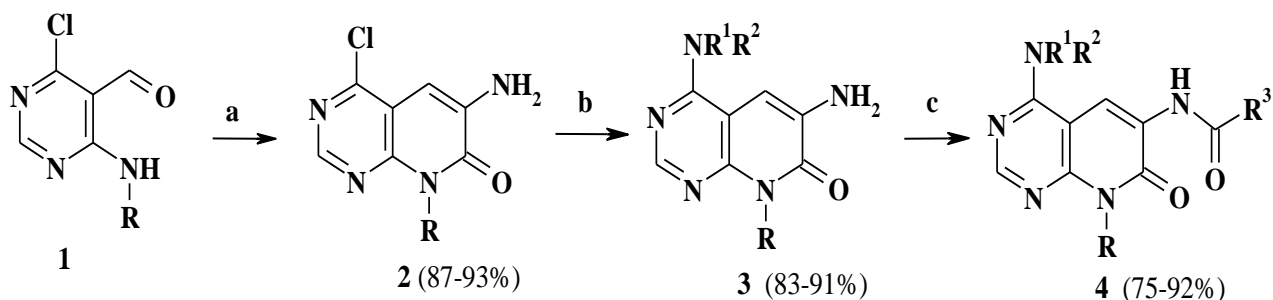
Основною метою даної роботи був синтез похідних 6-амінопіридо[2,3-*d*]піримідин-7-ону – потенційних інгібіторів FGFR1. Спільно з Бджолою В. Г. (Інститут молекулярної біології та генетики НАН України) був проведений докінг похідних піридо[2,3-*d*]піримідину. Для проведення аналізу зв'язування колекції з 6407 сполук використано рецептор-орієнтований віртуальний скринінг. Докінг проводився в АТФ зв'язувальному сайті протеїнкінази FGFR1 (код бази даних RGSB 3GQI), за допомогою програми Autodock4, препроцесинг та обробка результатів велась за допомогою програми MGL Tools. Взяті для докінгу структури є кіназними доменами в активному стані. Сполуки, що зв'язуються з ними, є АТФ-конкурентними інгібіторами протеїнкіназ другого типу, до яких належить більшість відомих на сьогоднішній день інгібіторів кіназ.

Ранжування лігандів проводилось за енергією зв'язування з кіназним доменом. Для цього використовується скорингова функція програми Autodock4, що оцінює вільну енергію зв'язування ліганду з рецептором в ккал/моль, менші значення відповідають більш сильним інгібіторам. Враховано інформацію про наявність водневих зв'язків між лігандом та рецептором, що характерні для відомих інгібіторів досліджених протеїнкіназ. Для абсолютної більшості інгібіторів характерна наявність водневих зв'язків з шарнірним регіоном кіназного домену, який поєднує N та C кінцеві домени та бере участь у зв'язуванні природного субстрату – АТФ. Також оцінювались водневі зв'язки з консервативними залишками лізину, аспарагіну та глутаміну, які беруть участь в каталітичному перенесенні фосфатної групи, що теж характерно для багатьох інгібіторів протеїнкіназ. Проведено візуальну оцінку ліганду в сайті зв'язування з метою вилучення сполук що мають нереалістичне положення в сайті зв'язування АТФ.

За результатами докінгу було відібрано 75 сполук із найменшою вільною енергією зв'язування по даним скоринг-функції та наявністю водневих зв'язків із відповідними амінокислотними залишками, які характерні для кіназних інгібіторів.

Для одержання похідних 4,6-діамінопіридо[2,3-*d*]піримідину **3** та **4**, був використаний метод розроблений нами раніше (схема 1) [6]. Структура синтезованих сполук підтверджена за допомогою ЯМР ^1H , ^{13}C спектроскопії, а також результатами елементного аналізу.

Схема 1



$\text{R} = \text{Me, Et, Pr}; \text{NR}^1\text{R}^2 = \text{NHalk, NHAr}; \text{R}^3 = \text{Alk, Ar}$

a: 1) $n\text{-MeOC}_6\text{H}_4\text{C}(\text{OMe})\text{N}(\text{OMe})\text{C}(\text{OMe})\text{O}$, Et_3N , MeOH , rt , 5 h; 2) AcOH , 50°C , 0.5 h; **b:** $\text{R}^1\text{R}^2\text{NH}$, Et_3N , MeCN , 50°C , 6 h;
c: $\text{R}^3\text{C}(\text{O})\text{Cl}$, Et_3N , MeCN , ref , 0.5 h

1. Turner N, Grose R. Fibroblast growth factor signalling: From development to cancer. // *Nat. Rev. Cancer.* – 2010. – Vol. 10 (2). – P. 116–129.
2. Regeenes R., Silva P.N., Chang H.H. et al. Fibroblast growth factor receptor 5 (FGFR5) is a coreceptor for FGFR1 that is up-regulated in beta-cells by cytokine-induced inflammation // *J. Biol. Chem.* – 2018. – Vol. 293 (44). –P. 17218–17228.
3. Luo H., Zhang T., Cheng P. et al. Therapeutic implications of fibroblast growth factor receptor inhibitors in a combination regimen for solid tumors (Review) // *Oncology Lett.* – 2020. – Vol. 20. – P. 2525–2536.
4. Schroeder M.C., Hamby J.M., Connolly C.J. et al. Soluble 2-substituted aminopyrido[2,3-d]pyrimidin-7-yl ureas. Structure-activity relationships against selected tyrosine kinases and exploration of in vitro and in vivo anticancer activity // *J. Med. Chem.* – 2001. – Vol. 44. – P.1915-1926
5. Lavecchia M.J. Bellacasa R.P., Borrell J.I. Cavasotto C.N. Investigating molecular dynamics-guided lead optimization of EGFR inhibitors // *Bioorg. Med. Chem.* – 2016. – Vol. 24 (4). – P. 768–778.
6. Zinchenko A.M., Muzychka L.V., Kucher O.V. et al. One-pot synthesis of 6-aminopyrido[2,3-d]pyrimidin-7-ones // *Eur. J. Org. Chem.* – 2018. – Vol. 46. – P. 6519-6523.

ОДЕРЖАННЯ ДИСПЕРСНИХ МЕТАЛОКОМПОЗИТІВ ПВХ-Ag МЕТОДОМ ХІМІЧНОГО РІДИННОФАЗНОГО ОСАДЖЕННЯ

Зінченко О.В., Толстов О.Л.

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України, a.tolstov@ukr.net

Одержані металополімерні композити шляхом осадження металевого срібла на поверхні дисперсного полівінілхлориду (ПВХ). Осадження проводили диспергуванням полімеру в лучному середовищі, що містить іони Ag^+ , з подальшим додаванням відновника за підвищеної температури. В результаті низки послідовних процесів утворюються наночастинки срібла, що осаджуються на поверхню полімеру. Попередня гідрофілізація поверхні сприяє покращеному осадженню шару металу на поверхню полімеру. На рис. 1 зображені оптичні мікрофотографії частинок ПВХ без та з осадженим шаром срібла.

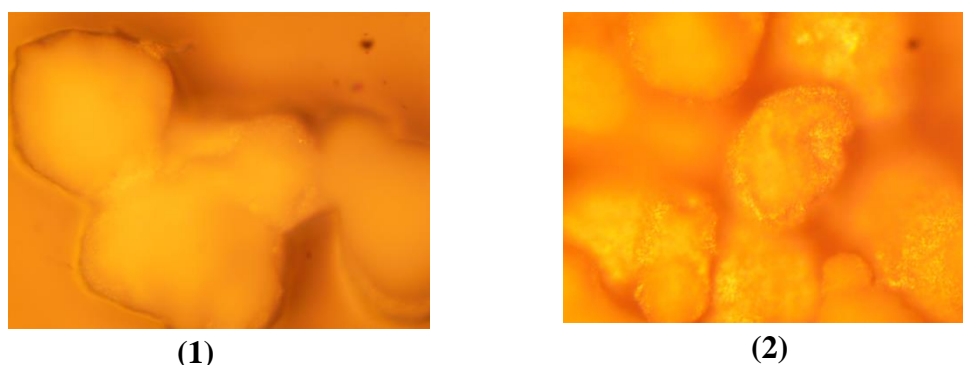


Рис.1 Оптичні мікрофотографії ПВХ (1) та ПВХ-Ag (2)

Ефективність осадження срібла підтверджена методом Раман-спектроскопії. Осадження на поверхню ПВХ шару металевого срібла призводить до високочастотного зсуву смуг C-Cl зв'язків як результат взаємодії шару металу з групами C-Cl на поверхні частинок ПВХ, при чому при більшій кількості осадженого срібла цей ефект виражений сильніше.

Слід зазначити, що шар металу має каталітичний вплив на процес термічного розкладу полімерної складової. Зокрема на рис. 2 можна побачити помітне руйнування полімерного субстрату за присутності на поверхні шару металу за досить низьких температур (до 300 °C). Зазвичай даний ефект спостерігається при нерівномірному осадженні частинок металу на поверхню полімеру, що разом з високою питомою поверхнею контакту полімер-метал приєє дифузії кисню до поверхні та спричинює руйнування органічної складової за безпосередньої участі високореакційного нанодисперсного металу.

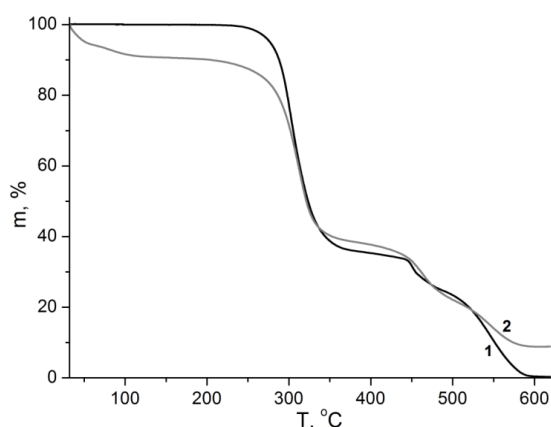


Рис. 2 Результати термогравіметричного аналізу ПВХ (1) та його металокомполімеру ПВХ-Ag (2)

В результаті проведених досліджень одержані металополімерні композити типу ПВХ-Ag та встановлено вплив високоактивної високодисперсної металевий складової на характеристики полімерного субстрату.

ВПЛИВ ТЕМПЕРАТУРИ СТРУКТУРУВАННЯ ПОЛІМЕРНОГО КОМПАУНДУ НА СТАБІЛІЗАЦІЮ ФІЗИКО-МЕХАНІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ СКЛОПЛАСТИКОВИХ ВИРОБІВ

Карандашов О. Г., Хацінська А.В., Авраменко В.Л., Підгорна Л.П.
НТУ «Харківський політехнічний інститут», nokturnok@gmail.com

Порожнисті склопластикові вироби циліндричної форми набули широке використання у багатьох галузях, таких як транспортування агресивних середовищ, нафтопродуктів, газу, зовнішніх ізоляторів електромереж, радіотехніки, збройної техніки, як вироби конструкційного призначення. У багатьох з цих галузях вироби повинні відповідати експлуатаційним вимогам, які передбачають не лише високі фізико-механічні властивості, але і їх стабільні показники. Серед методів намотування склопластикових виробів найбільш перспективним методом є косошаре поздовжньо-поперечне намотування (КППН) періодичним способом оскільки його використання забезпечує одержання виробів з максимальними показниками міцності. Передумовою цього є оптимальна структура укладання волокнистого наповнювача відповідно до технології, а також можливість плавного та повного протікання процесу структурування полімерного компаунду.

Температурний та часовий режими структурування для періодичного методу КППН є рекомендаційним, але на сьогодні не досліджено вплив тривалості та температури структурування на фізико-механічні властивості виробів одержаних даним методом. З метою зменшення тривалості технологічного процесу при збереженні високих та стабільних показників, а саме руйнівної напруги при розтягу у поздовжньому та поперечному напрямі, одержанні склопластикові вироби, які структуровані за різною температурою та зі зменшеною тривалістю процесу структурування. Для пояснення процесів, які можуть впливати на механічні показники, проведено визначення вмісту полімерного компаунду у склопластиковому виробі та його ступінь структурування за кожним температурним режимом. Результати досліджень наведені у таблиці, де відображені мінімальні та максимальні значення параметрів, які визначаються.

Таблиця

Найменування показника		Температура структурування, °С						
		100	110	120	130	140	150	160
Руйнівна напруга при розтягу у поздовжньому напрямі, МПа	80 хв	130	130	140	140	135	140	135
	480 хв	140	145	145	140	140	130	130
Руйнівна напруга при розтягу у кільцевому напрямі, МПа	80 хв	370	390	400	410	410	410	395
	480 хв	405	415	410	410	410	405	395
Руйнівна напруга за умови втрати герметичності при дії внутрішнього тиску, МПа	80 хв	117	117	125	125	122	120	117
	480 хв	120	121	125	125	125	123	125
Вміст полімерного компаунду, % мас	80 хв	28,5	28,4	28,4	28,4	28,6	28,4	28,5
	480 хв	28,4	28,3	28,4	28,3	28,5	28,4	28,4
Ступінь структурування полімерного компаунду, %	80 хв	94,3	95,5	96,3	96,6	97,1	97,0	96,3
	480 хв	96,1	96,7	97,6	97,6	98,0	97,9	97,2

Результати дослідження вказують, що вибір найбільш оптимального температурного режиму структурування полімерного компаунду призводить до отримання фізико-механічних властивостей на рівні з виробами структурованих протягом більш тривалого часу та більш плавним підняттям температури та охолодженням. Тоді, як використання несприятливих температурних режимів знижує міцність виробів до 10 %. Слід зазначити, що один з найважливіших показників, як якість просочення, є постійної при різних режимах.

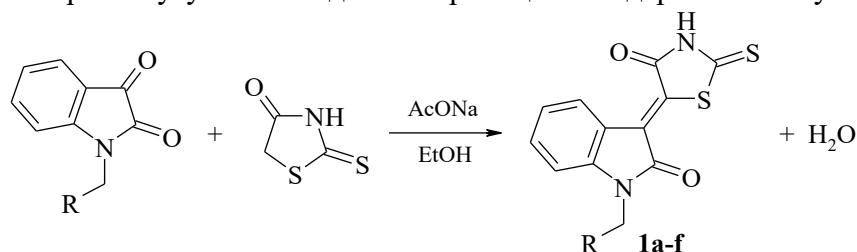
ВЗАЄМОДІЯ N-ЗАМІЩЕНИХ ПОХІДНИХ ІЗАТИНУ З РОДАНИНОМ ТА ВТОРИННИМИ АМІНАМИ

Карп'як В.В., Лесюк О.І., Обушак М.Д.

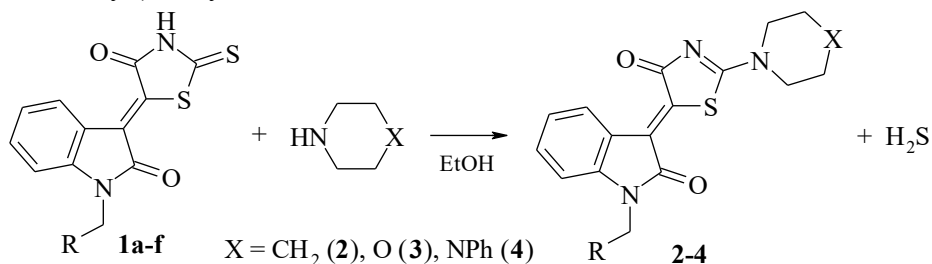
Львівський національний університет імені Івана Франка, volodymyr.karpyak@lnu.edu.ua

Для похідних ізатину характерний широкий спектр біологічної активності [1]. Зокрема, серед *para*-заміщених семікарбазонів ізатину знайдено сполуки, що мають протисудомну активність, а деякі основи Манніха ізатин-3-тіосемікарбазонів виявили противірусну та туберкулоостатичну активність. Інші похідні основ Манніха ізатину виявили фібринолітичну, міорелаксантну, протиалергійну, імунодепресивну та антитромботичну активність. Разом з тим, поєднання індольного фрагмента ізатину з іншими гетероциклами може бути перспективним напрямком пошуку потенційних біологічно активних сполук. Це, зокрема, стосується реакцій роданіну з N-заміщеними ізатинами та гетероциклічними амінами.

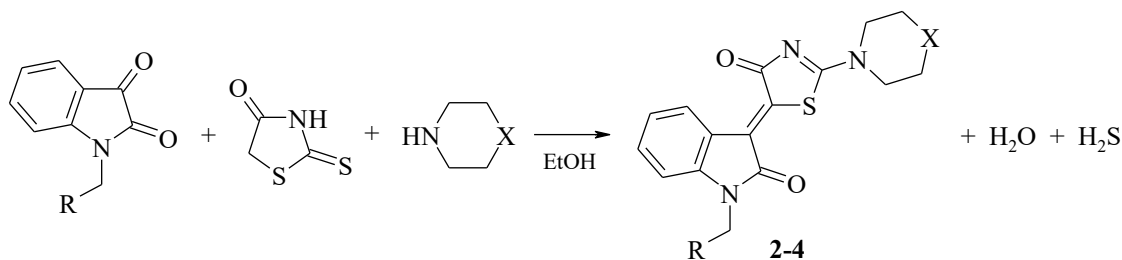
Ми дослідили взаємодію роданіну з заміщеними похідними ізатину: N-аліл-, N-бензил-, N-гідроксиметил-, N-(1-піперидинометил)-, N-(морфолін-4-ілметил)- і N-(4-фенілпіперазин-1-ілметил)ізатином. Реакції проводили у м'яких умовах, за кімнатної температури, а основним каталізатором слугував безводний натрій ацетат. Одержали сполуки **1a-f**:



Продукти конденсації роданіну з N-заміщеними похідними ізатину **1a-f** випробували у реакції з піперидином, морфоліном та 1-фенілпіперазином. Встановлено, що внаслідок цієї взаємодії утворюються продукти заміщення екзоциклічного атома сірки у тiazолідиновому ядрі на залишок аміну (сполуки **2-4**).



Як альтернативний варіант цієї взаємодії проведено трикомпонентні реакції між похідними ізатину, роданіном та амінами (основним каталізатором був взятий у надлишку амін).



Робота виконана за підтримки Національного фонду досліджень України (проект 2020.01/0166).

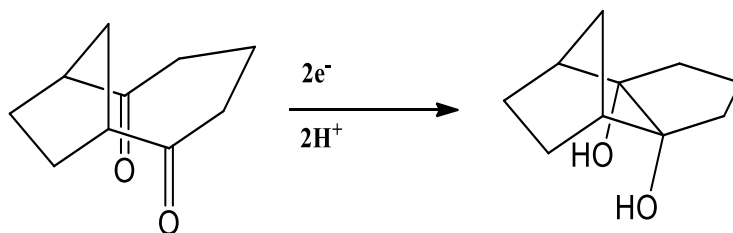
1. Pandeya S.N., Smitha S., Jyoti M., Sridhar S.K. Biological activities of isatin and its derivatives // Acta Pharm. – 2005. – 55(1). – P. 27–46.

ЕЛЕКТРОХІМІЧНА ЦИКЛІЗАЦІЯ БІЦИКЛО[5.2.1]ДЕКА-2,6-ДИОНУ

Клімко Ю.Є.

НТУУ «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», yeklimko@ukr.net

Методами полярографії, кулонометрії та електролізу при контрольованому потенціалі досліджено електрохімічне відновлення біцикло[5.2.1]дека-2,6-діону (1) на ртутному електроді у ДМФА та 80% водному діоксані. Показано, що у (1) спостерігається сильний взаємний вплив карбонільних груп, обумовлений взаємодією їх локалізованих орбіталей. Це свідчить про можливість протікання циклізації при електровідновленні (1) з утворенням трицикло[5.2.1.0^{2,6}]дека-2,6-діолу (2) по схемі:



Кулонометричне дослідження показало, що процес електровідновлення є двоелектронним.

Проведено препаративне електрохімічне відновлення (1) на ртутному катоді при потенціалі -2,2 В (отн. нас.к.е.) у водному діоксані, що містив 0,1 М броміду тетраетиламонію. Виділена сполука (2) була ідентифікована за ЯМР ¹H, ¹³C та мас-спектрами. Вихід склав 61%. По даним полярографії, ГЖХ та ТСХ процес проходить селективно, але виділення сполуки (2) утруднене підвищеною розчинністю її у воді.

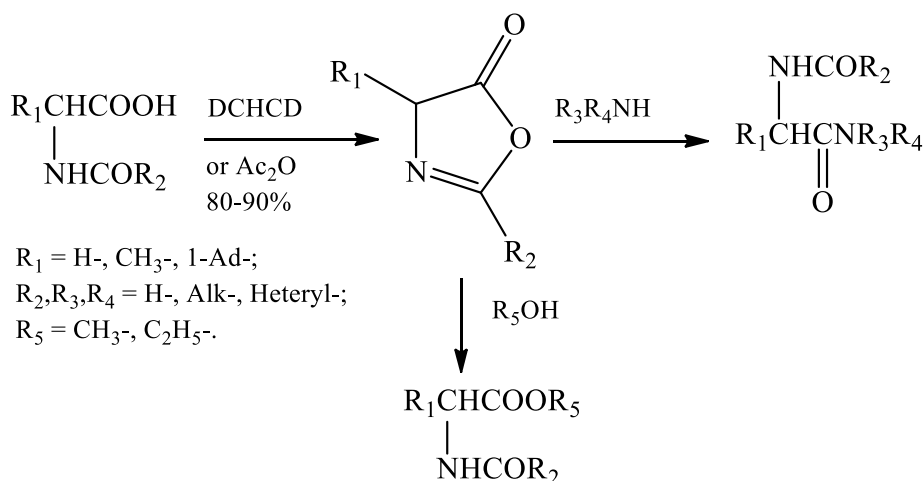
ОКСАЗОЛОНОВИЙ МЕТОД СИНТЕЗУ ПОХІДНИХ АДАМАНТИЛ- α -АМІНОКИСЛОТ

Клімко Ю.Є.

НТУУ «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», yeklimko@ukr.net

Відомо, що аміді 1-адамантилгліцину мають високу противірусну активність **in vitro** [1]. Синтез цих сполук через N- ацилхлорангідриди проходить з малими виходами, а у деяких випадках є неможливим.

Оксазолони, як інтермедіати на шляху до амідів, гідразидів та естерів N-ацил- α -амінокіслот, можуть бути отримані з високими виходами у м'яких умовах під дією оцтового ангідриду або діциклогексилкарбодііміду. В останньому випадку виходи були на 15-20% вищі.



Цільові продукти утворюються під дією нуклеофільних реагентів з виходами 70-80%.

Стабільність оксазолонів залежить від природи R_2 . Якщо $R_2 = Ar$, це сполуки з високими температурами топлення та легко очищуються кристалізацією. Якщо $R_2 = Alk$, то оксазолони були значно менш стабільні, тому їх додавали в реакцію з амінами та спиртами без виділення та очистки.

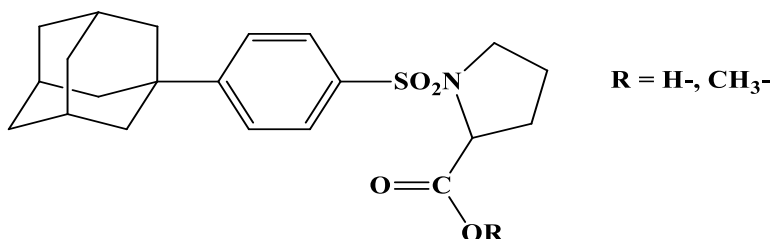
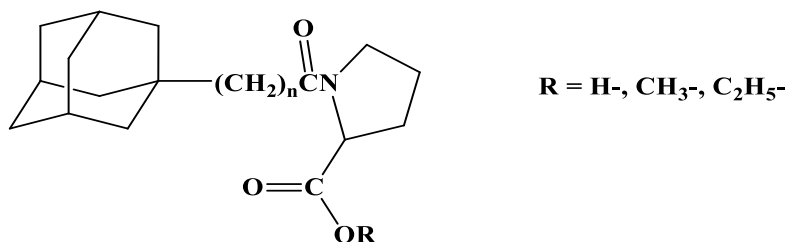
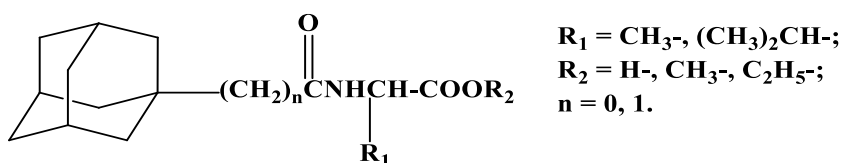
СИНТЕЗ АДАМАНТИЛВМІСНИХ ПОХІДНИХ ПРИРОДНИХ АМІНОКИСЛОТ

Клімко Ю.Є.

НТУУ «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», yeklimko@ukr.net

Енантіомерні похідні N-заміщених α -амінокислот використовуються як хіральні фази для GLC [1].

Ми синтезували нові N-адамантилвмісні естери L- та D-аланіну, L- та D-валіну, L-проліну, які були гідролізовані в лужних умовах до відповідних N-ацил- α -амінокислот.



Синтезовані сполуки можуть бути також цікавими в якості об'єктів для біологічних досліджень [2].

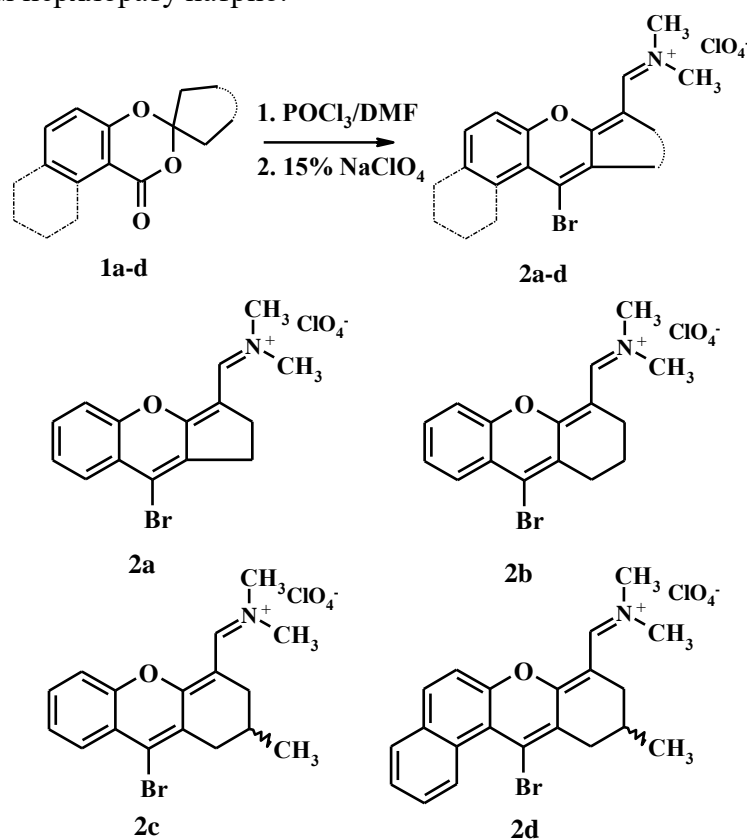
1. Allenmark S.G.. Chromatographic enantioseparation: method and applicatson. - 1988, 268.
2. Krasutsky P.A., Novicova M.I., Semenova I.G. //Chim. pharm. - 1985. - v.19, №7, - pp. 825-829.

РЕЦИКЛІЗАЦІЯ СПІРОПОХІДНИХ 1,3-БЕНЗО(НАФТО)ДІОКСИН-4(1)-ОНІВ ЯК НОВИЙ МЕТОД СИНТЕЗУ БРОМПОХІДНИХ КСАНТЕНІВ

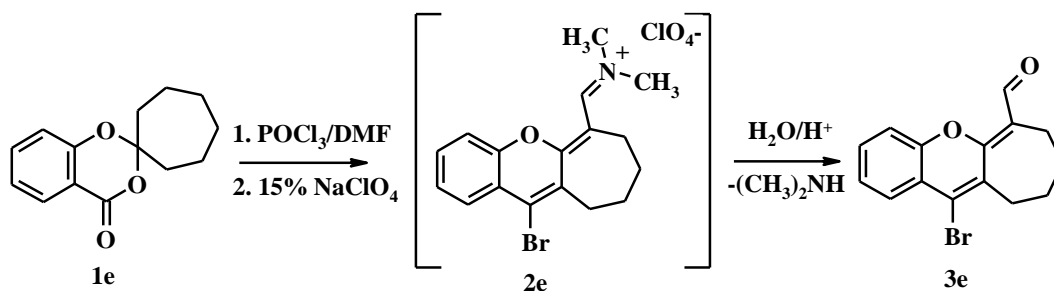
Ковтун А.В., Варениченко С.А., Фарат О.К., Марков В.І.
ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»
kovtunchem@gmail.com

Одним із перспективних класів хімічних сполук з точки зору пошуку на їх основі нових флуорофорів для біовізуалізації є похідні ксантену. Електрофільне перегрупування шестичленних гетероциклів з гемінальним розташуванням атомів кисню і нітрогену під дією реагенту Вільсмайєра-Хаака відкрило нові шляхи до синтезу низки поліфункціональних сполук в одну стадію. У тому числі завдяки перегрупуванню спіропохідних 1,3-бензо(нафто)оксазинів під дією даного реагенту синтезовано новий клас ксантенових барвників з флуоресцентними властивостями [1,2]. Отримані результати спонукали нас продовжити дослідження перегрупування гетероциклічних систем з гемінально розташованими гетероатомами. В якості модельних об'єктів було обрано спіропохідні бензо(нафто)діоксин-4(1)-они.

Нами запропоновано метод синтезу раніше невідомих бромпохідних ксантенів з використанням реагенту PBr_3/DMF в якості ініціатора перегрупування. Сполуки **2a-d** отримано при взаємодії відповідних бензо(нафто)діоксин-4(1)-онів **1a-d** з трьох кратним надлишком реагенту Вільсмайєра PBr_3/DMF при температурі $110^\circ C$ протягом 2 годин з наступним додаванням перхлорату натрію.



Кислотний гідроліз проміжного продукту перегрупування **2e** приводить до утворення формілпохідного ксантену **3e**.



1. Farat O.K., Markov V.I., Varenichenko S.A., Dotsenko V.V., Mazepa A.V. The Vilsmeier-Haack formylation of 2,3-dihydro-4H-1,3-benzoxazin-4-ones and isomeric 1,2-dihydro-4H-3,1-benzoxazin-4-ones: an effective approach to functionalized 2H-/4H-chromenes and tetrahydroacridines // *Tetrahedron*. – 2015. – Vol. 71. – P. 5554-5561.

2. Farat O.K., Ananyev I.V., Varenichenko S.A., Tatars A.L., Markov V.I. Vilsmeier-Haack reagent: an efficient reagent for the transformation of substituted 1,3-naphthoxazines into xanthene-type dyes // *Tetrahedron*. – 2019. – Vol. 75. – P. 2832-2842.

ВЗАЄМОДІЯ 3-АЦИЛІЗОКУМАРИНІВ З ПЕРВИННИМИ АМІНАМИ

Коноваленко А.С.¹, Шабликін О.В.¹, Шабликіна О.В.^{1,2}, Броварець В.С.¹

¹ Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря НАН України

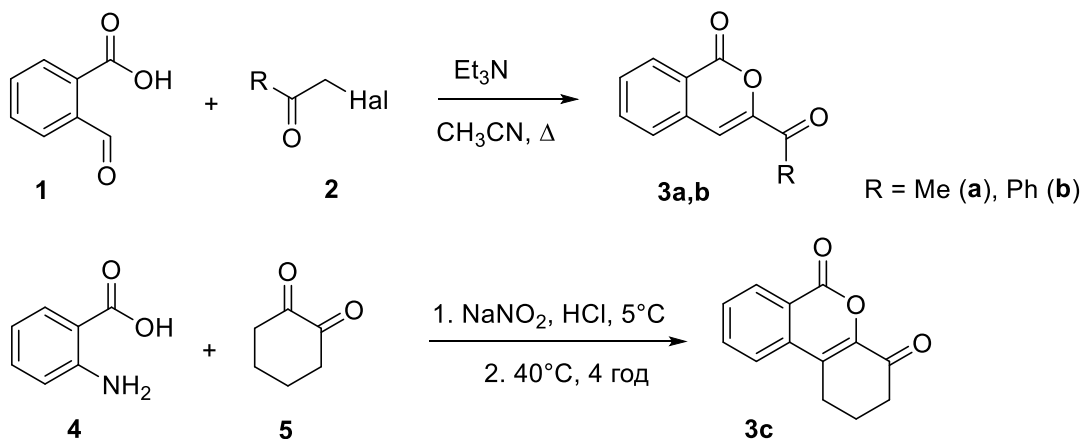
² Київський національний університет імені Тараса Шевченка

konovalenko9456@gmail.com

Рециклізація 1*H*-ізохромен-1-онової системи – цікавий та перспективний напрям хімії гетероциклічних сполук. Завдяки лабільності лактонового фрагменту та його реакційній здатності по відношенню до *N*-нуклеofilів ізохромони можна легко перетворити на сполуки ряду ізохінолін(он)у [1] та бензодіазепінону [2]. Так, через стадію рециклізації 3-гетарил-1*H*-ізохромен-1-онів дією аміаку раніше нами було синтезовано ряд малодосліджених 1-аміно-3-гетарилізохінолінів з високою біологічною активністю [1].

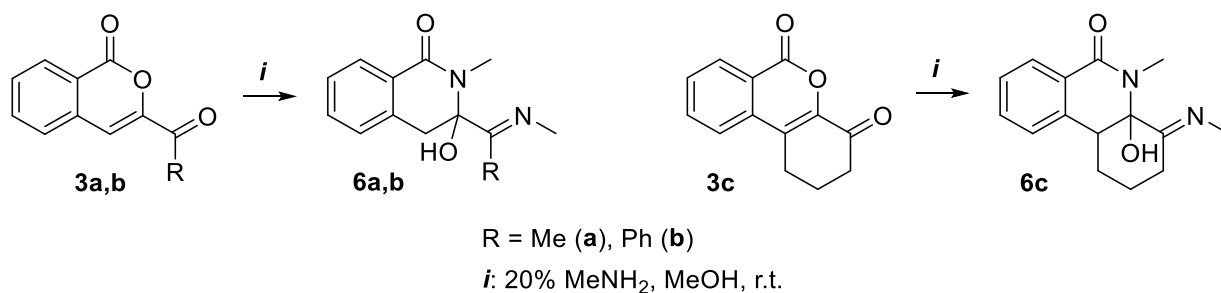
Вочевидь, за наявності у піроновому фрагменті додаткової функціональної групи (наприклад, карбонільної) взаємодія 1*H*-ізохромен-1-ону з первинними амінами матиме складніший характер. Для дослідження таких перетворень нами було обрано 3-ацилізокумарини **3a-c**.

Вихідні сполуки **3a** та **3b** були синтезовані за опрацьованою нами раніше методикою шляхом взаємодії *o*-формілбензойної кислоти **1** з відповідними галогенкетонами **2** при кип'ятінні в ацетонітрилі [3]. Похідну **3c** було отримано за методикою [4]: діазотуванням антранілової кислоти **4** з подальшою обробкою діазонієвої солі дикетоном **5**.

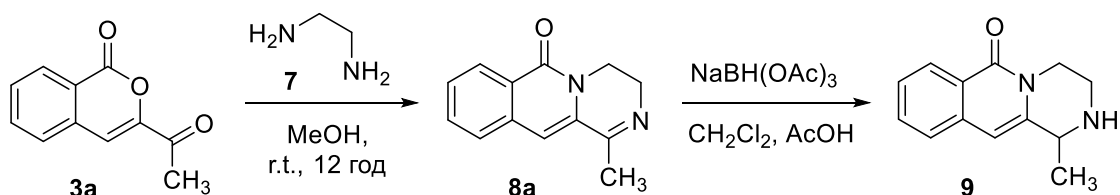


Взаємодія 1*H*-ізохромен-1-онів **3a-c** з аміаком при нагріванні в метанолі не дала позитивних наслідків, хоча авторами [5] вказується, що 3-ацетилізокумарин **3a** в таких умовах перетворюється на ізохінолон. Проте дослідження взаємодії кетонів **3a-c** з первинними амінами дало доволі цікаві результати.

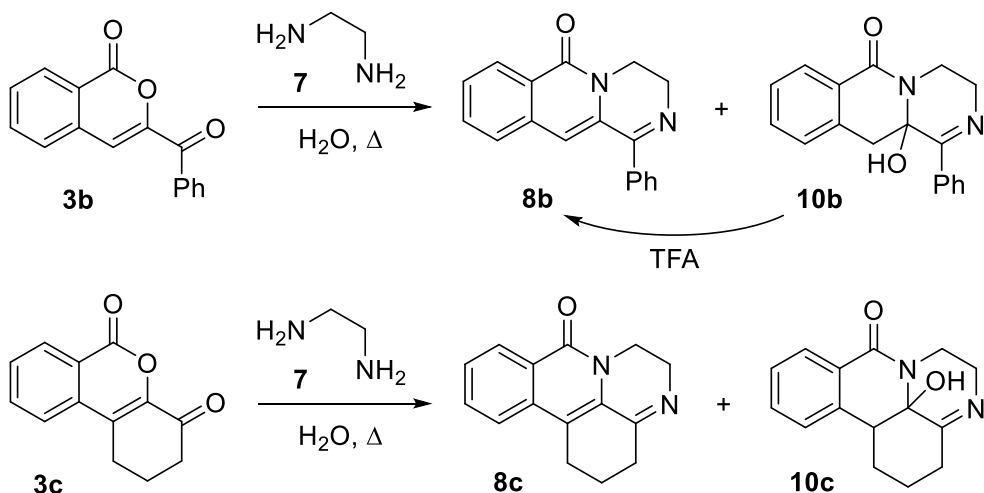
Обробка сполук **3a-c** при кімнатній температурі надлишком метиламіну (у вигляді розчину в метанолі) супроводжується двома процесами: конденсацією кетогрупи з метиламіном та рециклізацією ізокумаринового циклу, що в підсумку дає відповідні тетрагідроізохінолони **4a-c** з гідрокси- та іміногрупою у положенні 3. На відміну від циклогексильної похідної **3c**, амінування якої ускладнюється утворенням великої кількості побічних продуктів, на субстратах **3a** і **3b** ця реакція відбувається майже кількісно.



Не менш цікаві результати були отримані при взаємодії досліджуваних ізокумаринів з етилендіаміном **7**. Обробка сполуки **3a** діаміном **7** при кімнатній температурі в метанолі переважно приводить до отримання головним чином трициклічної сполуки **8a**, яку за стандартною методикою вдалося відновити триацетоксиборогідридом натрію до тетрагідропіразиноізохінолінону **9**.



Взаємодія ізокумаринів **3b** та **3c** з діаміном **7**, на відміну від похідної **3a**, проходить при нагріванні у водному розчині з одержанням суміші очікуваних імінів **8b** і **8c** та їх недегідратованих похідних **10b** і **10c**, відповідно. У випадку похідних з фенільним залишком при обробці суміші **8b** і **10b** трифлуороцтовою кислотою вдається досягти завершення дегідратації сполуки **10b** і синтезувати індивідуально імін **8b**.



Таким чином, рециклізація 3-ацилізокумаринів під дією первинних амінів проходить з залученням не лише лабільного піронового фрагменту, але й бічної карбонільної групи, що дає змогу синтезувати неординарні *sp*³-збагачені конденсовані гетероциклічні системи з фрагментом ізохінолону.

1. Konovalenko A.S., Shablykin O.V., Brovarets V.S., Shablykina O.V., Moskvina V.S., Kozytyskiy A.V. 3-Hetarylisocoumarins in the synthesis of 1-functionalized 3-hetarylisoquinolines // Chem. Heterocycl. Compd. – 56, No 8. – P. 1021–1029.

2. Шаблікіна О.В., Крехова О.Ф., Коноваленко А.С., Москвіна В.С., Хиля В.П. Взаємодія 3-піридил- та 3-(імідазо[1,2-*a*]піридин-2-іл)ізокумаринів з гідразином // Доп. Нац. акад. наук України. – 2018. – № 12. – С. 71–78.

3. Коноваленко А.С., Шаблікіна О.В., Щенко В.В., Хиля В.П. Нові 3-гетарилзаміщені ізокумарини // Вісник Київського національного ун-ту ім. Т. Шевченка. Хімія. – 2017. – 53, № 1. – С. 6–8.

4. Venturello C., Chiusoli G.P. Isocoumarin tricyclic derivatives from benzenediazonium salts // J. Heterocycl. Chem. – 1972. – 9, No 5. – P. 1155–1156.

5. Каневская С.И., Ковшарова И.Н., Линевиц Л.И. Синтез кетонов изокумаринового ряда // Сб. статей по общей химии. – 1953. – № 2. – С. 1493–1498.

СИНТЕЗ НОВИХ АМІНОКИСЛОТНИХ ІМІНОГІДАНТОЇНОВИХ СУЛЬФОНАМІДІВ

Корній Ю.С., Шаблікін О.В., Броварець В.С.

Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря НАН України, s8092011@ukr.net

Як ніколи актуальною в наш час стала проблема пошуку нових ефективних противірусних препаратів. Пріоритетними в цій галузі хіміко-біологічних досліджень має бути не лише висока активність речовини, але й її низька токсичність і доступність.

Оптимальним буде використання низькомолекулярних сполук, що легко можуть бути синтезовані із недорогих реагентів. Цим умовам повністю відповідають 4-іміногідантоїнові сульфонаміди (аміди (5-(дихлорометил)-2-оксо-імідазолідин-4-ілден)сульфамінової кислоти) загальної формули **1** (рис. 1). З одного боку, гідантоїновий цикл – біодоступний фрагмент, що порівняно легко метаболізується, – є складовою ряду лікарських препаратів, зокрема, протисудомних засобів Фенітоїну та Фосфенітоїну [1, 2]; з іншого – в молекулі присутній полярний дихлорометильний фрагмент і фармакофорна сульфамідна група.

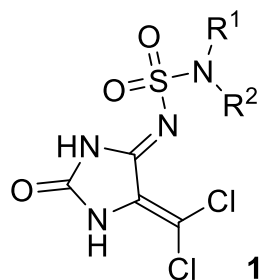


Рис.1

Раніше нами було представлено зручний спосіб синтезу сполук **1** [3], що дозволяв легко варіювати замісники R¹, R² (рис. 1). Для окремих представників цього класу (рис. 2) нами була встановлена ефективність проти ВК вірусу [4], що за деякими параметрами не сильно поступалась препарату порівняння – Цидофовір.

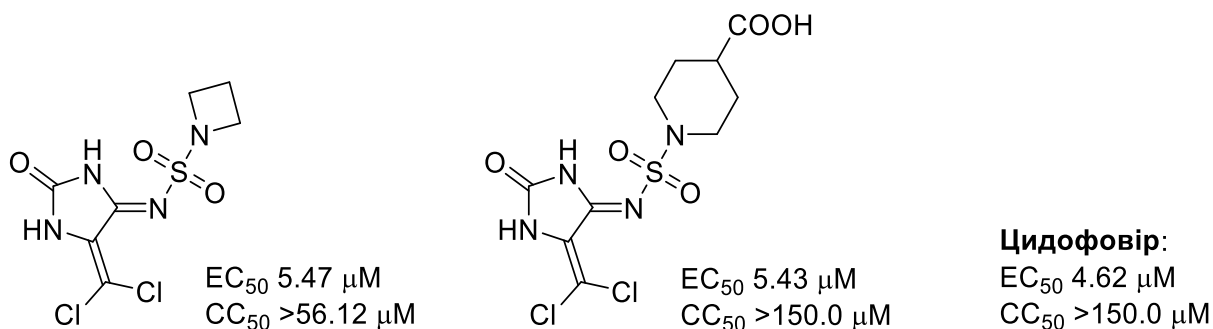
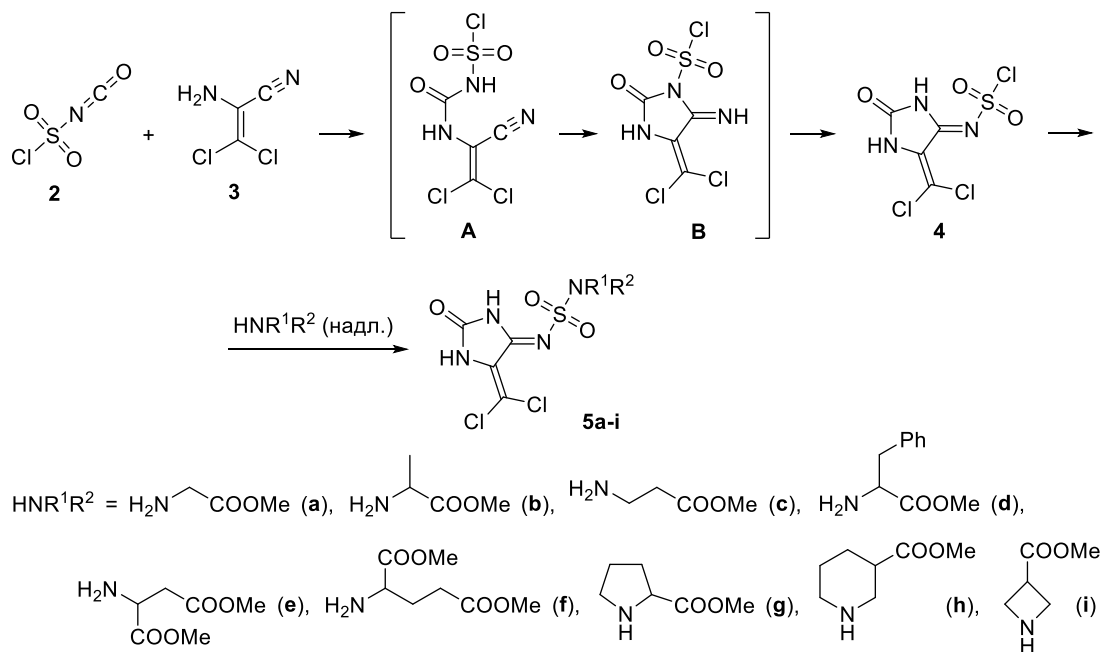


Рис. 2 Дослідження проведено в Department of Pediatrics, University of Alabama, Birmingham на лінії клітин HFF, вражених ВК вірусом (штам Gardner); EC_{50} – концентрація, яка викликає зменшення реплікації вірусів на 50 %, CC_{50} – концентрація, за якої виживають 50 % бактеріальних клітин

За даними [4] протівірусна активність сульфонамідів **1** суттєво залежить від характеру замісників біля атома Нітрогену сульфамідної групи. Оскільки найкращі результати продемонструвала похідна із залишком ізоніпекотинової кислоти (рис. 2), метою нашої роботи був синтез нових амінокислотних амідів (5-(дихлорометилден)-2-оксо-імідазолідин-4-іліден)сульфамінової кислоти, як з естерною, так і з вільною карбоксильною групою.

Для синтезу цільових речовин нами було за описаною раніше процедурою [4] на основі 2-аміно-3,3-дихлороакрилонітрилу **2** (ADAN) дією хлоросульфонілізоціанату **3** синтезовано сульфохлорид **4**. Ця гетероциклізація носить складний характер: внаслідок ацилювання аміногрупи ADAN **2** ізоціанатом **3** утворюється проміжна сполука **A** (схема 1), наступна циклізація за участю Нітрогену сульфонамідного фрагменту і нітрильної групи дає іміноімідазолон **B**. Рециклізація останнього приводить до сульфохлорида **4**; рушійною силою цього процесу, вочевидь, є зменшення стеричного навантаження, що створюють у циклі замісники. Отриманий сульфохлорид **4** при обробці надлишком естеру амінокислоти у розчині ТГФ за температури 0–5°C легко утворює амінокислотні сульфаміди **5** (схема 1).

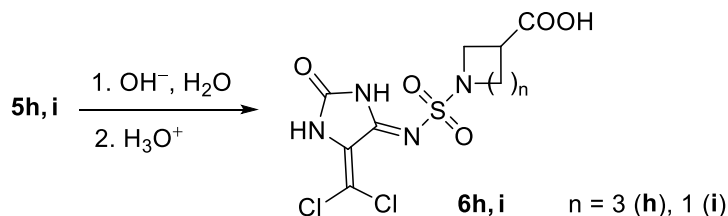
Схема 1



У такий спосіб були синтезовані сульфаміди із залишками естерів гліцину, аланіну, β -аланіну, фенілаланіну, аспарагінової і глутамінової кислоти, проліну, ніпекотинової кислоти та азетидин-2-карбонової кислоти. Похідні хіральных амінокислот були отримані на основі оптично чистих естерів L-ряду.

Похідні **6** з вільною карбоксильною групою були синтезовані шляхом гідролізу відповідних естерів у лужному середовищі (схема 2), і варто відмітити стабільність інших функціональних угруповань, попри те, що реакція відбувається при нагріванні.

Схема 2



Виходи на кожній зі стадій були від посередніх до високих, що, у сукупності з простотою синтетичної процедури, підтверджує ефективність цієї методології; отже, в подальшому перелік таких речовин може бути значно розширено.

Таким чином, нами синтезовано нові 4-іміногідантоїнові сульфаміди з фрагментами амінокислот – перспективні речовини для пошуку нових біологічно активних препаратів, зокрема, противірусних засобів.

1. <https://go.drugbank.com/drugs/DB00252>.
2. LoVecchio F. Hydantoin Anticonvulsants: Phenytoin and Fosphenytoin. *Critical Care Toxicology* / Eds. J. Brent, K. Burkhardt, P. Dargan et al. – Springer, Cham., 2017. – P. 1043–1052.
3. Shablykin O.V., Kornii Y.Eu., Dyakonenko V.V. et al. Synthesis and anticancer activity of new substituted imidazolidinone sulfonamides // *Curr. Chem. Lett.* – 2019. – 8, No. 4. – P. 199–210.
4. Kornii Y.Eu., Chumachenko S., Shablykin O. et al. New 2-Oxoimidazolidine Derivatives: Design, Synthesis and Evaluation of Anti-BK Virus Activities in Vitro // *Chem. Biodiversity*. – 2019. – 16. – e1900391.

ОЦІНКА ТОКСИЧНОСТІ АМІДІВ (5-(ДИХЛОРОМЕТИЛЕН)-2-ОКСОІМІДАЗОЛІДИН-4-ІЛІДЕН)СУЛЬФАМІНОВОЇ КИСЛОТИ

Корній Ю.Є.¹, Клімова О.О.², Шабликін О.В.¹, Броварець В.С.¹, Бражко О.А.²

¹ Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря НАН України, s8092011@ukr.net

² Запорізький національний університет

Необхідним етапом дослідження будь-якого лікарського засобу є визначення токсичності та інших можливих ризиків, пов'язаних з його використанням. Навіть після введення препаратів у практику, вивчення їх негативного впливу на здоров'я пацієнтів не припиняється; висвітленню нових даних стосовно токсичності ліків навіть присвячуються окремі розділи спеціалізованих видань, таких як, наприклад, збірка "Critical Care Toxicology" [1], де гострі отруєння, спричинені лікарськими препаратами, розглядаються на одному рівні із отруєннями наркотичними засобами та хімічною зброєю. Тому при пошуку нових біологічно активних сульфамідів окрему увагу ми приділили вивченню їх токсичності *in vivo*.

У попередніх дослідженнях нами було розроблено зручний і ефективний метод синтезу (5-(дихлорометилден)-2-оксоімідазолідин-4-іліден)сульфаміохлориду **1** (рис. 1) та різноманітних сульфамідів **2** на його основі [2, 3]. Серед одержаних сульфамідів були знайдені речовини із протираковою (зокрема, сполуки **2a,b**, рис. 1) [2] та противірусною [3] активністю.

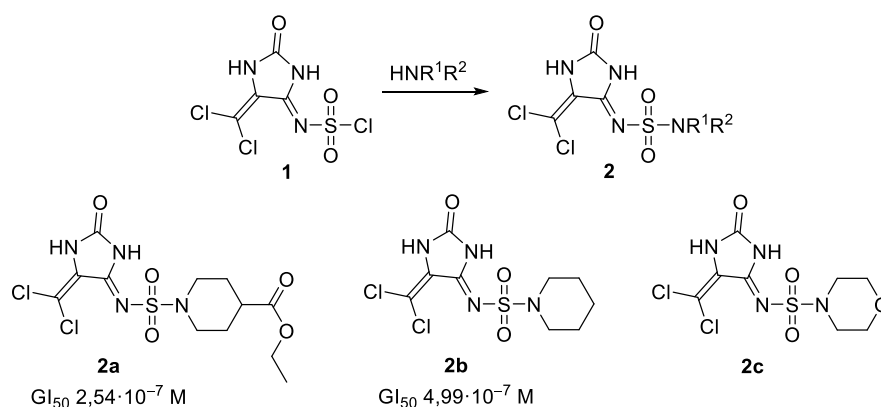


Рис. 1 (вказано GI_{50} – концентрацію, що викликала уповільнення росту на 50% лінії KM12 раку товстої кишки)

Враховуючи, що висока протипухлинна активність може бути наслідком загальної цитотоксичності, нами була проведена оцінка гострої токсичності сполуки **2a** – найбільш ефективного інгібітора росту злоякісних клітин – та сполуки **2c** (рис. 1), яка за попередньою оцінкою не була віднесена до перспективних протипухлинних засобів.

За прогнозованими *in silico* показниками токсичності (програмний пакет GUSAR [4]) досліджувані речовини **2a,c** можуть бути визнані малотоксичними. Дослідження LD_{50} *in vivo* були проведені на білих безпородних мишах обох статей масою 16–24 г. Сполуки **2a,c** вводили одноразово внутрішньочеревинно у вигляді тонкої суспензії у фізіологічному розчині, стабілізованій Твіном 80 [5]. Отримані дані підсумовані нижче у таблиці:

Сполука	LD_{50} при внутрішньочеревинному введенні, мг/кг		Клас токсичності	Ступінь токсичності
	<i>in silico</i>	<i>in vivo</i>		
2a	~ 170	142 ± 11	IV	малотоксичні
c	~ 680	71 ± 5,6	III	помірнотоксичні

Цікаво, що похідна **2a**, для якої дійсно встановлена висока протипухлинна активність, на практиці виявила токсичність помітно нижчу, ніж сполука **2c**.

Таким чином, дослідження окремих представників амідів (5-(дихлорометилен)-2-оксоімідазолідин-4-іліден)сульфамінової кислоти дає підстави розраховувати на низьку токсичність таких похідних, що робить більш значущими перспективи їх використання як лікарських засобів.

1. Critical Care Toxicology: diagnosis and Management of the Critically Poisoned Patient / Eds. J. Brent, K. Burkhart, P. Dargan et al. – Springer, 2017. – 2nd ed. – 3058 pp.

2. Shablykin O.V., Kornii Y.Eu., Dyakonenko V.V. et al. Synthesis and anticancer activity of new substituted imidazolidinone sulfonamides // Curr. Chem. Lett. – 2019. – 8, No. 4. – P. 199–210.

3. Kornii Y.Eu., Chumachenko S., Shablykin O. et al. New 2-Oxoimidazolidine Derivatives: Design, Synthesis and Evaluation of Anti-BK Virus Activities *in Vitro* // Chem. Biodiversity. – 2019. – 16. – e1900391.

4. <http://www.way2drug.com/gusar/acutopredict.html>

5. Прозоровский В.Б., Прозоровская М.П., Демченко В.М. Экспресс-метод определения средней эффективной дозы и ее ошибки // Фармакология и токсикология. – 1978. – № 4. – С. 497–502.

ВПЛИВ ПРИРОДИ НАПОВНЮВАЧА НА МОРФОЛОГІЮ І ВЛАСТИВОСТІ ПОЛІЛАКТИДНИХ МАТЕРІАЛІВ

Камрук Д.С., Масюк А.С., Кисіль Х.В., Куліш Б.І., Левицький В.Є.

Національний університет «Львівська політехніка», SamoiliukD@gmail.com

Сьогодні особливу увагу привертає використання біодеградабельних полімерних матеріалів синтезованих на основі відтворювальних природних ресурсів, які здатні до швидкого розкладу в умовах навколишнього середовища під дією зовнішніх чинників (волога, тепло, мікроорганізми, ультрафіолетове випромінювання тощо). Це, насамперед, обумовлено забрудненням навколишнього середовища відходами полімерних матеріалів та виробами на їх основі. Одним із таких матеріалів є полілактид (ПЛА) - продукт поліконденсації молочної кислоти, який є лінійним аліфатичним біодеградабельним поліестером одержаним з відновлювальної сировини (крохмалю). Однак, полілактидам притаманні і деякі недоліки, найбільш суттєвими з яких є низька теплостійкість, погана хімічна стійкість, що значною мірою впливає на фізико-механічні властивості композитів на їхній основі. У зв'язку з цим, виникає необхідність у створенні нових полілактидних матеріалів з підвищеними технологічними та експлуатаційними характеристиками.

Для одержання полімерних композиційних матеріалів використовували полілактид марки Ingeo 2500 HP (NatureWorks, США). Як дрібнодисперсні наповнювачі використовували кальцію ортофосфат ($\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$) і кальцію гідроортофосфат (CaHPO_4). Надмолекулярну структуру полілактидних композитів визначали методом рентгенівського аналізу дифракції використовуючи дифрактометр ДРОН-4-07 з опроміненням лампою з Си-анодом і Ni-фільтром (довжина опромінювального світла $\lambda_{\text{CuK}\alpha} = 0,15418$ нм). Термомеханічні дослідження проводилися на консистометрі Хеплера відповідно до ISO 11359-1:1999. Теплостійкість за Віка досліджуваних матеріалів визначили згідно ISO 306:2013.

На підставі проведених рентгеноструктурних досліджень встановлено, що для всіх зразків полілактиду спостерігаються піки за кутів дифракції 2θ : $15-17^\circ$ (кристалографічна площина 110 і 200) і $18-19^\circ$ (кристалографічна площина 201), які характеризують кристалічну структуру стереорегулярного L-полілактиду. Такі особливості вказують на те, що чисті кристали ПЛА є типовими орторомбічними або псевдо-орторомбічними кристалами з параметрами решітки: $a = 10,66$ Å, $b = 6,16$ Å, $c = 28,88$ Å., і тип кристалічної структура ПЛА не змінюється навіть під час введення наповнювача. Слід відзначити, що найбільше значення ступеня кристалічності (46 %) характерне для термообробленого зразка полілактидного матеріалу, а найменше відповідно для вихідного ненаповненого полілактиду (22 %).

Виявлено, що термомеханічні криві полілактидних композитів, незалежно від природи дрібнодисперсного наповнювача є характерними для полімерів з частково кристалічною структурою. Встановлено, що перехід у в'язкотекучий стан композитів на основі ПЛА відбувається за $190-193$ °C. Ці температури є суттєво нижчими за температури термоокисної деструкції макромолекул ПЛА ($280 \div 340$ °C), що дозволяє переробляти ПЛА композити литтям під тиском, екструзією, 3Д друком тощо. Слід відзначити, що найбільші значення температури топлення і теплостійкості отриманих матеріалів є характерними для наповнених термооброблених зразків, які відзначаються найбільшим ступенем кристалічності.

Встановлено, що введення кальцій вмісних наповнювачів незначно підвищує теплостійкість за Віка розроблених матеріалів. При цьому додаткове термооброблення суттєво впливає на значення теплостійкості, зокрема відзначається зростання теплостійкості за Віка на $40-50$ °C, що, очевидно, пов'язано із зростанням ступеня кристалічності полілактидних матеріалів і підсилюючою дією частинок наповнювача.

ЕЛЕКТРОФІЛЬНА ВНУТРІШНЬОМОЛЕКУЛЯРНА ЦИКЛІЗАЦІЯ ПЕНТЕНІЛЬНОГО ТІОПОХІДНОГО 1,2,4-ТРИАЗОЛУ

Король Н.І., Головка-Камошенкова О.М., Сливка М.В.

Ужгородський національний університет, nataliya.korol@uzhnu.edu.ua

Вивчення реакцій 1,2,4-триазолів є надзвичайно перспективним напрямком хімії гетероциклічних сполук, оскільки безліч функціональних і конденсованих похідних цього класу речовин знайшли практичне застосування у медицині, фармації, сільському господарстві [1-3].

Метод електрофільної гетероциклізації є зручним та малозатратним інструментом у синтезі такого роду сполук і доведено, що одержані таким підходом речовини також проявляють цінні властивості [4,5]. Описані досі реакції характеризувалися чітким перебігом взаємодії та прогнозованими цільовими продуктами [6].

У даній роботі ми представляємо дослідження присвячене синтезу раніше неописаних тіазепінтриазолів через взаємодію пентенільного похідного 1,2,4-триазол-3-тіону **1** з електрофілом, в якості якого ми використали бром. Реакцію виконували при кімнатній температурі у середовищі льодяної оцтової кислоти за умов постійного перемішування та сильного розведення розчинів триазолу та електрофілу. Після аналізу отриманих спектральних даних виявилось, що продуктом є конденсована сіль **2** (Схема 1).

Про утворення саме продукту **2** свідчать зникнення сигналів у спектрі ПМР атомів Гідрогену біля кратного зв'язку у вихідному тіоетері **1**, а саме – мультиплетів при 4.96-5.04 м.ч. (1H, $\text{CH}=\text{CH}_2$) та 5.73-5.83 м.ч. (2H, $\text{CH}=\text{CH}_2$); натомість з'являються сигнали двох атомів Гідрогену бромометильної групи при 4.45 м.ч. та 4.81 м.ч., а також сигнал атома Гідрогену біля вузлового Карбону при 6.76 м.ч., що підтверджує утворення цільового продукту **2**.

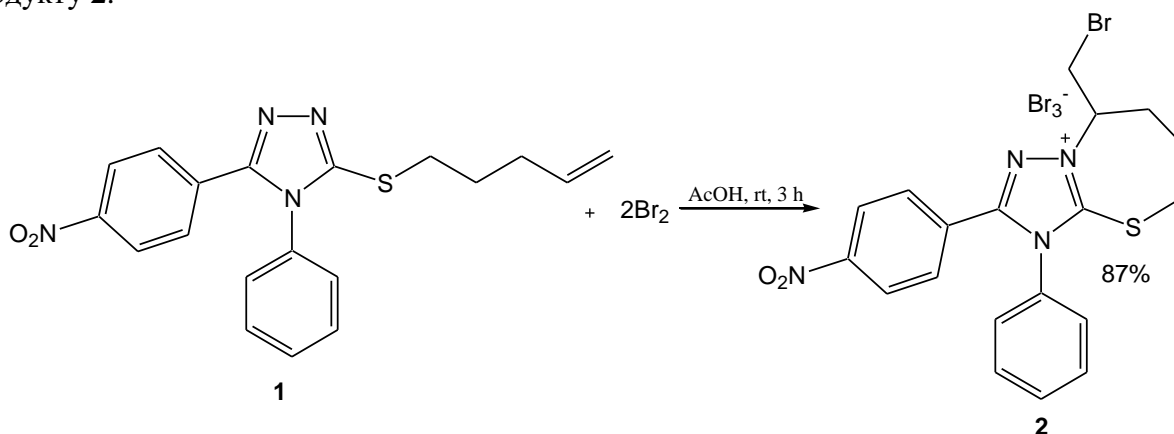


Схема 1 Одержання бромоциклізованого тіазепінтриазолу **2**

1. Patil S. R., Asrondkar A., Patil V., Sangshetti J. N., Khan F. A. K., Damale M. G., Patil R. H., Bobade A. S., Shinde D. B. *Bioorg // Med. Chem. Lett.* – 2017. – 27. – P. 3845.
2. Li C., Liu J. C., Li Y. R., Gou C., Zhang M. L., Liu H. Y., Li X. Z., Zheng C. J., Piao H. R., // *Bioorg. Med. Chem. Lett.* – 2015. – 25. – 3052.
3. Abdel-Rahman F., Clercq E. D., El-Kashefa H. // *Arkivoc.* – 2006. – 10. – 137.
4. Korol N., Slivka M., Fizer M., Baumer V. // *Monatsh. Chem.* – 2020. – 151. – 191.
5. Slivka M., Korol N., Fizer M., Baumer V. // *Heterocycl. Commun.* – 2018. – 24. – 197.
6. Slivka M., Korol N., Pantyo V., Baumer V., Lendel V. // *Heterocycl. Commun.* – 2017. – 23. – 109.

ЗАСТОСУВАННЯ ЕНАМІНОКЕТОНІВ 2'-КАРБОКСИДЕЗОКСИБЕНЗОЇНІВ В СИНТЕЗІ ІЗОХРОМЕН-1-ОНІВ ТА ІЗОХІНОЛОНІВ

Кукушкіна К.В., Москвіна В.С., Шабликіна О.В., Іщенко В.В., Хіля В.П.

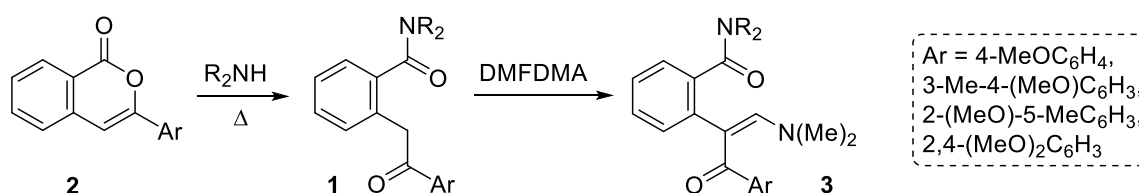
Київський національний університет імені Тараса Шевченка

v.moskvina@gmail.com

Сучасний розвиток синтетичної органічної хімії вимагає розробки нових методів синтезу гетероциклічних сполук, які базуються на застосуванні доступних вихідних сполук та мінімальній послідовності хімічних трансформацій з отриманням структурно-різноманітних продуктів. Зазначимо, що дезоксибензоїни всебічно застосовують в якості зручних вихідних інтермедіатів для отримання різноманітних гетероциклічних сполук.

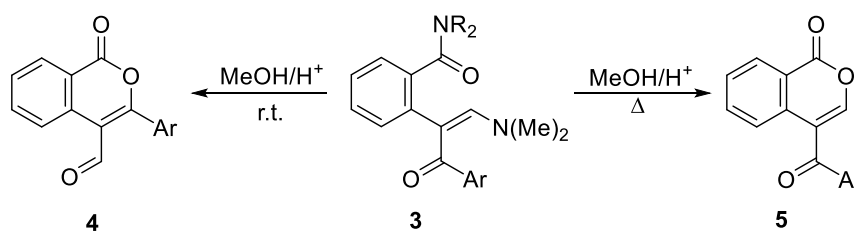
В попередніх роботах нами успішно розроблено ефективний метод синтезу амідів 2'-карбоксихидроксибензоїнів **1** шляхом розкриття ізохроменового циклу в сполуках **2** під дією надлишку вторинних амінів (5 екв.) (схема 1) [1]. Також продемонстровано, що *S*-формілювання отриманих амідів **1** під дією диметилацеталу диметилформаміду (DMFDMA) завершувалось утворенням функціоналізованих енамінокетонів **3** з високими виходами (схема 1) [2].

Схема 1



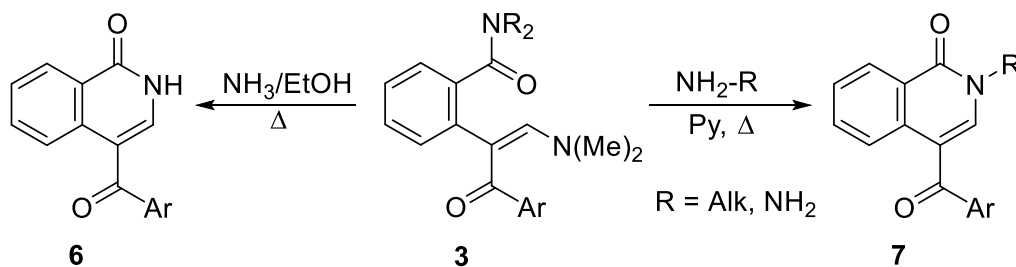
Досліджена поведінка отриманих енамінокетонів **3** в кислому середовищі. Так, перемішування сполук **3** впродовж 15-30 хвилин в MeOH з додаванням HCl завершувалось утворенням 3-арил-1*H*-ізохромен-4-карбальдегідів **4** з високими виходами [2], а кип'ятіння реакційної суміші впродовж 1 години дозволило отримати виключно 4-ароїл-1*H*-ізохромен-1-они **5** (схема 2).

Схема 2



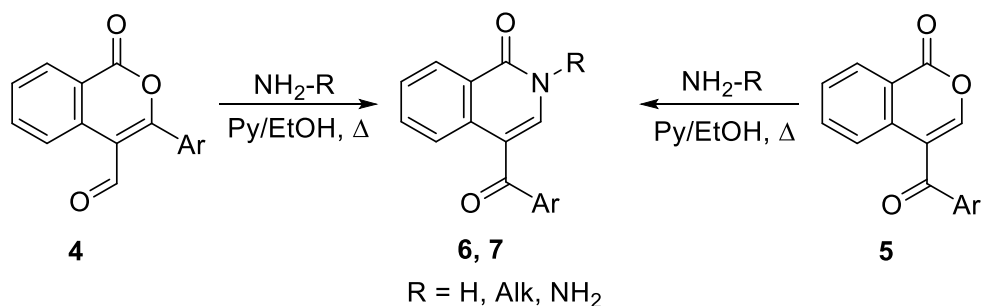
Таким чином, виходячи з амідів 2'-карбоксихидроксибензоїнів успішно отримано різні типи продуктів – енамінокетони 2'-карбоксамідодеоксибензоїнів (сполуки **3**), 3-арил-1*H*-ізохромен-4-карбальдегіди (сполуки **4**) та 4-ароїл-1*H*-ізохромен-1-они (сполуки **5**). Варто зазначити, що отримані сполуки **3-5** у своїй структурі мають декілька реакційноздатних центрів. Тому на наступному етапі наших досліджень було вивчення хімічної поведінки продуктів **3-5** в реакціях з *N*-вмісними нуклеофільними реагентами.

Так, нагрівання енамінокетонів **3** в спиртовому розчині аміака супроводжувалось внутрішньомолекулярним нуклеофільним заміщенням амідного угруповання з наступною гетероциклізацією з утворенням відповідних 4-ароїлізохінолін-1(2*H*)-онів **6** (схема 3).



Взаємодія сполук **3** з алкіламінами та гідрaziном успішно проходила в Py або EtOH при нагріванні та завершувалась утворенням відповідних 2-(алкіл/аміно)-4-ароїлізохінолін-1(2H)-онів **7** (схема 3).

Цікаво, що при дії *N*-вмісних нуклеофілів на 3-арил-1*H*-ізохромен-4-карбальдегіди **4** та 4-ароїл-1*H*-ізохромен-1-они **5** відбувалась рециклізація ізохроменового циклу з утворенням виключно 4-ароїлізохінолін-1(2H)-онів **6** та **7** (схема 4).



Зазначимо, що в усіх випадках реакції проходили досить швидко, а простота процедури виділення продуктів дозволили отримати ключові сполуки без додаткової очистки з досить гарними виходами.

Таким чином, в результаті роботи розроблені ефективні методики синтезу багатофункціональних сполук – енамінокетонів 2'-карбоксамідодеоксибензоїнів, 3-арил-1*H*-ізохромен-4-карбальдегідів, 4-ароїл-1*H*-ізохромен-1-онів, 4-ароїлізохінолін-1(2H)-онів та 2-(алкіл/аміно)-4-ароїлізохінолін-1(2H)-онів. Зазначимо, що наявність різноманітних функціональних груп в отриманих сполуках дозволяє проводити ціленаправлену структурну модифікацію, застосовуючи мінімальну послідовність хімічних перетворень. З іншого боку, оцінка фізико-хімічних характеристик та дослідження біологічної активності сполук **3-7** дозволить отримати продукти з широким спектром корисної дії.

1. Shablykina O.V., Moskvina V.S., Ishchenko V.V., Valter E.B., Khilya V.P. Functionalized 2'-carboxamidodeoxybenzoins by ring opening of 3-aryl-1*H*-isochromene-1-ones with secondary amines. // Chem. Heterocycl. Comp. – 2016. – 52, №4. – P. 275–278.

2. Moskvina V.S., Shablykina O.V., Ishchenko V.V., Khilya V.P. Efficient synthesis of 1-oxo-3-aryl-1*H*-isochromene-4-carbaldehydes from enaminketones of 2'-carboxamidodeoxybenzoins. // Tetrahedron Letters – 2017. – 58, № 3. – P. 245–247.

**ТЕЛУРОІНДУКОВАНА ЕЛЕКТРОФІЛЬНА ВНУТРІШНЬОМОЛЕКУЛЯРНА
ЦИКЛІЗАЦІЯ 3-АЛКЕНІЛ-2-ТІО-2,3-ДИГІДРОХІАЗОЛІН-4(1H)-ОНІВ
ІНДИВІДУАЛЬНИМ ТЕТРАХЛОРИДОМ ТЕЛУРУ**

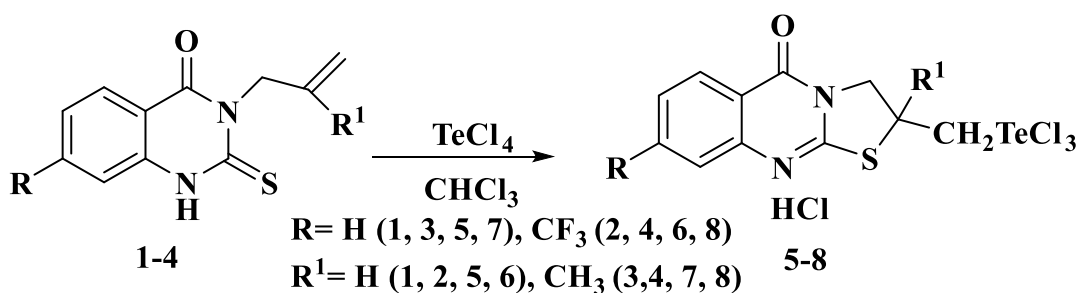
Кут Д.Ж., Кут М.М., Онисько М.Ю., Балог І.М., Лендел В.Г.

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», dianabereksazi@gmail.com

Особливий інтерес представляють конденсовані системи, що містять в своєму складі атом телуру, оскільки відомо, що телурурганічні сполуки мають цілий ряд цінних властивостей, проявляючи високу біологічну активність та володіючи важливими технічними характеристиками. Вони з успіхом використовуються в якості синтонів та інтермедіатів в органічному синтезі, напівпровідникових матеріалів, плівок та покриттів, інгібіторів окиснення та стабілізаторів мастильних матеріалів.

В останні роки для синтезу таких гетероциклічних сполук широко використовуються реакції електрофільної внутрішньомолекулярної циклізації функціонально замічених олефінів. Незважаючи на відомі успіхи в дослідженні цих реакцій для одержання гетероциклічних систем їх синтетичні можливості ще не розкрито. Особливо мало розроблено методів одержання телуровмісних гетероциклічних сполук з використанням індивідуального тетрахлориду телуру як електрофільного циклізуючого реагенту. Тому синтез нових телуровмісних гетероциклів з використанням індивідуального тетрахлориду телуру є актуальним завданням.

Об'єктом для дослідження телуроциклізації вибрано гетероциклічну систему хіназоліну, а саме 3-алкеніл-2-тіо-2,3-дигідрохіназолін-4(1H)-они **1-4**. Проведення реакції між індивідуальним тетрахлоридом телуру та тіонами **1-4** в льодяній оцтовій кислоті, ацетонітрилі та ПГФ при кімнатній температурі, а також нагрівання реакційної суміші в даних розчинниках приводить до осмолення реакційної суміші та екструзії елементарного телуру. Найбільш оптимальними умовами проведення реакції виявилось використання в якості розчинника хлороформу та перемішування вихідних реагентів при кімнатній температурі. В результаті реакції одержано гідрохлориди 2-[(трихлоро-телуро)метил]-2,3-дигідро-5H-[1,3]тіазоло[2,3-b]хіназолін-5-онів **5-8** лінійної будови.



Будову отриманих сполук підтверджено спектрами ЯМР (¹H та ¹³C), ІЧ-спектрами, а склад елементним аналізом.

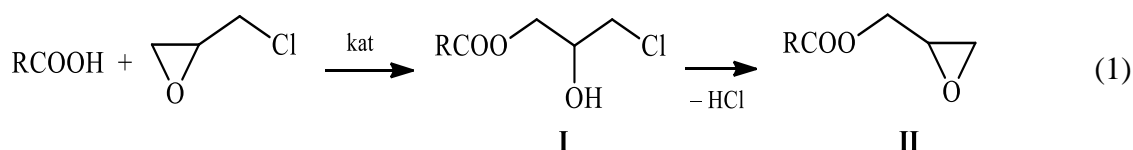
Таким чином, в результаті даної роботи вперше досліджено регіохімію електрофільної внутрішньомолекулярної циклізації 3-алкеніл-2-тіо-2,3-дигідрохіназолін-4(1H)-онів під дією індивідуального тетрахлориду телуру та отримано потенційно біологічно активні халькогеновмісні тіазолохіназолінові системи лінійної будови.

ЕФЕКТ ТЕМПЕРАТУРИ І СТРУКТУРИ РЕАГЕНТА НА АЦИДОЛІЗ ЕПІХЛОРГІДРИНУ ПРИ КАТАЛІЗІ ТЕТРА-*n*-БУТИЛАМОНІЙ ХЛОРИДОМ

Макоцька О. Ю., Ютілова К. С., Швед О. М.

Донецький національний університет імені Василя Стуса, makotska.o@donnu.edu.ua

Епіхлоргідрин (1-хлор-2,3-епоксипропан, ЕХГ) – важливий синтон, що використовується у синтезі широкого ряду речовин – гліцерину, епоксидних смол, стабілізаторів для хлорорганічних сполук, іонобмінних смол, барвників, поверхнево-активних речовин, фармацевтичних препаратів. В основі трансформації структури ЕХГ знаходиться є реакцій з різноманітними протонувмісними нуклеофільними реагентами. Зокрема, реакція розкриття оксиранового циклу ЕХГ карбоновими кислотами (1) приводить до утворення хлоргідринового естеру **I**, що в подальшій циклізації перетворюється в гліцидиловий естер **II**, який є промислово цінним як мономер у синтезі епоксидних смол.



Одними з ефективних каталізаторів, що використовують у реакції (1), є галогеніди тетраалкіламонію. З літературних даних відомо, що порядок реакції за кислотним реагентом лежить в межах $0 \div 1$ залежно від його кислотності, співвідношення субстрата і реагента. Важливою складовою експерименту зі встановлення кінетичного закону і механізму реакції (1) є дослідження впливу температури на перебіг процесу розкриття оксиранового циклу і встановлення активаційних параметрів реакції.

Метою роботи є визначення кінетичними методами ефекту температури і структури кислотного реагента у реакції розкриття оксиранового циклу епіхлоргідрину оцтовою та пропіоновою кислотами у присутності каталізатору тетра-*n*-бутиламоній хлориду.

Об'єктами дослідження є епіхлоргідрин, оцтова кислота, пропіонова кислота, тетра-*n*-бутиламоній хлорид ($n\text{-C}_4\text{H}_9\text{NCl}$).

Дослідження реакції ацидолізу епіхлоргідрину оцтовою та пропіоновою кислотами проводилося у бінарному розчиннику ЕХГ : ТГФ (1:1 об.). У всіх реакційних серіях ЕХГ знаходиться у значному надлишку, що перешкоджає процесам асоціації компонентів суміші. Дослідження проводилось у температурному діапазоні $40 \div 80$ °С. Концентрація каталізатору тетра-*n*-бутиламоній хлориду варіювалася в межах $0,00125 \div 0,00500$ моль/л при початковій концентрації кислотного реагенту 0,2 моль/л. Контроль за ходом реакції здійснювався методом потенціометричного кислотно-основного титрування.

У результаті кінетичного дослідження реакції (1) було встановлено нульовий порядок за обома карбоновими кислотами та перший – за каталізатором. Встановлено кінетичний закон реакції, оцінено спостережувані та каталітичні константи швидкості реакції. З'ясовано, що некаталітичний процес перебігає на три порядки повільніше за каталітичний. Це вказує на ефективність тетра-*n*-бутиламоній хлориду як каталізатора реакції (1). На основі значень констант швидкостей сформульовано висновок, що збільшення донорних властивостей замісника у складі карбонової кислоти сприяє, хоча й несуттєво, збільшенню швидкості реакції – пропіонова кислота має дещо більшу реакційну здатність. Визначено вплив температури на швидкість реакції. Підвищення температури реакції приводить до збільшення швидкості ацидолізу епіхлоргідрину. За рівняннями Арреніуса та Ейринга розраховані енергія, ентальпія та ентропія активації. Показано, що величини активаційних параметрів є характерними для реакцій, що перебігають за S_N2 -механізмом. Одержані дані є основою прогнозування реакційної здатності аліфатичних карбонових кислот у реакції з ЕХГ в присутності тетра-*n*-бутиламоній хлориду та можуть бути використані для оптимізації умов промислового одержання епоксидних мономерів.

РІДКІ ФОТОПОЛІМЕРНІ СИСТЕМИ ДЛЯ БАГАТОШАРОВОГО УДАРОСТІЙКОГО СКЛА

Матюшов В.Ф., Толстов О.Л.

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України, a.tolstov@ukr.net

Рідкі акрилатні фотополімерні системи мають широкі можливості практичного застосування – як адгезиви, суперсорбенти, герметики спеціального призначення. Одним з найважливіших напрямів застосування це застосування в процесі виготовлення багатошарових скляних конструкцій (БСК) з підвищеною ударною стійкістю для цивільного та спеціального призначення.

На сьогодні існують дві основні технології одержання БСК: ламінування загартованого скла полімерними плівками за різних умов та формування рідких прошарків фотоотверджувальних композицій з подальшим їхнім контрольованим твердінням. Останній спосіб є більш універсальним та може піддаватись проміжному модифікуванню в межах технологічного процесу. Ключовими вимогами для полімерних шарів в складі БСК є висока та довготривала прозорість, висока адгезія до скла, контрольований процес твердіння, та відповідні фізико-механічні властивості, в межах яких задовільна міцність поєднана з еластичністю в широкому інтервалі температур. Такий комплекс властивостей можна отримати виключно створенням мікрогетерогенних полімерних систем з частковим суміщенням окремих фаз.

В роботі було створена низка рідких фотополімерних композицій на основі суміші (мет)акрилатних мономерів, зшиваючих та структуруючих агентів та оптимізовано метод їхнього твердіння з метою запобігання впливу експлуатаційні характеристики кінцевих матеріалів (оптичні, адгезійні, механічні).

Для визначення перспектив застосування отриманих фотополімерних систем як демпфуючого шару між загартованими шарами скла застосовували метод механічної спектроскопії, зокрема температурну залежність модулю механічних втрат E'' . Саме його підвищені значення в інтервалі температур експлуатації для окремої фотополімерної системи свідчать про покращені демпфуючі характеристики, а задовільний рівень адгезії до скла та збереження оптичної прозорості в жорстких умовах кліматичних випробувань – про перспективу застосування при виготовленні БСК різного призначення.

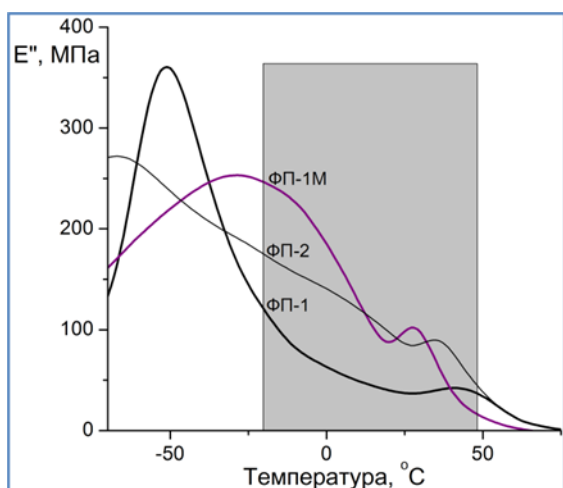


Рис. 1 Модуль механічних втрат комерційних фотополімерних композицій для БСК: ФП-1 (вир. РФ), ФП-1М (вир. РФ з модифікатором), ФП-2 (вир. КНР)

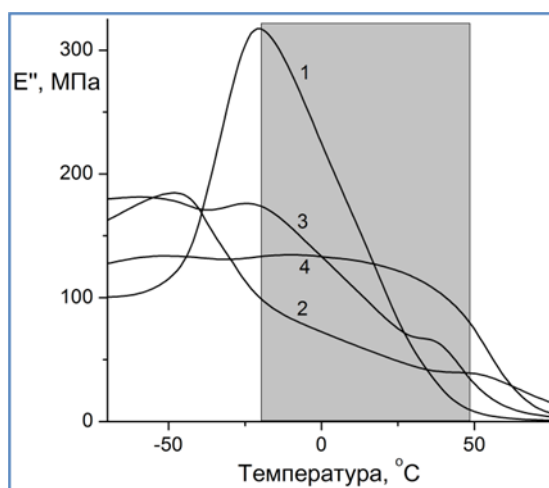


Рис. 2 Модуль механічних втрат створених рідких фотополімерних систем для БСК: 1 – пластифікований поліметилметакрилат, 2 – еластомерна композиція; 3 та 4 – зміцнені еластомерні системи

Використовуючи попередній досвід у розробці фотополімерних систем було проведено модифікування відомої рідкої фотополімерної композиції ФП-1 сумішшю структурних модифікаторів, що підвищило енергодисипаційну ефективність одержаної фотополімерної композиції ФП-1М (рис. 1) при застосуванні в ударотривких та балістично стійких БСК. Крім того були створені нові фотополімерні матеріали для БСК з покращеним інтервалом температур експлуатації, покращеними демпфуючими характеристиками (рис. 2) та високою оптичною стабільністю. Одержані фотополімери характеризуються помірною швидкістю твердіння, розривною міцністю до 20 МПа, відносним подовженням при розриві до 500 % та прозорістю у видимому діапазоні хвиль > 97 % (рис. 3).

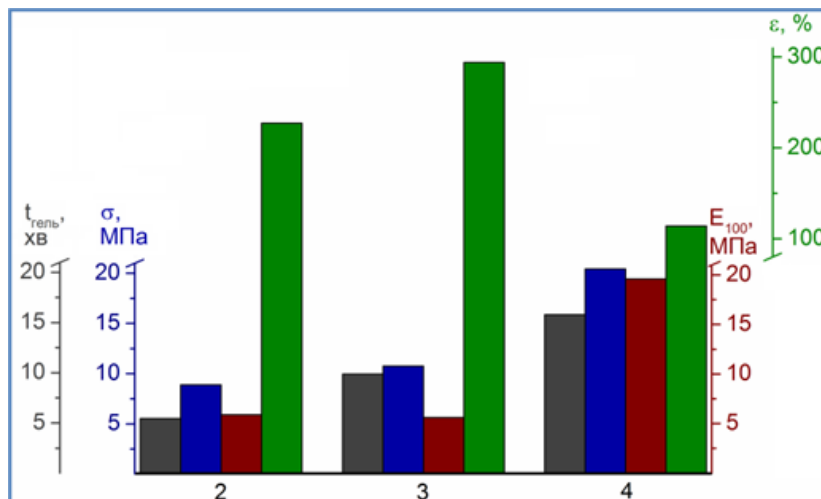


Рис. 3 Фотоотвердзувальні та експлуатаційні характеристики фотополімерних композицій

СИНТЕЗ 2-(4-ТОЛІЛ)-1Н-БЕНЗО[4,5]ІМІДАЗО- [1,2-*a*][1,3,5]ТРИАЗЕПІН-5(4Н)-ОНУ

Михальченко О.А.¹, Демидчук Б.А.²

¹НТУУ «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», Zeter4@gmail.com

²Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря НАН України, bogdem@ukr.net

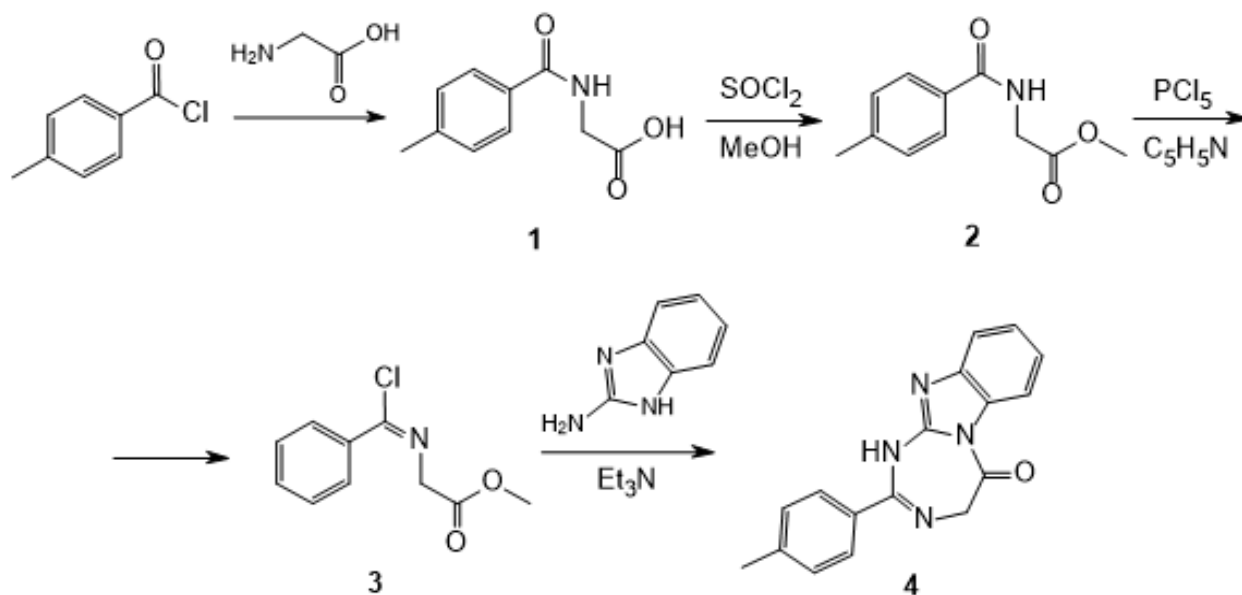
Останнім часом пошук, створення та тестування медичних препаратів, діюча речовина яких є новою хімічною сполукою, являє собою одним з найбільш важливих завдань сучасної органічної та біоорганічної хімії. Серед лікарських засобів природного та синтетичного походження значна більшість є представниками гетероциклічних сполук. Серед багатьох сімей конденсованих гетероциклів є такі, що мають один або кілька атомів азоту, такі як індоли, хіназоліни, бензодіазепіни, які широко представлені в літературі як ліганди або фармакофори. Цікавим представником семичленних гетероциклів є триазепінони. Біологічні дослідження виявили серед них сполуки, що мають терапевтичні властивості, є представниками препаратів, що можуть проявляти антипухлинні та антивірусні властивості та застосовуватися у боротьбі проти психічних захворювань [1].

В даній роботі нами запропоновано метод синтезу невідомого раніше 2-(4-толil)-1Н-бензо[4,5]імiдазо[1,2-*a*][1,3,5]триазепiн-5(4Н)-ону.

Гіпурова кислота **1** була отримана згідно з відомою методикою [2], яку було перетворено у метиловий естер **2**. Суміш піридину та пентахлориду фосфору було використано для отримання імідоїлхлориду **3** зі збереженням естерної групи [3].

Взаємодія 2-амінобензімідазолу з імідоїлхлоридом **3** в присутності триетиламіну проходить спочатку по первинній аміногрупі та положенню 2 2-((хлоро(4-толil)метилен)аміно)ацетату. Надалі відбувається внутрішньомолекулярне заміщення

метокси групи імідазольним фрагментом з утворенням 2-(4-толіл)-1*H*-бензо[4,5]імідазо[1,2-*a*][1,3,5]триазепін-5(4*H*)-ону **4**. Структура сполуки підтверджена спектрами ЯМР ¹H, ¹³C та мас-спектром.



1. Komodziński K. Biological evaluation of an imidazole-fused 1,3,5-triazepinone nucleoside and its photochemical generation via a 6-azidopurine modified oligonucleotide. //Tetrahedron Letters. – 2013. – 54. – P. 3781–3784.

2. Ingersoll A.W., Babcock S. H.. Hippuric acid // Organic Syntheses, Coll. – Vol. 2, p. 328 (1943); Vol. 12, p. 40 (1932).

3. Драч Б.С., Миськевич Г.Н. Взаимодействие метилового эфира β,β-дихлор-α-бензамидоакриловой кислоты с пятихлористым фосфором //Журнал органической химии. – 1978. – Т. 14, N 5. – С. 943-947.

СИНТЕЗ КОМПАТИБІЛІЗАТОРІВ ДЛЯ СТВОРЕННЯ КОМПОЗИЦІЙНИХ ПОЛІМЕРНИХ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ ВТОРИННОЇ СИРОВИНИ

В.Д. Мишак, В.В. Семиног, О.М. Сірик, В.В. Мужев

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України, myshak_vd@ukr.net

На даний час проблема переробки відходів полімерних матеріалів має актуальне значення як з точки зору охорони навколишнього середовища, так і у зв'язку з тим, що в умовах дефіциту полімерної сировини пластмасові відходи стають потужним сировинним та енергетичним ресурсом. Отже створення композиційних полімерних матеріалів на основі відходів термопластів та гумової крихти є важливою задачею сучасності. Однак у своїй більшості гумопласти характеризуються низькими фізико-механічними показниками, що пов'язано з термодинамічною несумісністю складових. Одним із шляхів вирішення цієї проблеми є розробка та використання компатибілізаторів, які при введенні в композиційні полімерні матеріалів, як правило, розміщуються на межі розподілу фаз, зменшують міжфазний натяг і покращують сумісність компонентів полімерної суміші. Як компатибілізатори використовують статистичні, блок-, привиті кополімери або полімери, які містять функціональні групи, близькі за хімічною природою одному або обом полімерним компонентам суміші. Перспективними сполуками для отримання блоккополімерів

(компатибілізаторів) є функціоналізовані термопласти і реакційноздатні олігомери (РЗО) рослинних олій. Блоккополімери (БК) на їх основі завдяки карболанцюговій природі та наявності в будові подвійних зв'язків можуть бути використані як компатибілізатори композиційних полімерних матеріалів на основі вторинного поліпропілену (ВПП) та гумової крихти (ГК).

Мета роботи – синтез блоккополімеру на основі функціоналізованого гідроксилвмісного кополімеру етилену з вінілацетатом (КЕВА) і реакційноздатного олігомеру на соєвій олії, та використання його як компатибілізатору при створенні композиційних полімерних матеріалів на основі ВПП і дисперсної ГК.

Синтез БК проводили в 4 стадії, на першій з яких було проведено аміноліз кополімеру етилену з вінілацетатом, як функціоналізуючий агент використовували моноетаноламін [1]. В результаті амінолізу отримали гідроксилвмісний кополімер (1,48 % мас. ОН-груп). Кількість ланок етилену в кополімері складає 82,16 %; вінілового спирту - 3,35 %; вінілацетату - 14,49 %.

На другій стадії проведено функціоналізацію соєвої олії моноетаноламіном за мольного співвідношення компонентів 1:1 [2]. Проходження реакції контролювали методом ІЧ-спектроскопії. Кількість ОН-груп за результатами титрування становила 3,45 % мас.

На третій стадії, в результаті взаємодії гідроксилвмісного реакційноздатного олігомеру соєвої олії з 2,4; 2,6-толуїлендіізоціанатом співвідношення 20/80 (ТДІ) синтезували моноізоціанатуретани (МІУ). Реакцію проводили за мольного співвідношення ОН:NCO=1:2. Проходження реакції синтезу моноізоціанатуретанів соєвої олії та структуру отриманого МІУ досліджували методом ІЧ-спектроскопії за появою інтенсивної смуги з максимумом за 2270 см^{-1} , яка підтверджує наявність NCO-груп, деформаційних і валентних коливань NH-груп з максимумами за $1540, 3305\text{ см}^{-1}$ відповідно, та зникненню плеча в області $3450\text{-}3625\text{ см}^{-1}$ широкої смуги за $3200\text{-}3625\text{ см}^{-1}$, яке відповідає за валентні коливання ОН-груп. Визначений методом зворотного титрування діетиламіном масовий відсоток NCO-груп у МІУ соєвої олії не суттєво відрізняється від теоретичного (9,16 % мас.) і складає 9,36 % мас.

На четвертій стадії в результаті реакції уретаноутворення між ОН-групами гідроксилвмісного кополімеру етилену з вінілацетатом та NCO-групами МІУ соєвої олії був отриманий БК. Реакцію проводили за мольного співвідношення ОН:NCO=1:1.

Методом екстракції в о-ксилолі визначали гель-фракцію отриманого БК, відсутність якої дає змогу говорити про те, що в результаті реакції відбувається утворення лінійних полімерів з прищепленими фрагментами олігомерів рослинного походження. Разом з тим не виключено проходження побічних реакцій з утворенням циклічних та розгалужених структур. Синтезований БК розчинний в ароматичних розчинниках та тетрагідрофурані.

Отриманий БК був охарактеризований методом гель-проникної хроматографії (ГПХ). Встановлено, що синтезовані БК характеризуються вищою середньочисловою, середньомасовою молекулярними масами та більш широким молекулярномасовим розподілом у порівнянні з відповідними характеристиками вихідного компоненту – гідроксилвмісного КЕВА, що підтверджує прищеплення МІУ соєвої олії до КЕВА та утворення БК (табл.1).

Таблиця 1

Параметри молекулярно-масового розподілу гідроксилвмісного КЕВА та БК

Зразок	M_n	M_w	M_w/M_n
КЕВА функц. ОН-гр.	18841	31471	1,670
БК	20019	38296	1,913
	1343	1615	1,203

Результати досліджень характеру гелхроматограми продукту взаємодії гідроксилвмісного КЕВА з МІУ соєвої олії вказують на неоднорідність за молекулярною масою молекул, що входять до складу БК. Аналіз імовірних структур, що можуть утворитись внаслідок взаємодії КЕВА з МІУ та дані ГПХ свідчать, що в результаті реакцій відбувається утворення як БК, так і продуктів взаємодії реакційноздатних олігомерів соєвої олії.

Отриманий БК характеризується покращеними фізико-механічними властивостями: міцність при розтязі (σ_p) на 92% вище σ_p вихідного КЕВА і дорівнює 11,68 МПа; видовження ($\Delta\epsilon$) в свою чергу зростає на 49% та становить 1990%. Підвищення σ_p може бути пов'язано зі зростанням молекулярної маси кополімеру та утворенням уретанових груп в результаті прищеплення РЗО рослинної олії, зростання $\Delta\epsilon$ - з введенням гнучких ланок жирних кислот до складу КЕВА та з їх пластифікуючою дією.

Ефективність використання синтезованого БК як компатибілізатора вивчали шляхом оцінки фізико-механічних характеристик (σ_p і $\Delta\epsilon$) зразків композиційних матеріалів на основі ВПП (60% мас.) і ГК (40% мас.), до складу яких було введено 1, 3, 5, 10 % мас. БК. Композиційні матеріали були отримані шляхом механічного змішування ВПП, ГК і БК, з подальшою гомогенізацією отриманої суміші в одношнековому екструдері. Температура в зонах обігріву складала 140, 160, 170 °С. Отриманий екструдат подрібнювали і формували з нього методом прямого пресування (за температури 170 °С та тиску 3 МПа) зразки для подальшого визначення їхніх властивостей. Встановлено, що міцність при розриві зростає на 17 % та залежить від кількості введеного БК. Найбільш ефективна концентрація БК становить 5 % мас. Зростання розривної міцності композицій при введенні БК можна пояснити наявністю у його складі блоків, які близькі за хімічною природою компонентам полімерної матриці, що сприяє їх термодинамічній сумісності на межі розподілу фаз, зменшує міжфазний натяг та покращує адгезію між компонентами.

1. Мишак В.Д. Прищеплений блоккополімер на основі функціоналізованого кополімеру етилену з вінілацететом і рідкого каучуку. Синтез, структура, властивості / В.Д. Мишак, О.М. Сірик, В.К. Грищенко, Є.В. Лебедев // Полімерний журнал. - 2013. – Т.35, № 1. - С. 101-109.

2. Bubnova A., Gudzenko N., Barantsova A., Sysyuk V., Grishchenko V. // Scientific basis of modern technologies: experience and prospects. Monograph: edited by Shalapko Y.I., Dobrzanski L.A. – 2011. – P. 471-482.

БІОРОЗКЛАДНІ ПОЛІМЕРНІ МАТЕРІАЛИ НА ОСНОВІ КРОХМАЛЮ

Подгорна О. В., Віленський В. О.

Житомирський державний університет імені Івана Франка

podgorna.olga@ukr.net

Швидке зростання населення планети тягне за собою збільшення кількості відходів, в тому числі пластикових виробів всіх видів. Найбільш небезпечними для екології прийнято вважати полімерні відходи. Їх надзвичайна стійкість до впливу навколишнього середовища стає справжньою проблемою для сучасної екологічної ситуації, а спалювання подібних відходів призводить до виділення токсичних газів [1].

На сьогоднішній день найбільш перспективним напрямком в утилізації використаних полімерних виробів є створення біорозкладних полімерів, основними перевагами виробництва яких є:

- можливість обробки, як і звичайних полімерів, на стандартному обладнанні;
- низький бар'єр пропускання кисню, водяної пари (оптимально для використання в галузі харчової упаковки);
- швидка і повна розчинність при спеціально створених або природних умовах;

- незалежність від нафтохімічної сировини [2].

Відомо вже більше ста біополімерів і композитів на їх основі, і це число постійно зростає. Одними з перших біополімерів були отримані матеріали на основі крохмалю з різних видів рослинної сировини- картоплі, кукурудзи, пшениці, рису. Термопластичний або термопластифікований крохмаль (ТПК) - це відносно новий термін і в даний час є одним з головних напрямків дослідження для виробництва відносно дешевих біорозкладних матеріалів [3].

Метою роботи є вивчення проблем отримання і вивчення деяких властивостей (включаючи біорозклад) композиційних матеріалів, виготовлених на основі кукурудзяного крохмалю і суміші поліолефінів - поліпропілену, поліетилену і етилен вінілацетату.

Біорозкладний композит виготовляють наступним чином. Гранули поліпропілену (ПП) змішують з поліетиленом, етиленвінілацетатом, додають в суміш моностеарат гліцерину і поліетиленовий віск, перемішують компоненти в швидкісному турбоміксері при температурі 100-120 ° С протягом 20 хв, потім в змішувач поступово додають порошок кукурудзяного крохмалю, далі вводять порошок діоксиду титану, підвищують температуру до 125 ° С, продовжують нагрів суміші протягом 30 хв, потім охолоджують суміш до 25-30 ° С і витягають з міксера. Далі суміш надходить в екструдер для розплавлення і гомогенізації. Отриманий розплав охолоджується і формується у вигляді стрічки.

Будучи напівкристалічним полімером, що містить полярні ацетатні групи, етиленвінілацетат забезпечує зеднання частинок крохмалю з поліолефінами, а також сприяє підвищенню біологічного руйнування за рахунок аморфізації структури ПП. Відомо, що додавання етиленвінілацетату в розплав ПП впливає на ріст кристаліту і властивості композиційного матеріалу [1].

При додаванні в розплав поліетилену утворюється каплевидна фаза, яка додатково розпушує матрицю. Таким чином, біорозкладні композити являють собою складну багаторівневу систему, де частки крохмалю відокремлені один від одного полімерним прошарком.

Отже, при виготовленні біорозкладного композиційного матеріалу на основі порошку кукурудзяного крохмалю і поліолефінів, наявність в структурі певної кількості низкоплавких полімерів, ПАР і змочуючих добавок (лубрикантів) сприяє формуванню однорідної гетерогенної системи, а тонка гібридна стінка між частинками крохмалю містить крім модифікованого поліпропілену безліч макропор, що в цілому сприяє прискореному гідро- і біологічному розкладанню матеріалу.

1. <http://cleandex.ru/>[Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://www.cleandex.ru/articles/2007/11/20/residue_utilization25

2. Кучменова, Л. Х. Термические свойства полимер-полимерных композитов на основе полипропилена : дис. ... канд. техн. наук : 02.00.06 / Л. Х. Кучменова. – Кабардино-Балкар. гос. ун-т. – Нальчик, 2014. – 125 с.

3. Лонг Ю. Биоразлагаемые полимерные смеси и композиты из возобновляемых источников/ Ю. Лонг Пер. с англ. под ред. В.Н. Кулезнева. – М.: Издательство «Научные основы и технологии», 2012.- 464с.

4. Суворова А. И. Биоразлагаемые полимерные материалы на основе крахмала // Успехи химии. – 2000. – Т. 69, № 5. – С. 494–504.

ЗАХИСНІ АНТИКОРОЗІЙНІ ПОКРИТТЯ ДЛЯ МАГІСТРАЛЬНИХ ГАЗОПРОВІДІВ ТА ІНШОГО ТЕХНОЛОГІЧНОГО ОБЛАДНАННЯ НА ОСНОВІ МОДИФІКОВАНИХ ФУРФУРИНО-ЕПОКСИДНИХ ПОЛІМЕРНИХ СИСТЕМ

Рассоха О.М., Черкашина Г.М., Деріус Д.В.

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»,
rassan2000@ukr.net

Розвиток сучасної промисловості пов'язаний з освоєнням нових технологій, які передбачають контакт промислового (технологічного) обладнання з фізично і хімічно агресивними експлуатаційними середовищами та підвищеними температурами. В зв'язку з цим велика частка обладнання та конструкцій з металу піддається прискореній корозії і передчасно втрачає свою роботоздатність. Важливе місце в полімерному матеріалознавстві серед антикорозійних систем належить композитам, що містять фуранові полімери різної хімічної природи. Галузі використання композиційних систем з фурановими полімерами постійно розширюються, а марочний асортимент неухильно зростає. Особливу увагу в даному випадку приділяється вихідним речовинам (мономерам) – сполукам фуранового ряду. Експериментально в лабораторних умовах, а також при натурних випробуваннях при експлуатації виробів в реальних обставинах встановлено, що більш високу термічну та хімічну стійкість мають фуранові похідні, що містять в структурі мономеру та повторювальному ланцюгу полімеру два та більш фуранових циклу. Наприклад, три фуранових циклу в мономері містить фурфурамід – продукт взаємодії фурфуролу та аміаку, а також головний його послідовник – фурфурін. Використання фурфуріну та фурфураміду при одержанні функціональних полімерних матеріалів і формуванні захисних антикорозійних покриттів дозволяє суттєво (в 2 – 5 разів) підвищити термін ефективної роботоздатності газопромислового обладнання і зниження швидкості корозійних процесів.

Даний напрям полімерного матеріалознавства хімічно та термічно стійких систем на сучасному етапі інноваційного розвитку і має надзвичайно важливий перспективний напрямок. Мономер-олігомерні продукти та полімерні матеріали з даного типу фуранових систем одержують з фурфуріну (трифурфурілімідазоліна). Основним інгредієнтом для одержання фурфуріну та фурфураміду є фурфурол – багатотоннажний продукт промислової переробки (шляхом гідролізу за спеціальними технологіями) пентозанвмісних відходів рослинного походження. Всі відомі на сучасному етапі розвитку хімічної промисловості методи одержання фурфураміду з високим ступенем конверсії вихідної сировини базуються на хімічній реакції взаємодії фурфуролу або його похідних з аміаком, а також його солями. В рамках даної роботи виконано експериментальне дослідження характеру та напрямку хімічної реакції взаємодії фурфуролу, фурфуролвмісних середовищ з аміаком (при різних концентраціях цього компонента) з метою отримання фурфураміду. Визначені оптимальні параметри технологічного процесу (температура, час, концентрація та послідовність подання до реакційної зони основних компонентів тощо) одержання фурфураміду з урахуванням особливостей сировини різного походження.

В роботі проведено аналіз можливостей використання вихідної сировини різного якісного складу, а саме: *фурфурол* – особливо чистий (практично з концентрацією 100 мас. %) свіжоперегнаний впродовж першої доби після перегону, товарні марки мономеру вищого, першого, другого сортів, *фурфурол-сирець*, промислові стічні *фурфуролвміські стічні води* гідролізних виробництв (при чітко визначеній концентрації *фурфуролу* в даному середовищі), модельні *фурфуролвміські розчини* різної концентрації (від 5 до 45 мас.%); *аміак* – 5; 10; 15; 25 % - ний водний розчин, водні розчини деяких солей амонію з концентрацією даного інгредієнта в інтервалі 15 – 35 мас. %. Для подальшої роботи (синтезу *фурфуріну* та одержання захисних антикорозійних матеріалів) використовувався технічний продукт – *фурфурамід* – з вмістом основної речовини не менш 98 мас. %. При цьому стабільність основних фізико-хімічних параметрів одержаного *фурфураміду* (зовнішній вигляд, густина, насипна густина, розчинність тощо) зберігалася впродовж 60 діб.

Фурфурін є другою формою існування фурфурамідів з іншими технічними властивостями. В лабораторних та промислових умовах його одержують шляхом поступового нагрівання фурфурамідів до температур, що перевищують температуру його топлення (приблизно 119 °С). В результаті процесу ізомеризації (хімічної реакції термоциклізації) фурфурамід без руйнування молекули перетворюється до фурфуріну. Фурфурін в цих температурних умовах синтезується у всіх випадках незалежно від того, здійснюється процес нагрівання тільки одного (чистого) фурфураміду, або в присутності якихось інших хімічних речовин та спільно з деякими іншими компонентами, які в розглянутому температурному діапазоні не взаємодіють ні з фурфурамідом, ні з фурфуріном. В роботі проведені експериментальні дослідження синтезу фурфуріну шляхом термічної циклізації фурфурамідів, визначені оптимальні параметри технологічного процесу, які забезпечують одержання товарного продукту з вмістом основної речовини не менш 97 – 98 мас. %, стабільністю технічних характеристик матеріалу впродовж не менш 60 діб. При цьому ступінь конверсії фурфурамідів при оптимальних параметрах технологічного процесу становить 96 – 99 %.

Технологічний процес формування захисного антикорозійного покриття на зовнішній поверхні промислового обладнання умовно можна поділити на дві категорії.

Основними компонентами реакційноздатного композиційного матеріалу обрані фурфурамід, епоксидіанові олігомери різної молекулярної маси та в'язкості (марок ЕД-16, ЕД-20, ЕД-22), структуруючі агенти - суміш аміних та цианетильованих амінів (тужавлювачив) – високоактивний поліетиленполіамін, низькоактивний моноцианетилдиетилентриамін марки УП-0633М (кількість тужавлювачив в композиційній системі визначалась максимальними деформаційно-міцнісними параметрами структурованої реакційноздатної мономер-олігомерної системи), функціональні модифікатори (при необхідності). Застосування низькоактивного тужавлювача марки УП-0633М забезпечує оптимальне протікання процесів структурування реакційноздатної системи, що дозволяє формувати стійке до дії зовнішніх механічних та хімічних факторів покриття з мінімумом залишкових внутрішніх напружень. Технологічний процес одержання матеріалу і формування захисного антикорозійного покриття характеризується відносною простотою та експлуатаційною надійністю.

Перша категорія формування покриття: розрахункова кількість епоксидіанового олігомеру та фурфурамідів завантажують до реактору, вмикають мішалку та обігрів. Суміш нагрівають до 120-125 °С та витримують при цій температурі та сталому перемішуванні впродовж 1,5 – 2,0 год. В цих умовах завершується термоциклізація фурфурамідів до фурфуріну. Утворюється фурфуріно-епоксидний матеріал. Потім суміш охолоджують до кімнатної температури. Захисне антикорозійне покриття на зовнішню металеву поверхню промислового обладнання наносили або ручним методом, або за допомогою фарборозпилювача з додаванням суміші тужавлювачив, органічного розчинника, функціонального модифікатора (при необхідності).

Друга категорія формування покриття: визначена кількість епоксидного олігомеру та фурфурамідів завантажують до реактору, вмикають мішалку та обігрів. Суміш нагрівають до температури 50 - 60 °С та витримують при цьому температурному режимі та постійному перемішуванні впродовж 1,0 – 1,5 год. При цьому не відбувається термоциклізація фурфурамідів до фурфуріну. Потім суміш охолоджують до кімнатної температури. Покриття на нагріту до температури 120 – 125 °С металеву поверхню обладнання наносили або вручну, або за допомогою фарбопульта з додаванням необхідних інгредієнтів і витримували при цій температурі 0,5 – 1,0 год. В цьому температурному діапазоні завершується термоциклізація фурфурамідів до фурфуріну.

Розроблено та впроваджено декілька схем покриття газопромислового обладнання з використанням фурфуріно-епоксидних полімерів з підвищеною стійкістю до експлуатаційних факторів.

ВИКОРИСТАННЯ ФУРАНОВИХ ФУНКЦІОНАЛЬНО МОДИФІКОВАНИХ ВИСОКОМОЛЕКУЛЯРНИХ СПОЛУК ПРИ ОДЕРЖАННІ БЕЗВИПАЛЬНИХ ПЕРИКЛАЗВУГЛЕЦЕВИХ ВОГНЕТРИВКИХ ВИРОБІВ

Рассоха О.М., Черкашина Г.М., Мажуга О.В.

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»

rassan2000@ukr.net

В технологічному процесі виробництва безвипальних вогнетривких матеріалів та виробів з них в якості матриці (полімерного сполучника) останнім часом найшли застосовування різні високомолекулярні сполуки (наприклад, фенолоальдегідні реакційноздатні матеріали та їх похідні). Але при використанні вказаних реакційноздатних олігомерно-полімерних систем (сполучників) дуже часто має місце неповне змочування та розтікання рідкої фази (сполучника) на поверхні дисперсної фази вогнетривкого виробу (периклазу, вуглецю тощо). При неякісному змішуванні інгредієнтів периклазвуглецевого вогнетривкого матеріалу з полімерним сполучником в деяких випадках утворюються практично сферичні агломерати з середнім діаметром 1 – 5 мм (складаються з периклазу та вуглецю), поверхня яких майже не вкрита реакційноздатною речовиною.

В технології виробництва вогнетривких матеріалів та виробів з них (у тому числі й периклазвуглецевих) суттєво скорочуються витрати енергетичного потенціалу (наприклад, електричної енергії) внаслідок технічно обґрунтованого виключення з технологічного процесу стадії високотемпературного випалу (1300 – 1400 °С), яка є основною при одержанні звичайних, базових вогнетривких виробів.

Неструктуровані сполучники на основі реакційноздатних олігомерних з'єднань різної хімічної природи надають вогнетривким виробам підвищену механічну міцність (головним чином, руйнівну напругу при стиску) у свіжосформованому стані, що дозволяє в технологічному виробництві виробів застосовувати допоміжне транспортне технологічне обладнання нового покоління (інтелектуальні промислові роботи, маніпулятори тощо) при транспортуванні виробів з однієї технологічної стадії (операції) на іншу без суттєвого ушкодження об'єкту транспортування та погіршення деформаційно-міцностних, технологічних та експлуатаційних властивостей свіжосформованих вогнетривких виробів.

Після хімічного структурування (тужавлення) олігомерного реакційноздатного сполучника вогнетривкий периклазвуглецевий виріб отримує конструкційну міцність (високе значення руйнівної напруги при стиску, згині, розтягуванні, підвищена стійкість до ударних навантажень тощо).

На сучасному етапі розвитку матеріалознавства основною технічною проблемою при створенні високоефективних олігомер-полімерних сполучників на основі промислових олігомерних та високомолекулярних з'єднань для одержання безвипальних вогнетривких виробів та набивних мас є досить низька термічна стабільність полімерних матеріалів в діапазоні високих температур (більше 500 °С), незначна величина твердого піролітичного залишку після процесів термічної деструкції та коксування (не більш 3 – 8 мас.) %.

Олігомер-полімерні матеріали, що використовуються на сучасному етапі розвитку вогнетривкої промисловості, характеризуються значною для оптимального технологічного процесу динамічною в'язкістю, що в багатьох випадках призводить до нерівномірного розподілу високомолекулярного сполучника в об'ємі вогнетривкого композиту.

Виникає нагальна потреба розробити вогнетривкі безвипальні композиційні матеріали та високоефективні зв'язуючі для них з метою одержання високоякісних виробів з великим терміном роботи при значних (вище 1400 °С) температурах та впливу розтопів металів різної хімічної природи.

З метою забезпечення сталого стану безвипальних вогнетривких виробів та набивних мас до дії розтопів металів та шлаку в мартенівських пічах та інших теплових агрегатах застосовують термостійкі полімерні матеріали з високим піролітичним залишком (наприклад, на основі фуранових полімерів).

Доцільність вибору в якості основного інгредієнту високомолекулярного сполучника для матриці в безвипальних периклазвуглецевих вогнетривких матеріалах фурфуролацетонового мономеру марки ФАМ обумовлено наступними факторами:

- фурфуролацетоновий мономер марки ФАМ, який у своєму складі містить два основних компонента – монофурфуриліденацетон та дифурфуриліденацетон, має дуже високу плинність (тобто низьку динамічну в'язкість), що в повному обсязі дозволяє забезпечити рівномірний розподіл сполучника в усьому об'ємі реакційної суміші периклазвуглецевих матеріалів; при цьому не виникає потреби використання енергонасиченого змішувального обладнання для проведення якісного суміщення основних інгредієнтів периклазвуглецевої шихти та функціонально модифікованого фуранового сполучника;

- структуровані реакційноздатні системи на основі фурфуролацетонового мономеру ФАМ після термічної та термоокислювальної деструкції (відповідно в інертній, наприклад, азот та окислювальній середовищах – переважно, за участю кисню) мають високий твердий піролітичний залишок – коксове число (в діапазоні 70 – 95 % в залежності від складу сполучника), що забезпечує одержання безвипального периклазвуглецевого вогнетривкого матеріалу стійкого до дії високих температур, розтопленого металу та шлаку при сталій конструктивній міцності виробу;

- фурфуролацетоновий мономер марки ФАМ характеризується високою змочувальною здатністю зовнішньої поверхні частинок основних компонентів периклазвуглецевої вогнетривкої шихти, тобто значними енергетичними параметрами (енергія адгезії, енергія когезії, негативне значення коефіцієнту розтікання за Гаркінсом та ін.), що з забезпечує міцний адгезійний контакт на межі розподілу фаз «високомолекулярний (фурановий) сполучник – дисперсійний вогнетривкий наповнювач»; високий рівень змочування призводить до одержання вогнетривких периклазвуглецевих композитів з мінімальною кількістю структурних дефектів (тріщин, вакуолей, областей з мінімальною густиною тощо) у граничному прошарку композиту, внаслідок чого збільшується міцність (наприклад, руйнівна напруга при стиску, згині) розробленого композиційного матеріалу.

- фуранові мономер-олігомерні системи не містять у своєму складі легколеткі, легкозаймисті компоненти (органічні розчинники, активні – реакційноздатні – розріджувачі), що суттєво поліпшує пожежовибухонебезпечні показники технологічного процесу одержання безвипальних периклазвуглецевих вогнетривких матеріалів;

- фурфуролацетоновий мономер марки ФАМ переходить до неплавкого та нерозчинного стану (структурується) під впливом широкого спектру факторів фізичної та хімічної дії: при нагріванні до (150 – 200) °С проходить конденсація основних компонентів мономеру (фурфуриліденацетонів), внаслідок чого полімерний матеріал набуває тримірну структуру; при дії аміних, цианетильованих амінів та амінофенольних структуруючих агентів (тужавлювачів) при температурах (20 – 150) °С, а в деяких випадках дещо й вище, проходить структурування мономеру з утворенням фурфуролацетонового полімеру, що характеризується високим рівнем деформаційно-міцностних властивостей, мінімальною кількістю структурних дефектів як на поверхні виробу, так і в його об'ємі, низькою пористістю. Крім того, відомий спектр каталізаторів тужавлення типу кислот Л'юїса, які ефективно забезпечують каталітичне тужавлення фурфуролацетонового мономеру марки ФАМ в широкому температурному діапазоні. Наявність різноманітного спектру агентів структурування-тужавлення (хімічної та фізичної природи) дозволяє цілеспрямовано задавати основні міцності, технологічні та експлуатаційні параметри периклазвуглецевих вогнетривких композитів на основі фуранових полімерів.

Основними дисперсними компонентами вогнетривкого композиційного матеріалу в даній роботі були обрані: природний мінерал – периклаз, порошок різного фракційного складу сіруватого кольору з густиною (3550 – 3570) кг/м³, твердістю за шкалою Мооса 5,5 з невеликою кількістю домішок у вигляді заліза, який в основному містить оксид магнію MgO (молекулярна маса 40,30 а.о.м.); графіт – чорний, сталюого кольору дрібнодисперсний

порошок (вуглець - С), густиною (2090 – 2230) кг/м³, твердістю за шкалою Мооса 1 – 2. У вогнетривкій шихті міститься (64,4 -79,0) мас. % периклазу та (19,4 – 28,8) мас. % вуглецю (графіту). Залишок приходить на структуруючі агенти та функціонально модифікуючі інгредієнти.

В рамках даного дослідження на підставі аналізу науково-технічної літератури, охоронних документів (патентів, заявок, авторських свідоцтв), попередніх експериментальних досліджень авторів рекомендовано широкий спектр функціональних модифікаторів фурфуролацетонного мономеру ФАМ для виробництва периклазвуглецевих вогнетривких матеріалів, а саме: кам'яновугільна смола, гідрохінон, пірогалол тощо. Досліджені функціональні модифікатори суттєво підвищують деформаційно-міцнісні, технологічні та експлуатаційні властивості вогнетривких композитів. Приготування та формування виробів з розроблених периклазвуглецевих вогнетривких матеріалів з модифікованою полімерною матрицею здійснюється наступним чином. Підготовку комплексного амінного тужавлювача здійснюють шляхом змішування інгредієнтів в розрахунковому співвідношенні в герметичній ємності при кімнатній температурі.

До змішувача завантажують периклаз фракції (0,06 – 3) мм, який перемішують впродовж (1 - 2) хвилини, потім додають рідкий модифікований реакційноздатний сполучник з комплексним аміним тужавлювачем у відповідному співвідношенні і отриману масу перемішують на протязі 3 хвилин, після чого до суміші додають розрахункову кількість графіту і перемішування системи продовжують ще не менш 3 хвилин, після чого до суміші інгредієнтів додають тонкомелений (фракція менш 0,06 мм) периклаз і масу змішують впродовж (5-8) хвилин. Тривалість загального циклу змішування компонентів системи в середньому складає (12 – 16) хвилин.

Зразки периклазвуглецевого вогнетривкого матеріалу формують шляхом пресування на гідравлічному пресі під тиском (100±5) МПа. Подальше збільшення тиску формування виробів призводить до з'явлення структурних дефектів на поверхні виробів (ефект «перепресування»), які після структурування (тужавлення) аміних агентів фуранової реакційноздатної системи виявляються у вигляді тріщин та інших структурних дефектів як на поверхні так і в об'ємі периклазвуглецевого вогнетривкого композиційного матеріалу. Роботоздатність вогнетривкого виробу в даному випадку втрачається остаточно.

Розроблені в рамках даного дослідження композиційні матеріали з використанням модифікованих сполучників на основі фурфуролацетонного мономеру марки ФАМ (однорідна шихта, свіжосформовані вироби та після структурування реакційноздатного інгредієнту) характеризуються наступними параметрами: ущільнення (відносні одиниці) 0,290 – 0,333; коефіцієнт ущільнення 0,214 – 0,259; крайовий кут змочування рідиною (реакційноздатним фурановим сполучником) поверхні частинок периклазу та вуглецю (18 – 22) градуса; життєздатність матеріалу: суміш аміних тужавлювачів – поліетиленполіаміну та моноціанетилдиетилентетраміну в оптимальному співвідношенні (5,3 – 8,7) год.; руйнівна напруга при стиску свіжосформованих стандартних зразків (3,5 - 4,7) МПа; руйнівна напруга при стиску структурованого - термообробленого при (175 – 180)°С - зразків вогнетривкого матеріалу (18,3 – 23,8) МПа; відносна деформація стиску при руйнуванні (0,58 – 0,67) %, відкрита пористість (1,5 – 3,9) %; втрата маси вогнетривкого виробу після випалу в окислювальному середовищі при 1000°С впродовж 10 годин (2,9 – 4,0)%. Використання модифікуючих інгредієнтів в розроблених композитах сприяє цілеспрямованому регулюванню комплексу властивостей матеріалу та суттєво підвищує деякі показники, які є головними при експлуатації даного типу технологічного обладнання в конкретних умовах.

На підставі одержаних експериментальних результатів та виготовлення модельних виробів з розроблених вогнетривких композиційних матеріалів запропоновані конкретні рецептури та визначені оптимальні параметри технологічних процесів виробництва безвипальних вогнетривких композитів для застосування на підприємствах чорної та кольорової металургії. Одержані вироби при експлуатації на діючих підприємствах показали високий рівень роботоздатності.

НОВИЙ РЕАГЕНТ ДЛЯ СИНТЕЗУ ГЕМ-ДИФТОРОСТИРЕНІВ

Редька М.О.^{1,2}, Блажун О.П.,^{1,2} Григоренко О.О.,^{1,2} Войтенко З.В.¹

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка

² ТОВ НВП "Єнамін", redkamykhailo@gmail.com

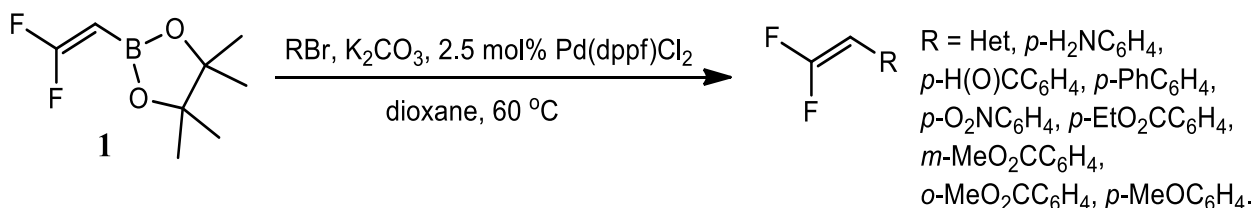
Введення фтору в органічні молекули змінює їх властивості і часто підвищує біологічну активність, з чого випливає підвищений інтерес до методів отримання фторовмісних сполук, які потенційно можуть бути цінними у фармакології, медичній хімії, агрохімії та матеріалознавстві.

Гем-дифторовінільні похідні проявляють унікальні властивості завдяки особливим стеричним і електронним ефектам фтору. Вони є не лише перспективними будівельними блоками для пошуку лікарських засобів, а ще й мономерами для синтезу функціональних полімерів. Більше того, гем-дифтороалкени часто виявляють значну біологічну активність. Наприклад, вони діють як препарати проти герпесу і як інгібітори скваленоксидази – гіполіпідемічні агенти. Використання дифторовінільних похідних викликає значний інтерес, оскільки дифторовініліденовий фрагмент вважається ізостером карбонільної групи.

Завдяки подвійному зв'язку гем-дифторовінільна група може бути перетворена на 2,2,2-трифтороетильну, відновлена до монофторовінільної, дифтороетильної або може бути використана у синтезі фторованих гетероциклів.

У попередніх роботах гем-дифторолефінування здійснювалося за реакціями типу Джуліа, Віттіга, Хорнера – Водстворта – Еммонса або приєднанням дифторокарбенів до фосфоніє вихідів, а також було спряжено з використанням металорганічних сполук. Згадані методи мають певні обмеження щодо функціональних груп, що можуть бути присутніми молекулі, як правило, за рахунок використання сильних основ.

Метою цієї роботи було створення нового реагенту для одержання 1,1-дифторостиренів, що міг би подолати обмеження вже відомих методів, а також був більш зручним у використанні та стабільним при довготривалому зберіганні. Нами було синтезовано пінаколовий естер гем-дифторовінілборонової кислоти (**1**), а також підібрано оптимальні умови та проведено реакції крос-сполучення Сузукі за його участі, яка показала високі виходи цільових продуктів. Будова нових сполук доведена методом спектроскопії ЯМР та мас-спектрометрії.



СИНТЕЗ ТА ОЦІНКА ПРОТИМІКРОБНОЇ ДІЇ 6-АРИЛІДЕН-2-МЕТИЛІМІДАЗО[2,1-*b*]ТІАЗОЛІВ

Салієва Л.М.¹, Сливка Н.Ю.¹, Лукащук М.М.^{1,2}, Вовк М.В.³

¹ Волинський національний університет ім. Лесі Українки, lesya_nykytyuk@ukr.net

² КЗВО "Рівненська медична академія" Рівненської обласної ради

³ Інститут органічної хімії НАН України

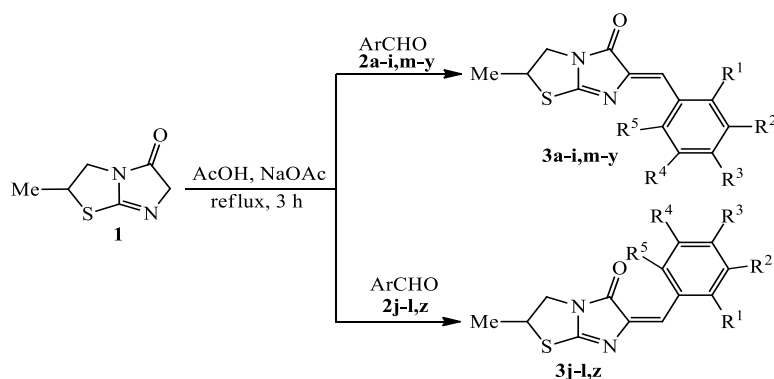
Відкриття антигельмінтного та імуномодельючого препарату «Левімазол» ((*S*)-6-феніл-2,3,5,6-тетрагідроімідазо[2,1-*b*][1,3]тіазол) стало вагомою підставою для досліджень гетероциклічних сполук на імідазотіазольного ядра [1]. Серед похідних імідазо[2,1-*b*]тіазолу виявлено сполуки із вираженою антимікробною [2], нейропротекторною [3] та протираковою [4] активностями. Однак, не зважаючи на цей факт, аналіз літературних джерел засвідчив, що гідровані імідазотіазоли вивчені у значно меншій мірі, порівняно із ароматичними аналогами. Саме тому предметом нашого дослідження стала структурна модифікація доступного 2-метил-2,3-дигідроімідазо[2,1-*b*]тіазолону [5] та вивчення біологічної дії синтезованих на його основі похідних.

Так, положення 6 імідазотіазолу **1** було вдало використане нами як метиленова складова у конденсації Кньюенагеля із ароматичними альдегідами **2a-i**, саліциловими **2j-l** та ванільними альдегідами **2m-z**, що дало змогу отримати відповідні ариліденфункціоналізовані похідні **3a-z**.

Встановлено, що взаємодія імідазотіазолу **1** із альдегідами **2a-z** гладко перебігала при 3 год кип'ятінні у крижаній АсОН за присутності безводного NaOAc та приводила до цільових сполук **3a-z** з виходами 52-91% (схема 1, табл. 1). Варто зазначити, що отримані продукти конденсації **3a-i,m-y** утворювались у вигляді *Z*-ізомерів, що підтверджується розміщенням синглетів протонів групи –CH= в діапазоні 6.72-6.91 м.ч. [6] Натомість ариліденпохідні **3j-l,z** існують у формі *E*-ізомерів, доказом яких є ідентифікація синглетів іліденового замісника у діапазоні 7.04-7.11 м.ч. Найвірогідніше, причина такого факту обумовлена наявністю в *ortho*-положенні до іліденового фрагмента об'ємної OH- та NO₂-групи, які створюють стеричні перешкоди для формування *cis*-продукту.

Антимікробну дію сполук **3a-z** оцінювали за величиною мінімальної бактеріостатичної та фунгістатичної (МБсК, МФсК) концентрацій та мінімальної бактерицидної та фунгіцидної (МБцК, МФцК) концентрацій щодо референс-штамів бактерій (*Staphylococcus aureus* 25923, *Escherichia coli* 25922, *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 27853, *Enterococcus faecalis* ATCC 6783) та грибів (*Aspergillus niger* К 9, *Candida albicans* ATCC 885/653). Результати проведеного біоскрінінгу показали, що тестовані сполуки проявляють помірну протимікробну активність, МБсК та МФсК для яких коливається в діапазоні 31,25-250 мкг/мл.

Схема 1



Показано, що конденсація Кньюенагеля 2-метил-2,3-дигідроімідазо[2,1-*b*]тіазолону із ароматичними альдегідами є зручним варіантом структурної модифікації положення 6 гетероциклічної системи ариліденовим фрагментом. Отримані ариліденпохідні виявляють

помірну антимікробну дію по відношенню до деяких грам-позитивних та грам-негативних бактерій і грибів.

Таблиця 1

а	Сполук	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵
3a		H	H	H	H	H
3b		H	H	Me	H	H
3c		H	H	OMe	H	H
3d		H	H	Me ₂ N	H	H
3e		H	H	OH	H	H
3f		H	H	F	H	H
3g		H	H	Cl	H	H
3h		H	H	Br	H	H
3i		H	H	NO ₂	H	H
3j		OH	H	H	H	H
3k		OH	H	OMe	H	H
3l		OH	H	OH	H	H
3m		H	OMe	OH	H	H
3n		NO ₂	OMe	OH	H	H
3o		H	OMe	OH	NO ₂	H
3p		H	OMe	OH	H	Cl
3q		H	OMe	OH	H	Br
3r		H	allyl	OH	OMe	H
3s		H	cyclopropyl	OH	OMe	H
3t		H	OMe	OH	OMe	H
3u		H	OMe	OH	OH	H
3v		H	OMe	OH	Cl	H
3w		H	OMe	OH	Br	H
3x		H	OMe	OH	I	H
3y		H	t-Bu	OH	t-Bu	H
3z		NO ₂	H	OH	OMe	H

1. Amarouch H.; Loiseau P.R.; Bacha C.; Caujolle R.; Payard M.; Loiseau P.M.; Bories, C.; Gayral, P. Imidazo[2,1-*b*]thiazoles: analogues of levamisole//Eur. J. Med. Chem. – 1987, – 22 (5), – 463-466.

2. Koudad M.; Hamouti, C.El.; Elaattiaoui, A.; Dadou, S.; Oussaid, A.; Abridach, F.; Pilet, G.; Benchat, N.; Allali, M. Synthesis, crystal structure, antimicrobial activity and docking studies of new imidazothiazole derivatives// J. Iran. Chem. Soc. – 2020, – 17, – 297-306.

3. Leoni A.; Frosini M.; Locatelli A.; Micucci M.; Carotenuto C.; Durante M.; Cosconati S.; Budriesi, R. 4-Imidazo[2,1-*b*]thiazole-1,4-DHPs and neuroprotection: preliminary study in hits searching. Eur. J. Med. Chem. 2019, 169, 89-102.

4. Baig M. F.; Nayak V. L.; Budaganaboyina P.; Mullagiri K.; Sunkari S.; Gour, J.; Kamal A. Synthesis and biological evaluation of imidazo[2,1-*b*]thiazole-benzimidazole conjugates as microtubule-targeting agents. Bioorg. Chem. 2018, 77, 515-526.

5. Салієва Л.М., Сливка Н.Ю., Васькевич Р.І., Вовк М.В. Синтез похідних 2,3-дигідроімідазо[2,1-*b*][1,3]тіазолу електрофільною циклізацією 3-аліл-2-тіоксоімідазолідин-4-онів // Укр. хім. журн. 2016, 82 (5-6), 64-68.

6. Khodair A. I.; Gesson J.-P. Sulfur glycosylation reactions involving 3-allyl-2-thiohydantoin nucleoside bases as potential antiviral and antitumor agents. Phosphorus, Sulfur Silicon Relat. Elem. 1998, 142 (1), 167-190.

ПОЛІМЕРНІ ІОННІ РІДИНИ ІОНЕНОВОГО ТИПУ НА ОСНОВІ ПОХІДНИХ ТЕТРАГІДРО-1,4-ОКСАЗИНУ ТА 1,2-ЕПОКСИ-4,7-ДІОКСОНОНЕН-8

Свердліковська О.С., Черваков О.В., Фурса О.О.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,

o.sverdlikovska@gmail.com

На сьогодні одним із важливих напрямів хімії полімерів є розробка нових полімерних іонних рідин із заданими структурно-хімічними характеристиками носіїв, що забезпечують високу ефективність полімерних іонних рідин в якості розчинників і каталітичних середовищ в органічному синтезі та синтезі полімерів, модифікаторів лакофарбових матеріалів і декоративних покриттів, компонентів альтернативних розчинників біорозкладаних матеріалів тощо.

Узагальнення результатів дослідження останніх років у сфері полімерних іонних рідин іоненового типу дозволяють прогнозувати високий рівень властивостей зі збереженням рідкого стану в широкому діапазоні температур полімерних іонних рідин іоненового типу на основі похідних тетрагідро-1,4-оксазину і 1,2-епокси-4,7-діоксононен-8 (ППР).

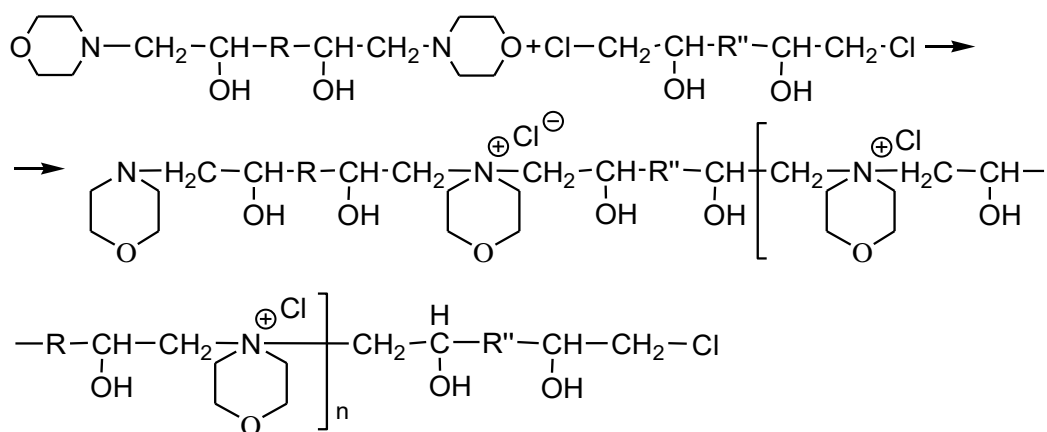
Унікальні властивості 1,2-епокси-4,7-діоксононен-8 дозволяють використовувати сполуки на його основі у різних галузях. Серед розмаїття сполук на основі 1,2-епокси-4,7-діоксононен-8 найбільшу увагу привертають нові мономери, напівпродукти (епоксиацеталі та -ацілалі), що є ефективними розчинниками, пластифікаторами і модифікаторами полімерних епоксидних матеріалів тощо. Необхідно зазначити, що отримані мономери і напівпродукти здатні до подальших хімічних перетворень як за епоксидною, так і за іншим функціональними групами.

Доцільність використання в якості мономерів тетрагідро-1,4-оксазину та 1,2-епокси-4,7-діоксононен-8 для синтезу нового ряду полімерних іонних рідин іоненового типу підтверджується високими показниками іонної провідності раніше синтезованих полімерних іонних рідин на основі епоксидних похідних 1,2-епокси-4,7-діоксононен-8, полімерних іонних рідин та іонних рідин іоненового типу на основі морфоліну при дуже низьких температурах, а також суттєвими техніко-економічними перевагами використання цих сполук, що зумовили застосування розроблених полімерних іонних рідин та іонних рідин у різних сферах для вирішення нагальних проблем хімії та хімічної технології.

Синтез ППР здійснено за реакцією Меншуткіна еквімолекулярних кількостей третинного діаміну (ТДА) на основі похідних тетрагідро-1,4-оксазину та 1,2-епокси-4,7-діоксононен-8 з алкілароматичними й аліфатичними дигалогенопохідними (ДГ) біепоксидних сполук. Синтези проведені за загальною схемою, наведеною на рисунку.

Згідно з літературними джерелами синтез полііоненів реакцією поліконденсації ТДА з ДГ можна проводити в органічному розчиннику (диметилформаміді, етанолі, метанолі тощо), у суміші розчинників органічний розчинник – вода, органічний розчинник – етанол, органічний розчинник – метанол. Це зумовлено розчинністю вихідних мономерів, полімерів і впливом розчинника на швидкість реакції утворення полімеру.

Досліджено вплив різних факторів на в'язкість полімерів: концентрації вихідних мономерів, температури і часу проведення реакції синтезу ППР. Це дозволило удосконалити науково-методичний підхід синтезу ППР за реакцією взаємодії отриманих ТДА і ДГ. Синтез ППР проводили у розчиннику змінного складу етанол–вода при початковому співвідношенні 70:30 за температури 50-60°C протягом 18-20 годин. Вихідні мономери розчиняли в ацетоні до початку осадження продуктів реакції. Початкова концентрація вихідних мономерів для отримання ППР з найбільшою молекулярною масою, які містять радикали аліфатичної будови, складає 0,4 моль/л, а для ППР найбільшою молекулярною масою, які містять радикали алкілароматичної будови, – 0,6 моль/л.



де

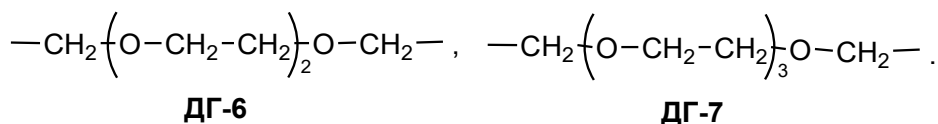
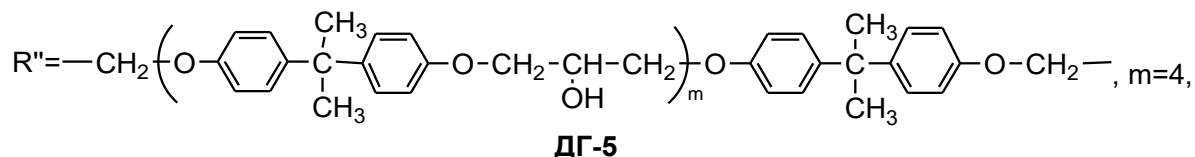
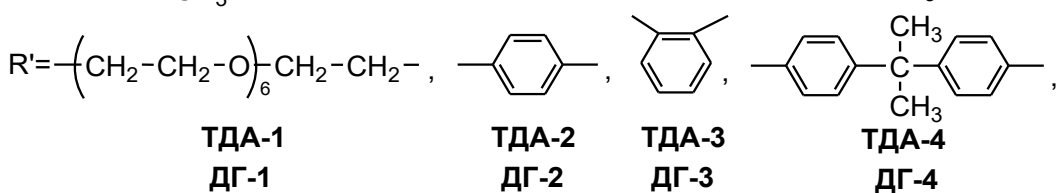
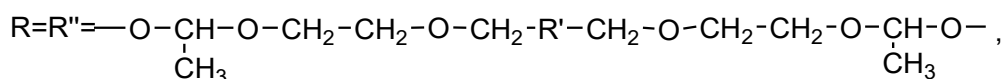


Рис. Схема синтезу полімерних іонних рідин іоненового типу на основі похідних тетрагідро-1,4-оксазину та 1,2-епокси-4,7-діоксононен-8

Будову синтезованих ПІР підтверджено з використанням елементного аналізу та ІЧ-спектроскопії. Характеристичні смуги поглинання в макромолекулі ПІР відповідають вихідним молекулам мономерів, не враховуючи кінцевих груп і четвертинних атомів Нітрогену. В ІЧ спектрах полімерів зникають спектри, характерні для функціональних груп мономерів: $2780\text{--}2840 \text{ см}^{-1}$ – валентні коливання N–CH₃ групи, 660 см^{-1} – валентні коливання C–Cl групи. Для алкілароматичних ПІР присутні характеристичні смуги коливань бензольного фрагменту в області $1620\text{--}1520 \text{ см}^{-1}$. Поява сильної широкої смуги $3600\text{--}3100 \text{ см}^{-1}$ відповідає коливанням хімічно зв'язаної вологи (кристалізаційної води), що свідчить про гідрофільність синтезованих сполук – властивість характерна для високомолекулярних четвертинних амонієвих сполук.

Виходячи з вищезазначеного, актуальним є отримання відомостей, необхідних для рекомендації полімерних іонних рідин та іонних рідин іоненового типу для вирішення науково-технічних проблем хімічної та харчової технологій.

СИНТЕЗ ТА ПРОГНОЗУВАННЯ *IN SILICO* БІОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ ПОХІДНИХ ГІДРОАКРИДИНІВ (ХІНОЛІНІВ)

Сметанін М.В., Токарєва С.В., Варениченко С.А., Фарат О.К., Марков В.І.

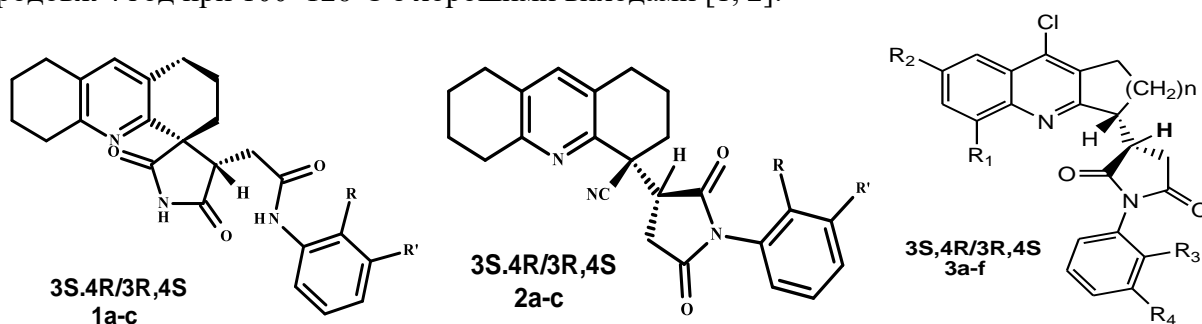
ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»

smetanin.nikolay13@gmail.com

Запалення – захисний механізм організму, який запускається різними стимулюючими факторами. Інгібування циклооксигенази-2 (COX-2) або 5-ліпоксигенази (5-LOX) може допомогти в боротьбі з деякими захворюваннями, включаючи запалення.

Деякі похідні сукцинімідів і акридинів проявили сильну протизапальну активність. Хороші показання випробувань подібних сукцинімідів спонукали нас перевірити синтезовані нами сполуки **3a-f** на наявність протизапальної активності за допомогою молекулярного докінгу.

Реакція синтезу нових похідних сукцинімідів **3a-f** проходить за новою методикою, в некаталітичних умовах нагріванням вихідних гідроакридинів та N-арилмалеїмідів у ДМСО впродовж 4 год при 100–120°C з хорошими виходами [1, 2].



1:a) $R_1=R_2=H$, **b)** $R_1=NO_2$, $R_2=H$; **c)** $R_1=H$, $R_2=NO_2$.

2:a) $R_1=R_2=H$; **b)** $R_1=NO_2$, $R_2=H$; **c)** $R_1=H$, $R_2=NO_2$.

3:a) $n=2$, $R_1=H$, $R_2=Br$, $R_3=NO_2$, $R_4=H$; **b)** $n=2$, $R_1=H$, $R_2=Br$, $R_3=H$, $R_4=NO_2$; **c)** $n=2$, $R_1=H$, $R_2=CH_3$, $R_3=NO_2$, $R_4=H$; **d)** $n=2$, $R_1=CH_3$, $R_2=H$, $R_3=NO_2$, $R_4=H$; **e)** $n=3$, $R_1=H$, $R_2=H$, $R_3=NO_2$, $R_4=H$; **f)** $n=3$, $R_1=H$, $R_2=H$, $R_3=H$, $R_4=NO_2$

Всі синтезовані сполуки були нами перевірені за допомогою рецепторно-орієнтованого гнучкого докінгу та молекулярного моделювання у якості протизапальних агентів. Дані докінгу порівнювалися з даними докінгу еталонних препаратів целекоксиб та індометацин.

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

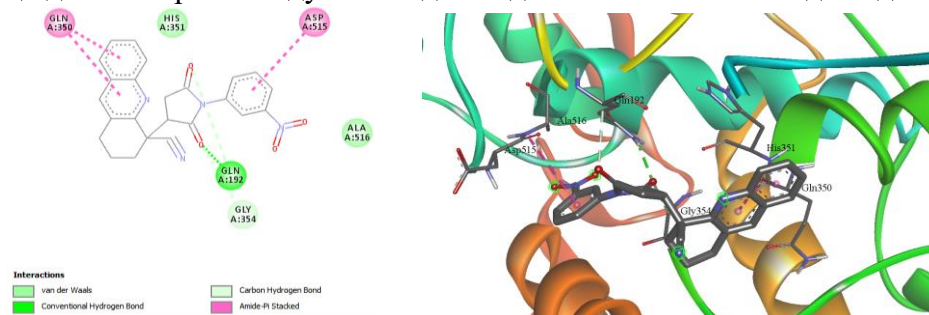


Рис. Будова моделі сполуки **2c** для найкращої стикованої пози в активному місці 1CX2

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

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

СИНТЕЗ ЕСТЕРІВ 1-(4-(КАРБАЗОЛ-9-ІЛ)-ФЕНІЛ)-5-МЕТИЛ/ТРИФТОРОМЕТИЛ-1,2,3-ТРИАЗОЛ-4-КАРБОНОВИХ КИСЛОТ

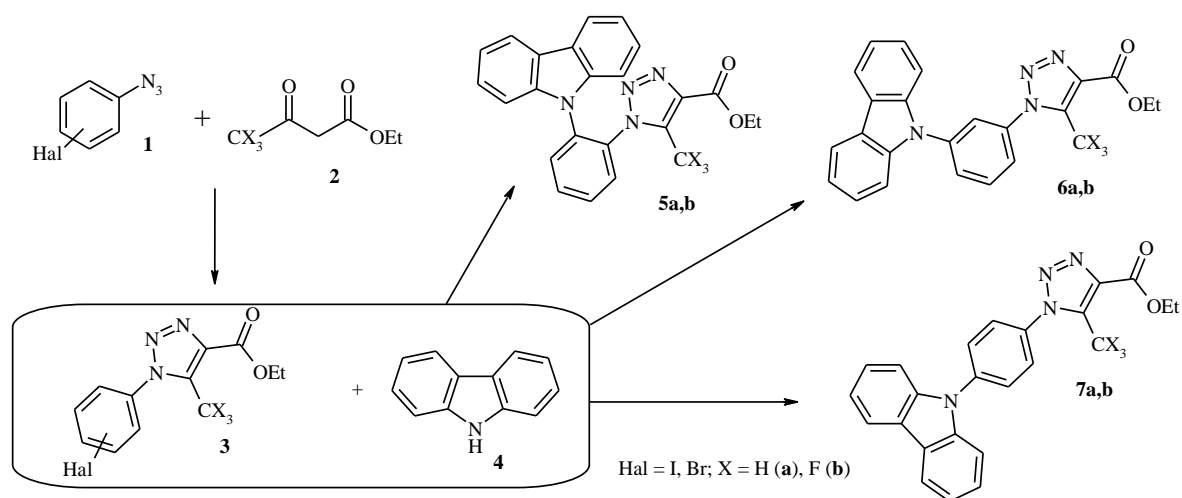
Станіцька М.О.^{1,2}, Походило Н.Т.¹, Керуцкієне Р.², Бутенко С.О.¹, Кінжибало В.³,
Литвин Р.З.¹, Гражулевічус Ю.В.², Обушак М.Д.¹

¹Львівський національний університет імені Івана Франка, roman.lytvyn@lnu.edu.ua

²Kaunas University of Technology, Lithuania

³Institute of Low Temperature and Structure Research, Wroclaw, Poland

Похідні карбазолу знаходять широке практичне застосування у конструюванні лікарських засобів, функціональних матеріалів, барвників, сенсорів, матеріалів для органічної оптоелектроніки, флуоресцентних міток тощо. Розробка методів синтезу таких сполук, а особливо, тих які містять реакційноздатні функціональні групи, є актуальною задачею. Ми синтезували естери 5-метил або 5-трифторометил-1,2,3-триазол-4-карбонівих кислот **5–7**, до яких приєднано фрагменти карбазолу через феніленовий π -спейсер у всіх можливих варіаціях:



При розтиранні кристалів **7b** спостерігали доволі яскраву триболомінесценцію з синім кольором свічення. Тому для кристалів **7b** були проведені рентгеноструктурні дослідження. Як з'ясувалося, кристали сполуки **7b** є нецентросиметичними і, окрім того, молекули у кристалі компактно упаковуються, в результаті чого утворюється велика кількість міжмолекулярних зв'язків (рис. 1), що, очевидно, і є однією з причин триболомінесценції.

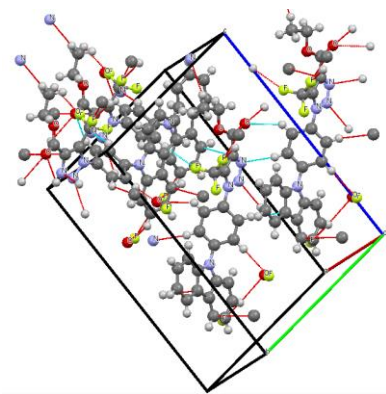


Рис. 1 Молекулярна структура сполуки **7b** та спосіб її упакування у кристалі

Робота підтримана Міністерством освіти і науки України та науково-дослідницькою радою Литви у рамках двостороннього проекту.

СТРУКТУРА І ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НАНОКОМПОЗИТІВ НА ОСНОВІ ПОЛІЦІАНУРАТІВ З АМІНО-ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНИМИ ПОСС

Старостенко О.М.¹, Файнлейб О.М.¹, Григор'єва О.П.¹, Gouanve F.², Espuche E.², Grande D.³

¹Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України, o_starostenko@ukr.net

²Université Lyon 1, IMP CNRS UMR 5223, Ingénierie des Matériaux Polymères

³Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est, UMR 7182 CNRS – Université Paris-Est Créteil

Термостійкі поліціанурати (ПЦ) – це густо зшиті сітчасті полімери, які синтезують шляхом поліциклотримеризації олігомерів ціанових естерів бісфенолів. ПЦ характеризуються унікальним комплексом фізико-хімічних властивостей: високою термо- і теплостійкістю, високою температурою склування ($T_{ск} > 250$ °C), вогнестійкістю, високою адгезією до різноманітних субстратів і т.і. [1]. Поліедральні олігомерні сілсесквіоксани (ПОСС) – це клас хімічних сполук емпіричної формули $[RSiO_{1.5}]_n$, до їх складу входить неорганічний сілсесквіоксаний каркас поліедральної будови $[SiO_{1.5}]_n$, а також однакові або різні периферійні замісники R , які можуть містити як реакційноздатні функціональні групи, так і нереакційноздатні групи [2].

Метою даної роботи є синтез і встановлення структури і властивостей термостійких плівкових наноккомпозитів на основі ПЦ, наповнених реакційноздатними ПОСС. Оскільки аміногрупи є дуже реакційноздатними по відношенню до ціанатних груп, то при змішуванні функціоналізованих ПОСС з ціанатом відбувається хімічна взаємодія між компонентами, внаслідок чого наночастинки вбудовуються у ПЦ сітку, що формується, що сприяє їх ефективному розподілу в структурі сформованої гібридної сітки складу ПЦ/аміно-ПОСС та посиленню комплексу фізико-хімічних властивостей.

Як мономер для синтезу ПЦ використовували 1,1-біс(4-ціанофеніл)етан (диціановий естер бісфенолу Е (ДЦБЕ, торгова марка PRIMASET® LECy, Lonza, Швейцарія). Як нанонаповнювач використовували аміноетиламінопропілізобутил ПОСС (АЕАПБ-ПОСС), N-феніламінопропіл ПОСС (НФАП-ПОСС) або амінопропілізобутил ПОСС (АПБ-ПОСС) компанії Hybrid Plastics Inc., США. Хімічні формули використаних сполук наведено на рисунку 1.1.

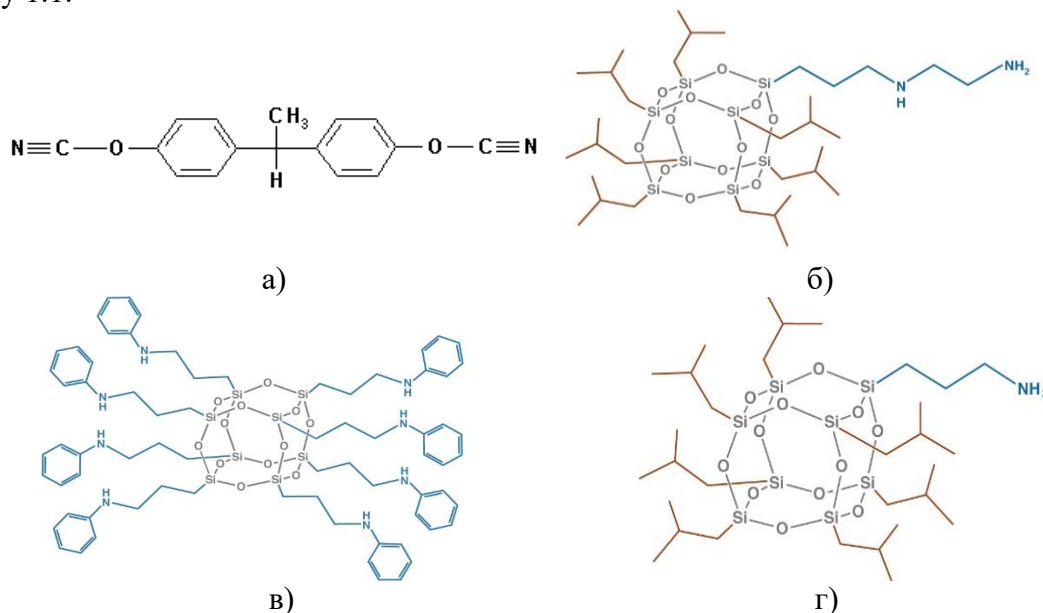


Рис. 1 Хімічні формули ДЦБЕ (а), АЕАПБ-ПОСС (б), НФАП-ПОСС (в) і АПБ-ПОСС (г)

Спочатку ДЦБЕ або суміші ДЦБЕ/аміно-ПОСС перемішували на високошвидкісній мішалці зі швидкістю 1300 об/хв протягом 2 год за $T=65$ °C для преполімеризації ДЦБЕ, а

також для диспергування і хімічного щеплення аміно-ПОСС шляхом реакції аміно-груп ПОСС з ціанатними групами ДЦБЕ. Після закінчення перемішування одержані наповнені преполімери охолоджували до $T=20\text{ }^{\circ}\text{C}$, відливали на скло, вкрите антиадгезивною плівкою із ПТФЕ, потім проводили тверднення преполімеру (у термошафі) при нагріванні зразків до $250\text{ }^{\circ}\text{C}$ зі швидкістю $0,5-1,0\text{ }^{\circ}\text{C/хв}$. Було синтезовано індивідуальний ПЦ та зразки нанокомпозитів складу ПЦ/аміноПОСС із вмістом нанонаповнювача $0,1\text{ мас.}\%$.

Стійкість до термічної деструкції досліджували методом ТГА (в атмосфері азоту) на обладнанні Setaram SETSYS Evolution 1750 Thermobalance у потоці аргону (20 мл/хв) та в інтервалі температур від $50\text{ }^{\circ}\text{C}$ до $650\text{ }^{\circ}\text{C}$ зі швидкістю нагрівання $20\text{ }^{\circ}\text{C/хв}$. Теплофізичні властивості синтезованих зразків вивчали методом диференційної сканувальної калориметрії (ДСК) з використанням калориметра Perkin Elmer DSC 8500 в атмосфері азоту в температурному діапазоні від $150\text{ }^{\circ}\text{C}$ до $320\text{ }^{\circ}\text{C}$ при швидкості нагрівання зразків $40\text{ }^{\circ}\text{C/хв}$. Дослідження мембранних властивостей зразків проводили шляхом визначення їх газопроникності при кімнатній температурі та тиску 3 бар в атмосфері гелію (He) і карбону діоксиду (CO_2). За результатами експериментальної роботи було визначено коефіцієнти проникності (P) та дифузії (D).

За даними ТГА встановлено (рис. 2), що термічна поведінка ПЦ/аміно-ПОСС нанокомпозитів не дуже суттєво змінюється залежно від типу застосованого нанокомпозиту, оскільки характер ТГА і ДТГ кривих (їх вигляд, кількість стадій тощо) близькі до індивідуального ПЦ. Знайдено, що всі досліджені зразки характеризуються наявністю двох стадій деструкції, проте основна стадія термодеструкції знаходиться в області температур $\sim 360-440\text{ }^{\circ}\text{C}$, яка є результатом руйнування вуглецевого скелету ПЦ-складової [1], коксовий залишок всіх зразків високий і складає $46-51\%$. Введення $0,1\text{ мас.}\%$ функціоналізованих аміно-ПОСС зумовлює підвищення термостійкості синтезованих нанокомпозитів порівняно з ненаповненою ПЦ-сіткою. Так, температура початку деструкції ($T_{\text{д поч}}$) зростає на $\approx 4-15\text{ }^{\circ}\text{C}$, а температура максимальної швидкості інтенсивної деструкції ($T_{\text{д max}}$) зсувається в сторону більш високих температур на $\approx 5-12\text{ }^{\circ}\text{C}$ залежно від активності наявних функціональних груп у ПОСС. Встановлено, що при вбудовуванні до структури ПЦ-сітки наночастинок NФАП-ПОСС, який містить вісім вторинних аміно-груп, спостерігається підвищення основних термічних характеристик лише на $4-5\text{ }^{\circ}\text{C}$ (порівняно з індивідуальним ПЦ), при вбудовуванні АПБ-ПОСС (з однією первинною аміно-групою) відповідні характеристики зростають вже на $5-10\text{ }^{\circ}\text{C}$, а найбільший ефект (зростання на $12-15\text{ }^{\circ}\text{C}$) спостерігається, коли в ПЦ-сітку вбудовані наночастинок АЕАПБ-ПОСС, що містять, одночасно, первинні і вторинні аміно-групи. Таким чином, стійкість до термічної деструкції нанокомпозитів ПЦ/аміно-ПОСС зростає в ряду, коли аміно-ПОСС містить вторинні < первинну < вторинну+первинну аміно-групи.

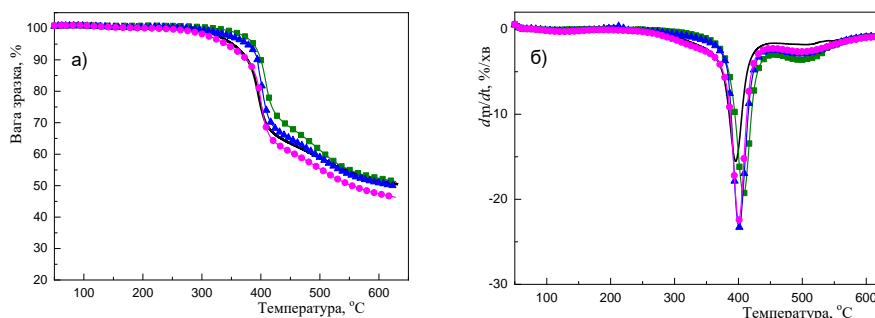


Рис. 2 ТГА криві (а) і відповідні їм ДТГ (б) криві для: ПЦ (—), ПЦ/НФАП-ПОСС (●), ПЦ/АПБ-ПОСС (▲) і ПЦ/АЕАПБ-ПОСС (■) нанокомпозитів

Методом ДСК визначено теплофізичні властивості досліджених зразків (рис. 3) і встановлено, що всі зразки є аморфними та мають високу температуру склування ($T_{\text{СК}}$), яка змінюється залежно від хімічної структури вбудованого до ПЦ-матриці аміно-ПОСС. Так,

було знайдено, що для індивідуального зразка ПЦ-сітки величина $T_{ск} = 214$ °С, у той час, як для зразків синтезованих наноккомпозитів величина $T_{ск}$ була вищою і складала: для ПЦ/АПБ-ПОСС $T_{ск} = 216$ °С, для ПЦ/НФАП-ПОСС $T_{ск} = 259$ °С, а для ПЦ/АЕАПБ-ПОСС $T_{ск} = 269$ °С. Зростання величини $T_{ск}$ у наноккомпозитах зумовлене пригніченням рухливості кінетичних сегментів ПЦ-сітки вбудованими молекулярними ґратками ПОСС.

Для синтезованих зразків були визначені також транспортні властивості, а саме

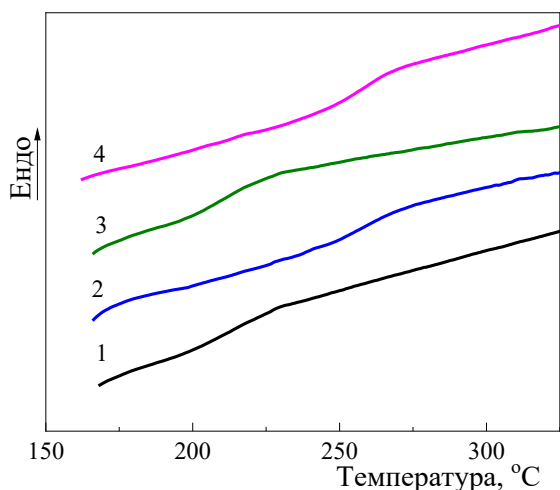


Рис. 3 ДСК термограми (2-й скан) зразків індивідуальної ПЦ-сітки (1) та наноккомпозитів складу ПЦ/НФАП-ПОСС (2), ПЦ/АПБ-ПОСС (3) і ПЦ/АЕАПБ-ПОСС (4)

газопроникність гелію і вуглекислого газу, а також коефіцієнт дифузії CO_2 (рис. 4). Знайдено, що проникність наноккомпозитів, а також коефіцієнт дифузії CO_2 , майже вдвічі вищі порівняно з індивідуальним ПЦ. Очевидно, що вбудовування наночастинок аміно-ПОСС зумовлює збільшення вільного об'єму у зразках наноккомпозитів, доступного для транспорту газів, що і збільшує газопроникність даних наноккомпозитів.

Таким чином, синтезовано та досліджено термічні і теплофізичні властивості, а також газопроникність термостійких наноккомпозитів складу ПЦ/НФАП-ПОСС, ПЦ/АПБ-ПОСС і ПЦ/АЕАПБ-ПОСС, що містять 0,1 мас.% аміно-ПОСС, і встановлено, що фізико-хімічні властивості ПЦ-вмісних наноккомпозитів можна контролювати змінювати та посилювати шляхом наповнення ПЦ-сітки екстра малим вмістом аміно-ПОСС з визначеними реакційно-здатними групами.

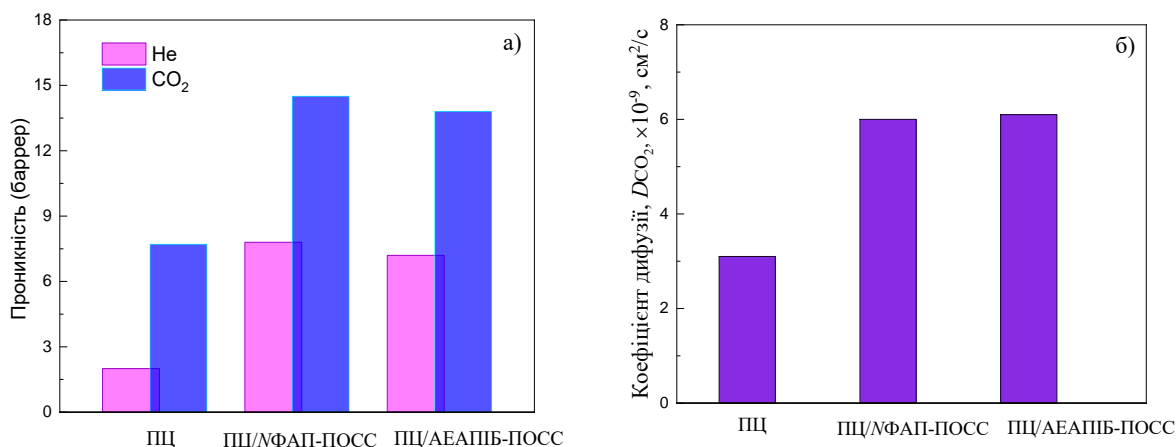


Рис. 4 Проникність (а) і коефіцієнт дифузії (б) зразків індивідуального ПЦ і ПЦ/аміно-ПОСС наноккомпозитів

Подяка. Автори вдячні за часткову фінансову підтримку даної роботи НАН України і CNRS (Франція) в рамках спільного проекту міжнародної асоційованої лабораторії (LIA) "Полінанопор".

1. Hamerton I. Chemistry and technology of cyanate ester resins / I. Hamerton (ed). – London: Chapman & Hall, 1994. – 357 p.
2. Kickelbick G. Concepts for incorporation of inorganic building blocks into organic polymers on a nanoscale // Progr. Polym. Sci. – 2003. – 28, No 1. – P. 83-114.

КІНЕТИКА ФОРМУВАННЯ ЦІАНОВОГО ЕСТЕРУ БІСФЕНОЛУ Е ЗА ПРИСУТНОСТІ БЕНЗОКСАЗИНУ З БІСФЕНОЛУ А

Старостенко О.М., Григор'єва О.П., Шутьженко Д.М., Файнлейб О.М.

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України, o_starostenko@ukr.net

Відомо, що термостійкі полімери широко використовуються в аерокосмічній галузі, мікроелектроніці та інших високотехнологічних галузях промисловості. До термостійких полімерів відносяться такі основні чотири групи полімерів, як поліціануратні сітки (ПС), отримані з ціанових естерів бісфенолів (ЦЕ), полібензоксазини (ПБОА), сітчасті полімери на основі бісмалеїмідів (БМІ) або бісфталонітрілів (БФН), які мають значно розширений температурний діапазон роботи, особливо за високих температур, та інший цінний комплекс властивостей, що дозволяє їх віднести до перспективних та інвестиційно привабливих полімерних матеріалів сьогодення. Натепер найменш дослідженими залишаються сітчасті полімерні матеріали, отримані на основі сумішей ціанових естерів бісфенолів та бензоксазинів (ЦЕ/БОА), оскільки за останні роки опубліковано лише декілька робіт, в яких досліджувались особливості їх синтезу, структура та властивості [1-3]. На даний момент немає однозначного розуміння хімічної структури цих матеріалів, а також не досліджено кінетику формування ЦЕ за присутності БОА.

У даній роботі кінетику реакції поліциклотримеризації індивідуального диціанового естеру бісфенолу Е (ДЦБЕ) (структурну формулу наведено на рис. 1а) та за присутності бензоксазину (БОА, рис. 1б), а також реакцію полімеризації БОА з розкриттям оксазинового циклу вивчали за допомогою методу ФТІЧ спектроскопії з використанням спектрометра Tensor 37 фірми Bruker в області частот (4000-600) cm^{-1} , для кожного спектру було усереднено 32 послідовні скани роздільної здатності 4 cm^{-1} .

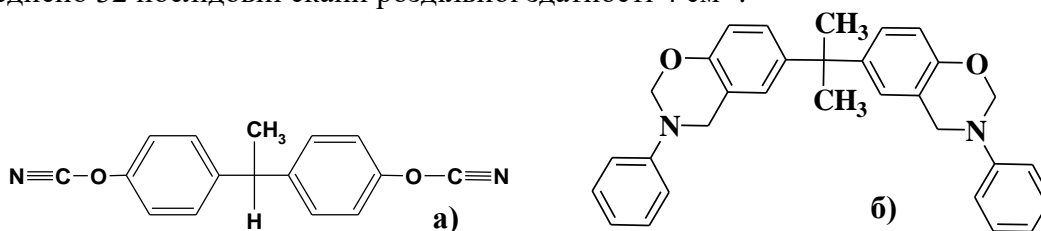


Рис.1 Структурні формули ДЦБЕ (а) і БОА (б)

ФТІЧ спектри зразків індивідуальних ДЦБЕ і БОА, та суміші ДЦБЕ/БОА=75/25 мас.% записували через певний проміжок часу впродовж їхнього ізотермічного нагрівання (на NaCl) за температури 100 °С впродовж 600 хв. Як внутрішній стандарт використовували смугу з максимумом при 1500 cm^{-1} , яка відповідає площинним коливанням С=С груп бензольних кілець. Конверсію ціанатних (–О–С≡N) груп ДЦБЕ визначали за зменшенням інтенсивності смуг поглинання в області 2266–2235 cm^{-1} (рис. 2а), а конверсію бензоксазинових циклів БОА – за зменшенням інтенсивності смуги поглинання за частоти 949 cm^{-1} , яка відповідає площинним деформаційним коливанням груп С–Н бензольного кільця, що біля оксазинового циклу (рис. 2б), використовуючи такі рівняння:

$$\alpha = \left(1 - \frac{I(t)_{2266-2235}/I(0)_{2266-2235}}{I(t)_{1500}/I(0)_{1500}}\right) \times 100 \text{ (для ДЦБЕ), або}$$
$$\alpha = \left(1 - \frac{I(t)_{949}/I(0)_{949}}{I(t)_{1500}/I(0)_{1500}}\right) \times 100 \text{ (для БОА)}$$

де для ДЦБЕ та ДЦБЕ у складі ДЦБЕ/БОА: $I(t)_{2266-2235}$ – інтенсивність смуг поглинання валентних коливань –О–С≡N груп в області частот 2266-2235 cm^{-1} у момент часу t ; $I(t)_{1500}$ – інтенсивність площинних коливань С=С груп з бензольних циклів при 1500 cm^{-1} у момент

часу t ; для БОА та БОА у складі ДЦБЕ/БОА: $I_{(t)949}$ – інтенсивність смуг поглинання площинних деформаційних коливань С–Н бензольного кільця, до якого приєднаний оксазиновий цикл у момент часу t ; $I_{(0)}$ – інтенсивність відповідних смуг поглинання у момент часу $t=0$.

На рис. 2 показано еволюцію у часі ФТІЧ-спектрів ДЦБЕ, БОА і ДЦБЕ/БОА у процесі їхнього нагрівання в ізотермічних умовах ($T = 100\text{ }^\circ\text{C}$). Встановлено, що для всіх досліджених зразків інтенсивність смуги-стандарту при 1500 cm^{-1} залишається незмінною під час усього експерименту. Визначено, що для зразків ДЦБЕ і ДЦБЕ/БОА інтенсивність смуг поглинання з максимумами при $2266\text{--}2235\text{ cm}^{-1}$, що відповідають валентним коливанням ОСN-груп (рис. 2а і 2в) зменшується з часом як для індивідуального ДЦБЕ, так і для ДЦБЕ у складі суміші. Одночасно з'являються і стають більш інтенсивними смуги $\nu_{\text{N-C-O}} \approx 1369\text{ cm}^{-1}$ і $\nu_{\text{C=N-C}} \approx 1568\text{ cm}^{-1}$, що підтверджує формування триазинових циклів поліціануратної сітки у процесі тверднення зразків ДЦБЕ і ДЦБЕ/БОА [4, 5]. Було встановлено також, що для зразка ДЦБЕ/БОА зниження інтенсивності смуг поглинання $\text{--O-C}\equiv\text{N}$ -груп при $2266\text{--}2235\text{ cm}^{-1}$ є значно більш стрімким порівняно з індивідуальним ДЦБЕ. Це, безсумнівно, свідчить про те, що у суміші ДЦБЕ/БОА пришвидшуються хімічні реакції, в яких приймають участь ціанатні групи ДЦБЕ. Можна зробити висновок також про певний каталітичний вплив бензоксазину на реакцію поліциклотримеризації ціанатних груп ДЦБЕ складової даної суміші.

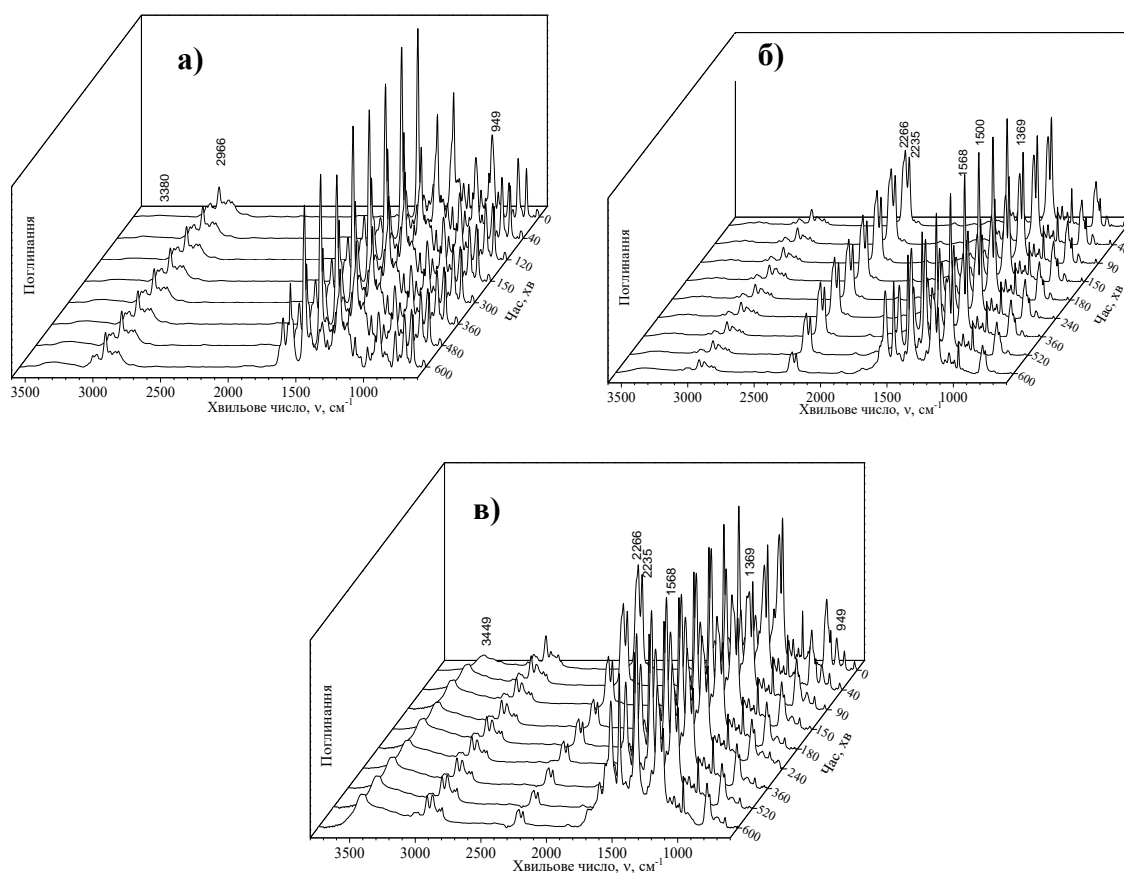


Рис. 2 Еволюція ФТІЧ спектрів індивідуальних ДЦБЕ (а) і БОА (б), а також у складі суміші ДЦБЕ/БОА (в) у часі при ізотермічному нагріванні зразків за $T = 100\text{ }^\circ\text{C}$

Відомо, що полімеризація БОА супроводжується зниженням інтенсивності смуги поглинання за частоти 949 cm^{-1} , яка відповідає площинним деформаційним коливанням С–Н бензольного кільця біля оксазинового циклу, і, одночасно, появою смуг поглинання ОН– та NH–груп в області $3650\text{--}3200\text{ cm}^{-1}$ [1-3]. Після повного розкриття бензоксазинового циклу у БОА смуга за частоти 949 cm^{-1} має зникнути. Еволюція спектрів у часі під час нагрівання

зразка індивідуального БОА показує незначні зміни інтенсивностей вищезазначених смуг поглинання (рис. 2б). Проте для БОА у складі суміші ДЦБЕ/БОА (рис. 2в) фіксується значне зменшення інтенсивності смуги поглинання за 949 см^{-1} та зростання інтенсивності смуг поглинання в області $3650\text{--}3140\text{ см}^{-1}$, де, як зазначалось вище, мають місце валентні коливання OH- та NH- груп, утворених після розкриття оксазинового циклу. Все це, вочевидь, свідчить про те, що у суміші ДЦБЕ/БОА процес розкриття оксазинового циклу БОА пришвидшується, і, як буде показано нижче, це відбувається за рахунок утворення імінокарбаматів при взаємодії ДЦБЕ з БОА за схемою, наведеною на рис. 3.

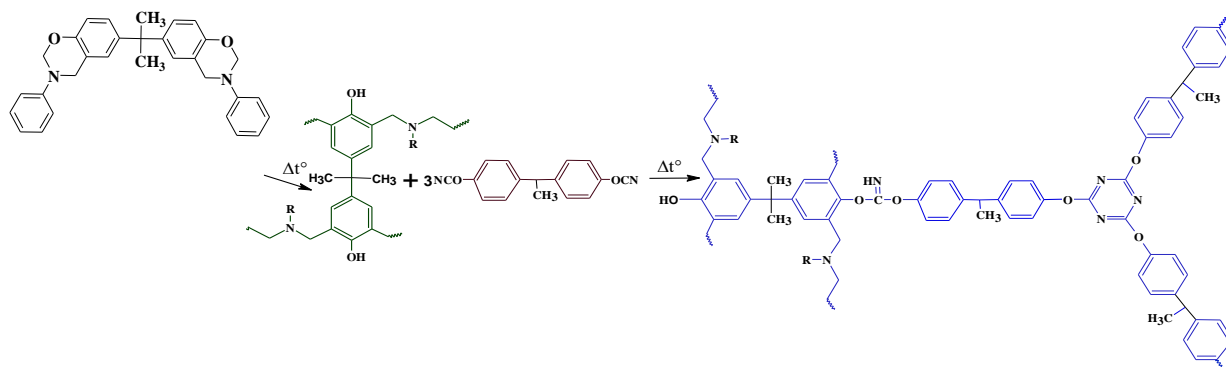


Рис. 3 Схема кополімеризації бензоксазину з ціановим естером

На рисунку 4 наведені кінетичні криві як функції часу конверсії ціанатних груп для зразків ДЦБЕ і ДЦБЕ/БОА (криві 1 і 2), а також конверсії бензоксазинових циклів для індивідуального БОА і ДЦБЕ/БОА (криві 3 і 4).

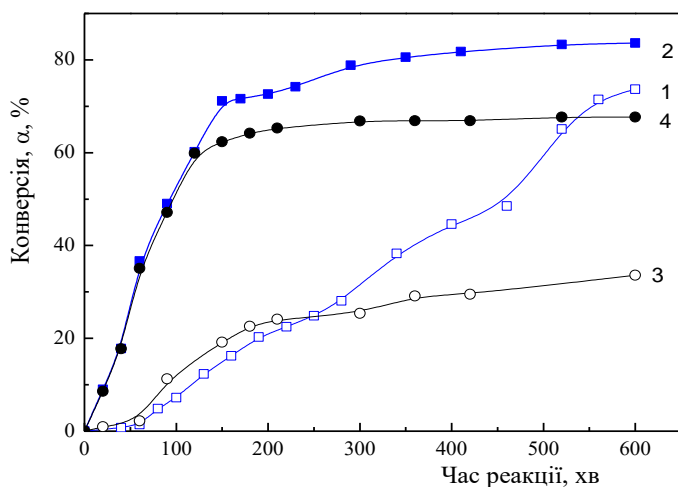


Рис. 4 Залежність конверсії від часу реакції для: ціанатних груп ДЦБЕ (1) і ДЦБЕ у суміші ДЦБЕ/БОА (2); бензоксазинових циклів БОА (3) і БОА у суміші ДЦБЕ/БОА (4)

індивідуального ДЦБЕ крива залежності $\alpha \approx f(\tau)$ (рис. 4, крива 1) має індукційний період близько $\tau \approx 50$ хв, після чого починається реакція поліциклотри-меризації ДЦБЕ спочатку повільно, а потім швидкість реакції зростає і залежність конверсії ціанатних груп від часу реакції стає, практично, прямолінійною та досягає значень $\alpha \approx 73\%$ при $\tau \approx 600$ хв. Кінетична крива конверсії ціанатних груп у суміші ДЦБЕ/БОА (рис. 4, крива 2) має зовсім інший вигляд, оскільки тут відсутній індукційний період, конверсія швидко зростає з перших хвилин реакції і набуває значень $\alpha \approx 71\%$ вже за $\tau \approx 150$ хв реакції, а при $\tau \approx 600$ хв величина $\alpha \approx 83,6\%$. Подібні залежності $\alpha \approx f(\tau)$ зафіксовано для БОА, як індивідуального, так і у складі

суміші ДЦБЕ/БОА (рис. 4, криві 3 і 4, відповідно). Так, для індивідуального БОА на кривій залежності $\alpha \approx f(\tau)$ також є індукційний період близько $\tau \approx 60$ хв, після чого повільно починається процес полімеризації БОА і при $\tau \approx 600$ хв величина $\alpha \approx 33,5\%$. Кінетична крива конверсії бензоксазинових циклів БОА у складі суміші ДЦБЕ/БОА (рис. 4, крива 4) має зовсім інший вигляд та за характером подібна до кривої $\alpha \approx f(\tau)$ для ДЦБЕ у складі суміші, оскільки на кривій 4 також відсутній індукційний період, конверсія швидко зростає з перших хвилин реакції і набуває значень $\alpha \approx 67,7\%$ при $\tau \approx 600$ хв.

Отже, можна зробити висновок, що як ДЦБЕ так і БОА мають взаємний каталітичний вплив на процеси їх полімеризації та кополімеризації за присутності один одного у суміші ДЦБЕ/БОА, оскільки за даними ФТІЧ-спектральних досліджень обидва компоненти системи суттєво прискорюють конверсію функціональних груп, ціанатних і бензоксазинових для ДЦБЕ і БОА, відповідно, вже на ранніх стадіях хімічних реакцій.

1. Santhosh Kumar K.S., Reghunadhan Nair C.P., Ninan K.N. Investigations on the cure chemistry and polymer properties of benzoxazine–cyanate ester blends // Eur. Polym. J. – 2009. – 45. – P. 494–502.

2. Zegaoui A., Derradji M., Medjahed A., Dayo A.Q., Dong W., Liu W.B., Cai W.A., Wang J., Liu Yu.G. Multifunctional polymer materials with enhanced mechanical, thermal and gamma radiation shielding properties from dicyanate ester of bisphenol-A/bisphenol-A based benzoxazine resin and short kevlar/basalt hybrid fibers // J. Polym. Res. – 2018. – 25. – P. 250 (1–13).

3. Ohashi S., Kilbane J., Heyl T., Ishida H. Synthesis and characterization of cyanate ester functional benzoxazine and its polymer // Macromolecules. – 2015. – 48. – P. 8412–8417.

4. Hamerton I. Chemistry and technology of cyanate ester resins. – Glasgow: Chapman & Hall, 1994. – 357 p.

5. Fainleib A. Thermostable polycyanurates: synthesis, modification, structure and properties. – New York: Nova Science Publishers, 2010. – 362 p.

ВИКОРИСТАННЯ N-(1-ФЕНІЛЕТИЛ)АМІДНОЇ ГРУПИ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ АБСОЛЮТНОЇ КОНФІГУРАЦІЇ ВНУТРІШНЬОХІРАЛЬНИХ КАЛІКСАРЕНІВ ЗА МЕТОДОМ МОШЕРА

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

Інститут органічної хімії НАН України, alexyespenko@gmail.com

Важливим етапом в дизайні внутрішньохіральних каліксаренів є визначення їх абсолютної конфігурації. В більшості випадків для цього енантіомерні форми переводять в діастереомерні, вирощують кристали і методом рентгеноструктурного аналізу за відомою конфігурацією хірального індуктора визначають реальний порядок розміщення замісників на макроциклічній платформі [1]. Але не завжди вдається одержати кристали. В таких випадках інколи конфігурацію можна визначити, порівнюючи ЯМР спектри нової речовини з хіральними сполуками відомої структури. В цьому плані для *n-трет*-бутил-калікс[4]аренів дуже зручними виявилися оптично чисті 1-фенілетиламіди каліксареноцтових кислот.

Детальний аналіз доступних з літератури рентгеноструктурних даних для 1-фенілетиламідів каліксареноцтових кислот показав, що для ди- та три-заміщених по нижньому вінцю *n-трет*-бутил-калікс[4]аренів завдяки внутрішньомолекулярним водневим зв'язкам амідна група зафіксована в просторі відносно каліксаренового макроциклу. Ланцюжок виділених атомів O-C(H₂)-C(=O)-N(H)-C(Me,Ph)-H (Рис. 1) лежить в одній площині, яка перпендикулярна до поверхні макроциклу, але трохи відхилена від вертикальної осі (Рис. 1б,г). Достатньо кислий водень біля азоту утворює зв'язок з сусідньою фенольною гідроксильною групою, в той час як карбонільна група вивернута назовні і не бере участь у зв'язуванні. Так само назовні направлений водень біля хірального вуглецю. Таким чином, у випадку *S*-форми аміду фенільна група завжди знаходиться справа, а метильна - зліва (Рис. 1а,б). Для *R*-форми аміногрупи розміщення замісників буде протилежне (Рис. 1в,г). Аналогічне розміщення амідного фрагменту спостерігається для тетразаміщених похідних, хоча зв'язування з фенольними оксигенами не відбувається.

Таким чином, залишок хірального фенілетиламіду, як аналог кислоти Мошера, може використовуватися для визначення абсолютної конфігурації внутрішньохірального каліксарену. Завдяки діаманітному ефекту бензольного ядра сигнали протонів зі сторони фенільної групи зміщуються в сильне поле.

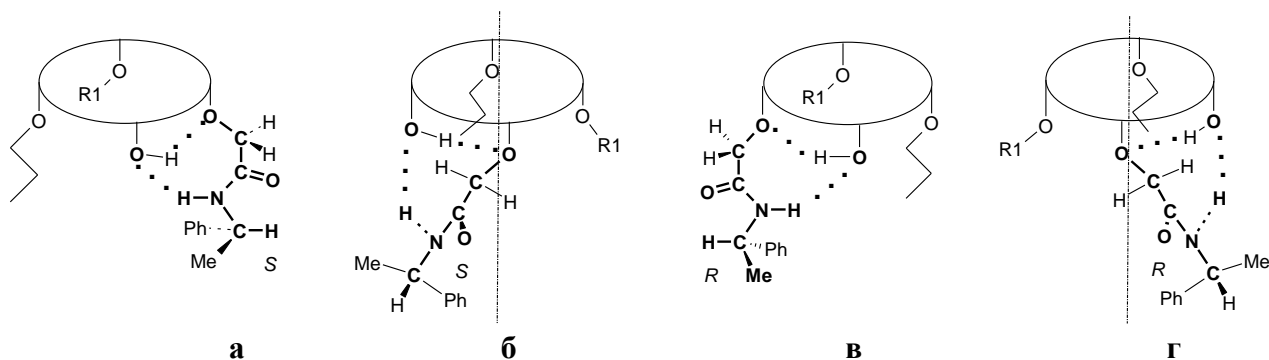


Рис. 1.

В той же час, сигнали протонів зі сторони метильної групи практично не зміщуються або трохи зміщуються в слабе поле. Порівнюючи спектри амідів зі спектрами сполук без амідної групи (наприклад, кислот або естерів) та знаючи конфігурацію хірального індуктора можна з великою вірогідністю визначити абсолютну конфігурацію каліксарену.

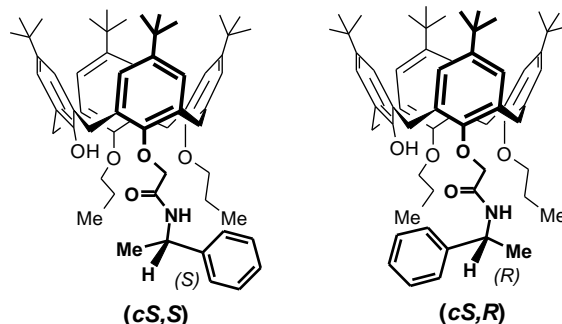
Наприклад, у випадку *S*-форми хірального індуктора сигнали пропільних метилів, які попадають в поле фенольного кільця, зсуваються в область 0.55 м.ч., в той час як у випадку *R*-форми сигнали даних метильних груп знаходяться в звичайній області 0.94-1.08 м.ч.

Вирішення задачі ще спрощується, якщо є можливість одержати обидва діастереомери з *S*- та *R*-формою амідної групи. В такому випадку слід використовувати алгоритм дій [1]:

- в обох діастереомерах визначити однакові протонні сигнали для замісників біля амідного фрагменту;
- розрахувати значення $\Delta\delta = \delta_S - \delta_R$ для таких сигналів;
- протони з позитивними значеннями будуть знаходитися з лівої сторони від амідного фрагменту, а з негативними значеннями - з правої сторони. При цьому абсолютні значення $\Delta\delta$ будуть пропорційними відстані від амідної групи.

Продемонструємо це на прикладі (*cS,S*)- та (*cS,R*)-амідів дипропоксикалікс[4]ареноцтової кислоти [2].

	(<i>cS,S</i>), δ_S	(<i>cS,R</i>), δ_R	$\Delta\delta = \delta_S - \delta_R$
CH_3^{Pr}	0.58 0.98	0.94 1.09	-0.36 -0.11
CH_2^{Pr}	1.82 1.82	1.95 2.11	-0.13 -0.29
OCH_2^{Pr}	3.81 3.81	3.89 4.02	-0.08 -0.21
ОН	5.75	5.66	0.09



Для сигналів протонів пропільних груп різниці $\Delta\delta$ мають негативні значення, що відповідає їх розміщенню з правої сторони від амідного фрагменту. В той же час, для гідроксильної групи різниця позитивна, і її слід розмістити зліва від амиду. Такий порядок розміщення функціональних груп на нижньому вінці каліксаренової платформи було підтверджено даними рентгеноструктурного аналізу.

Таким чином, *N*-(-1-фенілетил)аміди *p*-*tert*-бутил-калікс[4]ареноцтових кислот можуть успішно використовуватися для визначення абсолютної конфігурації внутрішньохіральних похідних методом Мошера.

1. Колодяжный О.И., Колодяжная А.О. Стереоселективный синтез фосфорорганических соединений. – К.: Наукова думка, 2017. – 342 с.

2. Karpus A.O., Yesypenko O.A., Andronov L.P., Boyko V.I., Garasevich S.G., Voitenko Z.V., Chernega A.N., Kalchenko V.I. Stereoselective synthesis of enantiomerically pure inherently chiral *p*-*tert*-butylcalix[4]arene carboxylic acids // Tetrahedron: Asymmetry. – 2012. – Vol. 23, № 17. – P.1243-1250.

2-(3-АРИЛ-1,2,4-ОКСАДІАЗОЛ-5-ІЛ)АЦЕТОНИТРИЛИ В РЕАКЦІЯХ 1,3-ДИПОЛЯРНОГО ЦИКЛОПРИЄДНАННЯ

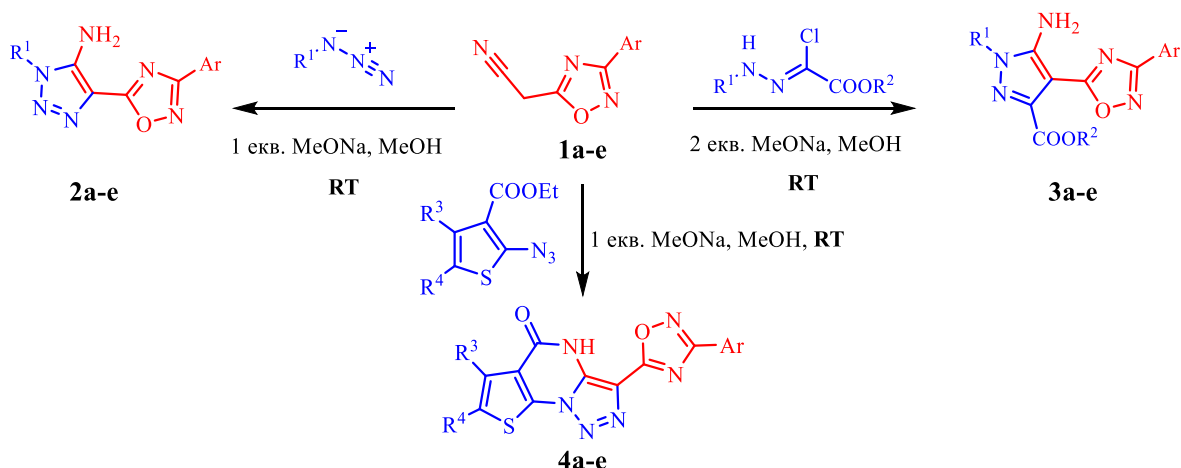
Тупичак М.А., Шийка О. Я., Походило Н.Т., Обушак М.Д.

Львівський національний університет імені Івана Франка, tupychakmykola@gmail.com

1,3-Диполярне циклоприєднання є одним з головних синтетичних інструментів для одержання широкого спектру п'ятичленних гетероциклів. Серед великого розмаїття реакцій [2+3]-циклоприєднання найбільш дослідженою є взаємодія органічних азидів з термінальними алкінами. Водночас, інші 1,3-диполярні реагенти, наприклад, нітрил-іміни, як і інші типи диполярофілів, такі як енаміни, еноли та метиленактивні нітрили залишаються вивченими недостатньо. Останні можуть бути використані як зручні партнери у реакції з 1,3-диполями, для введення в новий анельований гетероцикл аміногрупи. Крім того, перевагою таких реакцій є використання основ (зокрема органічних) в якості каталізатора, замість важких металів, що є більш екологічно дружнім підходом.

Похідні 1,2,4-оксадіазолу володіють широким спектром біологічної дії. З метою отримання нових 1,2,4-оксадіазолілвмісних гетероциклів, взаємодією ароматичних амідоксимів з 3-(3,5-диметил-1*H*-піразол-1-ілом)-3-оксопропанітритилом, нами було отримано з хорошими виходами 2-(3-арил-1,2,4-оксадіазол-5-іл)ацетонітрили **1a-e** та досліджено їх в реакції 1,3-диполярного циклоприєднання. Встановлено, що використання еквіваленту метилату натрію, як основи, в реакції **1a-e** з азидами призводить до швидкого утворення (час реакції 5-15 хв) 1,2,3-триазолів **2a-e** за кімнатної температури з високими виходами. Для розширення меж застосування реакції в якості 1,3-дипольних реагентів було застосовано нітриліміни, що утворюються *in situ* під дією основи на легкодоступні хлоргідразони. Взаємодія хлоргідразонів з нітрилами **1a-e** за присутності двох еквівалентів метилату натрію привела до утворення функціоналізованих піразолів **3a-e** протягом 5-15 хв з високим виходом та без побічних продуктів. Було встановлено, що заміна 1,3-дипольного реагенту не змінила напрямку реакції, і час реакції та вихід продуктів був співмірним [1]. На сьогодні ведуться дослідження застосування інших 1,3-диполів, зокрема, нітрил оксидів.

Наявність в отриманих внаслідок реакції азолів у 5 положенні активної аміногрупи робить їх зручними прекурсорами для подальших модифікацій. Зокрема, ми виявили, що використання тієнілазидів, що містять в *орто*-положенні до азидної естерну групу приводить до подальшої спонтанної доміно циклізації з утворенням поліциклічних продуктів **4a-e**.



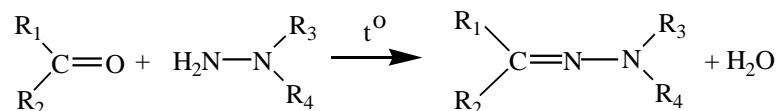
1. Tupychak M.A., Shyyka O.Ya., Pokhodylo N.T., Obushak M.D. Nitrileimines as an alternative to azides in base-mediated click [3+2]cycloaddition with methylene active nitriles // RSC Adv. – 2020. – 10, № 23. – P. 13696 - 13699.

НОВІ ГІДРАЗОНИ І СЕМІКАРБАЗОНИ НА ОСНОВІ АРИЛЬНИХ ПОХІДНИХ ВАНІЛІНУ ЯК ПОТЕНЦІЙНІ БІОЛОГІЧНО АКТИВНІ РЕЧОВИНИ

Шулятицький І.В., Листван В.В.

Житомирський державний університет імені Івана Франка

Конденсація карбонільних сполук з моно- та дизаміщеними гідразинами призводить до утворення гідразонів.

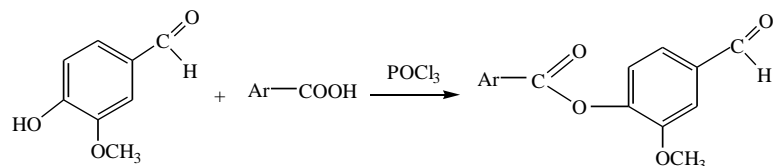


Гідразиди кислот, інакше – ацилгідрозини, завдяки наявній активній групі NH₂ також можуть реагувати з карбонільними сполуками з утворенням ацилгідрозонів – сполук, що містять подвійний зв'язок C=N. Аналогічна реакція з семі- та тіосемікарбазидами дає змогу отримувати відповідно семі- та тіосемікарбазони.

Гідразони, семікарбазони та азометини як біологічно активні речовини широко використовують в медицині. Так наприклад фтивазид та солютизон використовують для лікування туберкульозу, похідні 5-нітрофурфуралу (фурацилін, фуразолідон, ніфуроксазид тощо) мають антибактеріальні, протизапальні та протигрибкові властивості. Фенілгідразони виявляють активність щодо стафілококу, кишкової палички та інших збудників інфекційних хвороб.

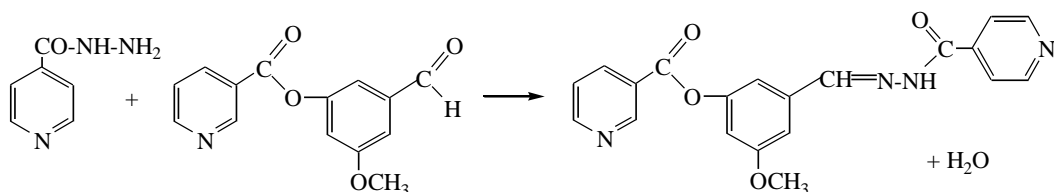
Проведені нами нещодавно дослідження вказують також на перспективність вивчення антиоксидантної активності сполук з подвійним зв'язком C=N. З'ясувалось, зокрема, що деякі тіосемікарбазони знебарвлюють розчин дифенілпікрилгідрозилу (DRPH-тест) вже при досить малих концентраціях. З метою розширення дослідження у даному напрямку ми одержали низку нових альдегідів – арилзаміщених похідних ваніліну, які використали для отримання на їх основі гідразонів і семікарбазонів.

Ацилювання ваніліну арил- та гетарилкарбоновими кислотами відбувається легко в присутності POCl₃.



Зокрема взаємодія з ніотиною кислотою дає 3-метокси-4-ніотиноїлоксibenз-альдегід.

Отримані альдегіди легко взаємодіють з гідразинами і гідразидами, утворюючи кристалічні похідні – гідразони. Так, наприклад, згаданий альдегід взаємодіє з ізоніотиноїлгідрозидом (ізоніазидом), утворюючи похідну, яка поєднує ваніліновий фрагмент і залишки ніотинової та ізоніотинової кислоти, що може бути цікавим з точки зору дослідження її біологічної активності.



ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНІ ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНІ РЕЧОВИНИ НА ОСНОВІ ІМІДАЗОЛУ І ТРІАЛКІЛАМОНІЮ - ЕФЕКТИВНІ СИСТЕМИ ДЛЯ РОЗЩЕПЛЕННЯ ТОКСИЧНИХ ЕФІРІВ КИСЛОТ ФОСФОРУ ТА СІРКИ

Шумейко О.Є.^{1,2}, Бураков М.І.¹

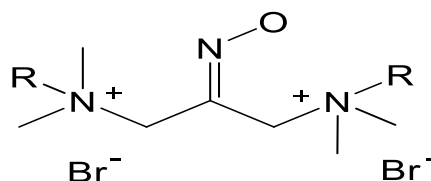
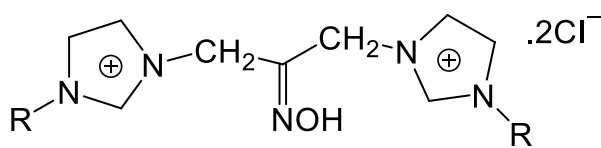
¹Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАН України

²Інститут органічної хімії НАН України

ashumeiko@ukr.net

Функціоналізація молекул поверхнево-активних речовин (ПАР) реакційно здатними фрагментами дозволяє створювати унікальні ензімоподібні реагенти, в дії яких поєднується кілька різних за своєю природою факторів (концентрування реагентів, зміна характеру мікрооточення), що забезпечують істотну зміну швидкостей хімічних реакцій.

Розроблено методи синтезу нових димеризованих ПАР на основі імідазолу і тріалкіламонію, що варіюються довжиною алкільного замісника і функціоналізовані оксимним фрагментом



$R = CH_3, C_{12}H_{25}, C_{14}H_{29}, C_{16}H_{33}$

Цей метод заснований на попередньому отриманні 1,3-дихлорацетоксиму, з подальшим алкілюванням відповідних алкілімідазолів, а також взаємодією 1-хлорацетоксиму з диметиламіном і подальшим алкілюванням отриманого продукту додецилбромідом. Розроблено методи синтезу трьох класів ПАР - мономерних і димеризованих катіонних, функціональних і детергентів з реакційно здатним протиіоном.

При використанні такого підходу шляхом введення в молекулу ПАР ковалентно зв'язаного оксимного фрагменту, який виявляє аномально високу реакційну здатність в процесах перенесення ацильної групи, були отримані ефективні системи для розщеплення токсичних ефірів кислот фосфору та сірки [1,2].

1. Шумейко А., Кострикин М., Капитанов И., Сердюк А., Бураков Н., Попов А. Синтез функціоналізованих оксимними групами ПАВ на основі імідазола, пиридина и алкіламінов // Укр. хім. журн. - 2019. – 85, № 8. – С. 59-70.

2. Капитанов И., Сердюк А., Шумейко А., Прокопьева Т., Попов А. Кислотно-основные свойства функціоналізованих ПАВ в мицеллярных системах // Укр. хім. журн. - 2017. – 83, № 8. - С. 94 – 102.

СИНТЕЗ ПОХІДНИХ ПІРОЛО[2,3-*d*]ПІРИМІДИН-6-КАРБОНОВОЇ КИСЛОТИ

Яремчук І.О., Вервес Є.В.

Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря НАН України, smolii@bpci.kiev.ua

Природні сполуки та їх структурні аналоги відіграють важливу роль у процесі відкриття та розробки лікарських засобів. Перелік препаратів, створених на основі натуральних продуктів або їх похідних і аналогів включає близько 50% всіх відомих на сьогодні ліків [1]. Наприклад, алкалоїди пурину - *caffeine*, *theobromine* і *theophylline*, які в значних кількостях містяться в листі чаю та насінні кавового дерева, здатні стимулювати центральну нервову систему, є інгібіторами фосфодіестерази, а також слабкими не селективними антагоністами аденозинових рецепторів. За хімічною будовою ці сполуки близькі до речовин, котрі трапляється в живому організмі – ксантину та сечової кислоти, що пояснює, до певної міри, широкий спектр їх біологічної дії, малу токсичність та відсутність накопичення при тривалому вживанні.

На даний час розроблено ряд препаратів, похідних ксантину, для лікування нейродегенеративних захворювань. Зокрема, *istradefilin*, селективний антагоніст аденозинового рецептора $A2_A$, нещодавно схвалений FDA USA та застосовується в терапії хвороби Паркінсона [2] (рис. 1).

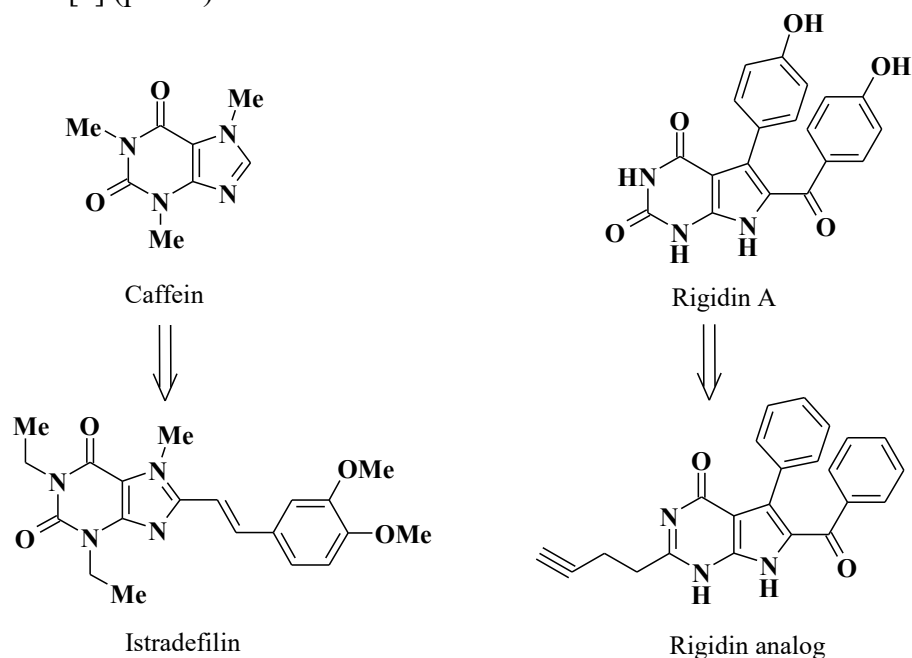
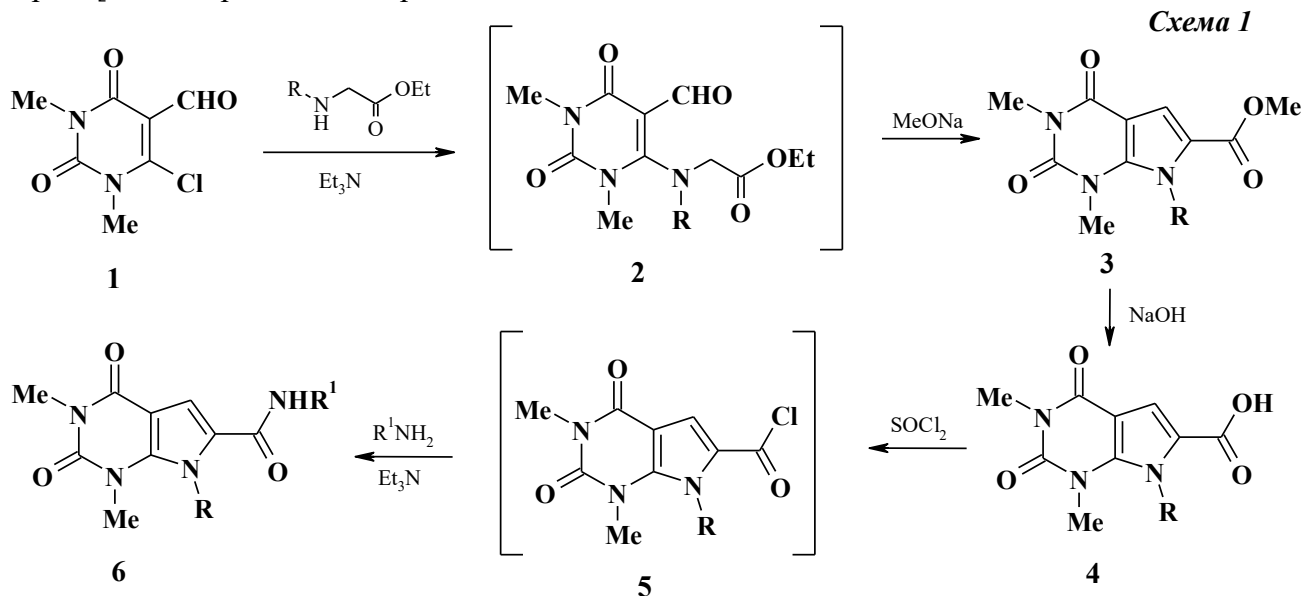


Рис.1. Алкалоїди та їх структурні аналоги

Ще одним джерелом для отримання потенційних лікарських засобів є морські алкалоїди групи *rigidine*, виділені з *Eudistoma cf. rigida*, котрі належать до похідних піроло[2,3-*d*]піримідину (7-деазаксантину). Синтезовані структурні аналоги рідідину проявляють виражені цитотоксичні властивості та здатні в наномолярних концентраціях вбивати ракові клітини [3,4] (рис.1).

Метою нашого дослідження був синтез нових похідних 7- деазаксантину, що містять карбоксильну групу в положенні 6 гетероциклічної системи. Для отримання піроло[2,3-*d*]піримідин-6-карбоних кислот ми використали відомий підхід, що ґрунтується на добудові пірольного кільця до піримідинової основи [5]. Вихідними сполуками були обрані 5-форміл-6-хлор-1,3-диметурацил, отриманий в умовах реакції Вільсмаєра з 1,3-диметилбарбітурової кислоти та естери *N*-алкілгліцину синтезовані по методиці [6]. Заміну атома хлору в альдегіді **1** на залишок етилового естера *N*-алкілгліцину проводили в бензолі в присутності триетиламіну (схема 1). Проміжні продукти **2** без додаткової очистки обробляли

метилатом натрію в абсолютному метанолі та отримали сполуки **3** з виходом 65-80%. При порівнянні спектрів ЯМР ^1H вихідного альдегіду **1** і синтезованих піроло[2,3-*d*]піримідинів **3** спостерігали зникнення сигналу протона альдегідної групи в області 8.5 м.ч. та появу сигналу в області 7.25-7.30 м.ч., що свідчить про формування пірольного кільця. Слід зазначити, що перетворення **1**→**3** супроводжується реакцією переестерифікації, котра каталізується метилатом натрію. Лужний гідроліз естерів **3** приводить до цільових сполук – піроло[2,3-*d*]піримідин-6-карбонових кислот **4**.



Наявність карбоксильної групи в молекулі піроло[2,3-*d*]піримідину відкриває можливість для створення хімічних бібліотек різних класів сполук, в першу чергу амідів. Нами було встановлено, що піроло[2,3-*d*]піримідин-6-карбонові кислоти **4** при обробці хлористим тіонілом в безводному бензолі здатні утворювати хлорангідриди кислот **5**, котрі при взаємодії з амінами в присутності триетиламіну утворюють відповідні амідів **6**. Структура синтезованих сполук підтверджена за допомогою ЯМР ^1H , ^{13}C спектроскопії, а також результатами елементного аналізу.

1. Newman D.J. Natural products as sources of new drugs from 1981 to 2014 / D.J. Newman, G.M. Cragg // *J. Nat. Prod.* – 2016 – 79. – 3. – P. 629–661.

2. Chen J.F. The belated US FDA approval of the adenosine A_{2A} receptor antagonist istradefylline for treatment of Parkinson's disease / J.F. Chen, R.A. Cunha // *Purinergic Signal.* – 2020. – 2. – P. 167-174.

3. Frolova L.V. Exploring natural product chemistry and biology with multicomponent Reactions. 5. Discovery of a Novel Tubulin-Targeting Scaffold Derived from the Rigidin family of marine alkaloids / L.V. Frolova, I.V. Magedov, A.E. Romero, et.al. // *J. Med. Chem.* – 2013. – 56. – 17. – P. 6886–6900.

4. Dasari R. Microtubule-Targeting 7-Deazahypoxanthines Derived from Marine Alkaloid Rigidins: Exploration of the N3 and N9 Positions and Interaction with Multi-Drug Resistance Proteins/ R. Dasari, A. Błaż, D. Medellin, et.al. // *Chem. Med. Chem.* – 2019. – 14. – P. 1-13.

5. Senda S. Pyrimidine derivatives and related compounds. XXIV. Synthesis of N-substituted 6-formyl-2,4-dioxo-1,2,3,4-tetrahydropyrrolo[2,3-*d*]pyrimidine derivatives and related compounds / S. Senda, K. Hirota // *Chem. Pharm. Bull.* – 1974. – 22. – 12. – P. 2921-2928.

Speziale A.J. N-substituted glycinate and alaninate esters / A.J. Speziale, E.G. Jaworski // *J. Org. Chem.* – 1960. – 25. – 5. – P. 728-732.

**АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ
ХІМІЧНОЇ ОСВІТИ**

ПРОЄКТНА ТЕХНОЛОГІЯ НАВЧАННЯ ХІМІЇ ЯК ВАЖЛИВА СКЛАДОВА НАВЧАЛЬНО-ПІЗНАВАЛЬНОЇ ДІЯЛЬНОСТІ ЗДОБУВАЧІВ ОСВІТИ

Авдєєва О.Ю.

Житомирський державний університет імені Івана Франка, avdeeva8909@gmail.com

З огляду на запровадження можливості дистанційної форми здобуття освіти, використання позакласної роботи з хімії є не лише вкрай необхідною умовою успішної реалізації освітнього процесу в закладі загальної середньої освіти, а й вимогою часу. Так, сучасна програма з хімії як державний стандарт передбачає дотримання вимог до якості освіти, зокрема, обов'язкову організацію і проведення не лише демонстрацій, лабораторних дослідів і практичних робіт, а й домашнього експерименту, створення учнями навчальних проєктів та віртуальних екскурсій [2]. Таким чином, альтернативою традиційним методам навчання стає використання проєктної технології у позакласній діяльності учнів як інтерактивної технології навчання, яка збагачує та поєднує в собі їх теоретичні знання й практичну діяльність. Адже, поетапне проведення домашнього експерименту, створення навчальних проєктів, електронних презентацій, кіберколекцій, віртуальних екскурсій передбачає формування експериментальних умінь учнів та практичне втілення їх теоретичних знань у ході позакласної діяльності.

Аналізуючи навчальні програми з хімії для учнів 7-9 [2] та 10-11 класів рівня стандарту [3], а також профільного рівня [4] з'ясовано, що в кожній темі обов'язковим є створення навчальних проєктів. Орієнтовані теми проєктних завдань наведені у програмах рівня стандарту у такій кількості: 7 клас (13 проєктів), 8 клас (9 проєктів), 9 клас (23 проєкти), 10 клас (31 проєкт) та 11 клас (16 проєктів). Презентування їх результатів можливе як в урочний, так і в позаурочний час. У свою чергу, в навчальній програмі з хімії профільного рівня орієнтовані теми проєктних завдань у такій кількості: 10 клас (26 проєктів), 11 клас (34 проєкти).

Як зазначає Н. М. Загнибіда, «одним із кращих прикладів формування та розвитку життєвих компетентностей учнів є проєктна методика. Саме цей метод стимулює природну допитливість та творчий потенціал» [1].

Таким чином, проєктну технологію навчання хімії ми розглядаємо як особистісно зорієнтовану інноваційну освітню технологію, яка спрямована на організацію навчально-пізнавальної діяльності здобувачів освіти, розвиток їх мислення, творчості, самостійності, активності, креативності, винахідливості, життєвих компетентностей та стимулювання інтересу до здобуття нових знань та необхідних умінь.

Нами досліджено, що проєктна технологія навчання збільшує ефективність та якість результатів навчання й здобувачів вищої освіти. Обов'язковою умовою реалізації проєктної технології майбутнім учителем хімії є використання у практичній діяльності набутих знань, умінь, навичок та формування первинного професійного досвіду ще в стінах закладу вищої освіти.

У своєму дослідженні Н. І. Шиян стверджує, що проєктна технологія навчання є «особистісно орієнтованою педагогічною технологією, в основі якої лежить розвиток пізнавальної активності, унікальності та самобутності кожного студента, його критичного і творчого мислення, пізнавальної самостійності, наполегливості, творчості, спрямованості на кінцевий результат, уміння самостійно конструювати свої знання й орієнтуватися в інформаційному просторі, що дає змогу кожному студентові будувати власну освітню траєкторію» [5].

Так, на лабораторних заняттях із освітньої компоненти «Організація дослідної та проєктної діяльності учнів із хімії» майбутні вчителі готувалися та створювали навчальні проєкти з подальшою презентацією власних результатів дослідження. Під час виконання проєктного завдання здобувачі вищої освіти навчилися формулювати мету, гіпотезу, завдання дослідження, здійснювати пошук та обробку необхідної інформації, планували етапи експериментальної роботи, опанували вміннями аналізувати результати діяльності та

презентувати їх, формулювали мотивовані висновки. Це дозволяє студентам позбутися формалізму знань, шаблонності дій, забезпечує розвиток творчості через активну, самостійну діяльність кожного.

Вибір тематики проектних завдань здобувачі вищої освіти здійснювали самостійно. Найпоширенішими серед них були: «Природні індикатори», «Виявлення крохмалю у продуктах харчування», «Вирощування кристалів солей», «Виготовлення мила власними руками», «Дослідження харчових продуктів», «Хімічні речовини у побуті», «Хімія навколо нас», «Хімія-чарівниця», «Каталізатори в домашніх умовах» тощо.

Таким чином, майбутній учитель хімії набуває готовності до ролі організатора та керівника проектної діяльності учнів із оволодіння ними як теоретичними знаннями з хімії, так і практичними вміннями та навичками. Така діяльність учителя полягає в допомозі з вибором теми дослідження, його плануванням, висуненням гіпотези, підбором реагентів і посуду, консультування і спрямування учнів на досягнення результатів дослідження та їх пояснення.

На нашу думку, проектна технологія навчання хімії має такі переваги:

- вимагає пошуку та застосування нових знань, спираючись на попередні;
- сприяє тісному поєднанню теорії та практики;
- розвиває творчі здібності та логічне мислення;
- виробляє вміння спостерігати, аналізувати, досліджувати та узагальнювати;
- розвиває гностичні вміння експериментально-дослідницького характеру;
- привчає до планування свого дослідження;
- виробляє вміння діяти і приймати самостійні рішення;
- формує бажання і здатність самостійно вчитися.

Отже, одним із основних завдань сучасного освітнього простору є раціональне впровадження проектної технології навчання хімії, спрямованої на розвиток логічного мислення, творчих здібностей та ґрунтовної експериментально-методичної підготовки майбутніх учителів хімії задля перенесення набутих ними способів діяльності в подальшу практику майбутньої професії, ефективного забезпечення успішної навчально-пізнавальної діяльності здобувачів освіти, розвитку їх гностичних та експериментальних умінь.

1. Загнибіда Н. М. Метод проектів на уроках хімії. – Тернопіль – Харків: ранок, 2011. – 128 с.
2. Навчальна програма для загальноосвітніх навчальних закладів. Хімія. 7-9 класи (зі змінами, затвердженими наказом МОН України № 804 від 07.06.2017 р.): [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <http://mon.gov.ua/activity/education/zagalna-serednya/navchalni-programy.html>
3. Навчальна програма для закладів загальної середньої освіти. Хімія. 10-11 класи. Рівень стандарту (зі змінами, затвердженими наказом МОН України № 1407 від 23.10.2017 р.): [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://mon.gov.ua/ua/osvita/zagalna-serednya-osvita/navchalni-programi/navchalni-programi-dlya-10-11-klasiv>
4. Навчальна програма для закладів загальної середньої освіти. Хімія. 10-11 класи. Профільний рівень (зі змінами, затвердженими наказом МОН України № 1407 від 23.10.2017 р.): [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://mon.gov.ua/ua/osvita/zagalna-serednya-osvita/navchalni-programi/navchalni-programi-dlya-10-11-klasiv>
5. Шиян Н. І. Формування дослідницьких умінь майбутнього вчителя хімії засобами проектної технології / Н. І. Шиян // Гуманізація навчально-виховного процесу. – Слов'янськ – 2011. – Вип. LVII. – С. 102–111.

СПОСОБИ ДОБУВАННЯ ГАЗІВ. ВИЗНАЧЕННЯ ГУСТИНИ ТА МОЛЯРНОЇ МАСИ ГАЗІВ

Алексеева О.О., Євдоченко О.С.

Житомирський державний університет ім.І.Франка, olya.alekseeva2002@gmail.com

У хімічних лабораторіях часто доводиться мати справу з газами. Тому необхідно вміти отримувати, зберігати, вимірювати, правильно осушувати та очищати їх. Методи добування газів існують різні, в залежності від хімічних властивостей газів та необхідної кількості добування. Так, наприклад, невеликі об'єми газів можна отримувати розкладом твердих речовин (CO_2 – шляхом розкладу кальцій карбонату, N_2 – шляхом розкладу амоній нітриту або амоній дихромату, NO_2 – розкладом нітратів). Гази можна отримувати дією рідин (найчастіше це кислоти) на тверді реагенти та взаємодією двох рідин. Для добування газів у відносно великих кількостях часто застосовують апарат Кіппа, якщо газів необхідні в невеликих кількостях, то використовують міні апарати Кір'юшкіна, або збирають установки для добування газів.

Найчастіше на практиці використовують такі газів: гідроген сульфід, карбон (IV) оксид, хлор, водень, кисень. Всі способи добування газів умовно поділяють на хімічні, термічні та електрохімічні.

Наведемо приклади добування газів шляхом дії рідкої речовини та твердий реагент (Таблиця 1)

Таблиця 1

Отримання газів хімічною взаємодією твердого та рідкого реагентів [1]

Газ	Твердий реагент	Рідкий реагент
Водень H_2	Цинк гранульований	Розчин HCl (20 %) або H_2SO_4 (15 %)
	Алюміній (фольга, дріт)	Розчин KOH (20 %)
Карбон (IV) оксид CO_2	Мрамур (подрібнені шматки) CaCO_3	Розчин HCl (20 %)
Гідроген сульфід H_2S	Ферум (II) сульфід (шматки, гранули) FeS	Розчин HCl (15 %)
	Кальцій сульфід (шматки, гранули) CaS	Розчин HCl (10 %)
Хлор Cl_2	Хлорне вапно (гранули) Ca(OCl)_2 (вміст 35 %)	Розчин HCl (20 %)
	Манган (IV) оксид (порошок, гранули) MnO_2	Розчин HCl (36 %)
	Калій перманганат (кристали) KMnO_4	Розчин HCl (36 %)
Кисень O_2	Манган (IV) оксид (порошок, гранули) MnO_2	Суміш розчинів 1 л 3 %-вий H_2O_2 та 150 мл 96 %-ва H_2SO_4
	Хлорне вапно (гранули) Ca(OCl)_2 (вміст 35 %)	Суміш розчинів 1 л 3 %-вий H_2O_2 та 150 мл 36 %-ва HCl
Ацетилен H_2C_2	Кальцій карбід (шматки, гранули) CaC_2	Вода H_2O

Для добування карбон (IV) оксиду, водню, гідроген сульфід часто використовують апарат Кіппа (рис.1 А) та апарати Кір'юшкіна (рис.1 Б), збирають крапельні конструкції (рис.1 В) [1].

Перед використанням газу його очищують від домішок механічним способом та хімічними реагентами. В залежності від природи осушувачів, сушіння може бути сухе та мокре. Для сухого очищення переважно використовують хлоркальцієві трубки (прямі та U-подібні), колонки Фрезеніуса, фільтруючі лійки Шотта. Осушувач ретельно підбирається в залежності від хімічних властивостей газу. Наприклад, фосфор (V) оксид не використовують для осушення аміаку, галогенів та галогеноводнів, адже він взаємодіє з ними. В якості

рідкого осушувача часто використовують концентровану сульфатну кислоту, але її не слід використовувати для осушування від вологи аміак, галогеноводні, гідроген сульфід, нітроген (II та IV) оксиди, ацетилен.

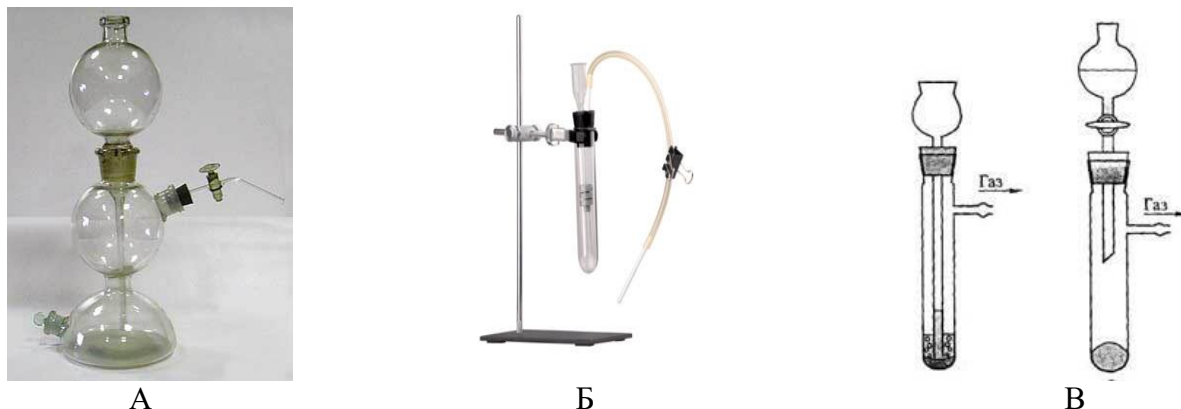
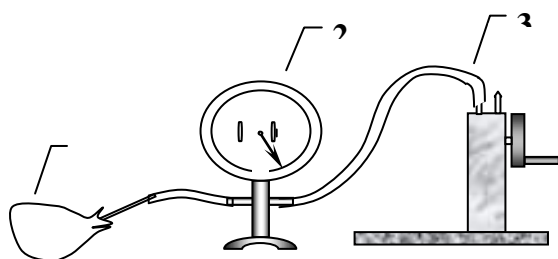


Рис. 1. Апарати для добування газів

Важливими для лабораторних досліджень є вимірювання тиску, густини та визначення витрат газів. У нашому дослідженні ми експериментально визначали густину повітря та молекулярну масу шляхом його відкачування. Для цього використовували зібрану із посудини з газом, манометра та вакуумного насоса (Рис. 2).



1. Посудина з газом
2. Манометр
3. Вакуумний насос

Рис. 2. Пристрій для відкачування газу

Визначили масу колби (m_1) із повітрям (за атмосферного тиску), за допомогою насоса відкачали повітря з колби, зафіксували показники манометра та занесли значення до лабораторного журналу (ціна поділки $1 \text{ кгс/см}^2 = 98,06 \text{ кПа}$). Мас колби з розрідженим повітрям – m_2 , зафіксували температуру в лабораторії, за якої проводили експеримент (T).

Молярну масу повітря визначали за формулою: $M = \frac{m'_1 - m'_2}{P} \frac{RT}{V}$. Використовуючи значення

молярної маси за формулою: $\rho = \frac{PM}{RT}$ обчислили для кожного дослідження густину ρ повітря.

Результати вимірювань та обчислень занесли до звітної таблиці.

За формулою:
$$M = \frac{1}{\frac{m_1}{m} \frac{1}{M_1} + \frac{m_2}{m} \frac{1}{M_2} + \dots + \frac{m_n}{m} \frac{1}{M_n}}$$

обчислили M повітря, взявши до уваги процентний вміст газів, які входять до його складу. Порівняли всі отримані результати молярної маси повітря та розрахували похибку результатів вимірювань [2].

№дослідю	m ₁ , г	m ₂ , г	m ₁ -m ₂ , г	M, г/моль	ρ, г/см ³
1	109,66	109,63	0,2	7,6	0,00025
2	109,66	109,61	0,3	14,6	0,00042
3	109,66	109,59	0,4	23,7	0,00059
4	109,66	109,57	0,5	36,9	0,00076
5	109,66	109,54	0,6	59,7	0,001

Похибку визначили за формулою:

$$\delta = \frac{28,5 - 29}{29} \times 100\% = -1,73\%$$

Отже, в лабораторії шляхом відкачування насосом газу та провівши певні розрахунки можна визначити молярну масу газу та його густину. При використанні цих даних необхідно враховувати похибку вимірювань.

1. Техніка хімічного експерименту [Електронний ресурс]: підручник для студ. спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія», спеціалізації «Електрохімічні технології неорганічних і органічних матеріалів» О. В. Косогін, О. В. Лінючева, Ю. С. Мірошниченко; КПІ ім. Ігоря Сікорського. Електронні текстові дані. – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2019. – 387с.

2. Камінський О.М., Чумак В.В., Чайка М.В. Фізична хімія / Практикум – для студентів II курсу напрямку підготовки 102 «Хімія» – Житомир: Вид-во ЖДУ ім. І. Франка, 2019. – 174 с.

ГЕЙМІФІКАЦІЯ: ЩО ЧЕКАЄ ХІМІЧНУ ОСВІТУ ДАЛІ?

Анічкіна О.В.

Житомирський державний університет імені Івана Франка, eva_kvitka@meta.ua

Еволюція дистанційного навчання в світі протягом чотирьох останніх десятиліть пройшла знакові етапи. Початком дистанційного навчання стало електронне навчання (e-learning) в 80-х – 90-х роках минулого століття, в двохтисячних воно трансформувалося в змішане навчання (blended learning), а в наступному десятилітті йому на заміну прийшло мобільне навчання (m-learning). До 2020 року ми жили в еру всеохоплюючого навчання (ubiquitous learning), а наступним етапом розвитку дистанційного навчання стане реалізація розумного навчання (Smart-освіта).

Розвиток дистанційного навчання відбувався достатньо стрімко в світі, але дуже помірковано в Україні. Тому умови довготривалого карантину стали потужним еволюційним чинником оновлення сучасної української освіти, й зокрема, природничої. Адже в світі найбільше суперечок точиться саме навколо того чи можна вивчати природничі науки, зокрема хімію, широко використовуючи засоби електронного навчання. Хімік, який не працював у лабораторії ніколи не досягне успіхів у творенні науки. З такими твердженнями погоджуються ті, хто працює в царині творення або викладання хімії як предмету закладу загальної середньої освіти або навчальної дисципліни закладу вищої освіти. Але виникли сучасні реальні умови в яких українська середня та вища школи мають забезпечити викладання хімії на високому рівні не залежно від обставин.

Виникає потреба створення високоякісних електронних засобів навчання хімії, оскільки дистанційне навчання потребує специфічних засобів, а оприлюднення теоретичних

матеріалів, електронних копій підручників є надзвичайно примітивним, часозатратним, неефективним і нецікавим способом оволодіння яскравою та ефектною наукою – хімією.

Найближчим часом освіта радикально зміниться. Цьому сприяють і умови карантину, який віддалив осіб, які навчаються від закладів освіти; стрімкий розвиток девайсів, який забезпечує їх проникнення в усі форми життя людини – за 2020-ті роки кількість ІТ-пристроїв на планеті зросте вдвічі, досягне кількості 50 млрд. та перевищить населення планети в 5-6 разів. Тобто кожна людина буде в середньому володіти 5-6 девайсами з доступом до інтернет-мережі. На початку 2021 року 75% населення Землі володіють хоч б одним смартфоном. Тобто, експансія девайсів стане запорукою їх широкого використання не тільки в повсякденному житті, а й в освітньому процесі на кожному рівні освіти. Слід зазначити, що розробка електронних підручників і посібників, віртуальних лабораторій, демонстраційних матеріалів відеоекспериментів, довідників, задачників вивчена докладно, а сучасні умови проведення навчальних занять вже потребують їх системного та ефективного використання, натомість процес розробки навчально-ігрових і дозвільних електронних навчальних засобів із хімії в літературі неописаний взагалі.

Слід зазначити, що дидактичні ігри в вивченні хімії є достатньо розповсюдженими: кросворди, ребуси, доміно, лото, вікторини, конкурси, турніри, змагання, квести, диспути, конференції та безліч інших. Вони можуть бути предметними (розміщеними на паперових носіях або використовувати реальні предмети) так і комп'ютерні (віртуальні, створені за допомогою графіки та анімації).

Процес використання елементів гри для мотивування, організації та реалізації навчального процесу сьогодні прийнято називати гейміфікацією, а навчання, яке реалізується виключно через досягнення мети, завдань і результатів гри в світі називають *game-based learning*.

Гейміфікація, як процес використання ігрових елементів та ігрових механік у неігровому контексті [1] має значні можливості для навчання, а характер хімічної науки, її різнобарвність, можливість перетворень, змін агрегатних станів, виникнення нових речовин із різноманітними властивостями, які можна довести відкриває перед гейміфікованим навчанням нові горизонти.

Основними проблемами використання віртуальних лабораторій в навчальному процесі є достатньо низький рівень графіки та анімації, який не передбачає деталізації. Особливого значення набуває якість зображення для осіб, які розпочинають ознайомлення з хімічними речовинами, посудом, хімічними реакціями, оскільки від правильності формування уявлень пам'яті про фізичні властивості та зовнішній вигляд речовин залежить успішність в упізнаванні та розпізнаванні їх в реальних умовах хімічної лабораторії. Більшість віртуальних лабораторій мають недостатньо якісне відтворення забарвлення речовин, відсутнє зображення особливостей зовнішнього вигляду речовин (драглистий, кристалічний осад, гомо- та гетерогенні системи тощо), а саме ці знання становлять основу аналітичних умінь розпізнавати речовини.

Кількість дій та операцій хімічного експерименту в таких симуляторах дуже обмежена та визначена програмою, яка, як правило, відслідковує кількість дій, спроб, досягнення мети, натомість не відслідковує правильність виконання дій та їх послідовностей, що є особливо важливим для хімічної науки. Також відсутня можливість альтернативи, що унеможливує формування здатності вільно оперувати речовинами, самостійно обирати шляхи розв'язку завдань. Посуд і обладнання, які використані в таких лабораторіях, мають достатньо схематичне анімаційне зображення значно відмінне від реального. Загалом використання таких лабораторій є можливим і доцільним для відпрацювання загальних умінь проте, зовнішній вигляд таких лабораторій не сприяє зацікавленню до вивчення хімії, формує переконання в застарілості науки.

Вирішенням такої проблеми може стати створення дидактичної комп'ютерної мережевої гри, але такий процес є надзвичайно складним і багатоетапним. Розробка будь-якої комп'ютерної гри потребує значних ресурсів і людських, і фінансових, але використання

таких ігор в освітньому процесі сьогодні, в епоху розвитку комп'ютерної техніки та дистанціювання здобувачів від закладу освіти, має значні суттєві переваги.

Комбінація освіти та розваг у сучасному світі має назву «Edutainment» - комбінація двох слів «освіта» (education) та «розваги» (entertainment). Це сучасна концепція заохочення до освітнього процесу через зацікавлення учасників до навчання через розваги. При цьому науковці досі сперечаються «Edutainment» це «навчальні розваги» (educational entertainment) чи «розважальне навчання» (entertainment education). Тому сьогодні ми говоримо не про включення елементарних дидактичних електронних ігор в навчальний процес, а про трансформацію змісту навчального предмету в зміст повноцінної комп'ютерної гри, яка дозволить не лише здобувати знання, формувати уявлення про експериментальні вміння, а й забезпечить формування здатності працювати у команді, прагнення до перемоги, інтерактивність навчання (формування soft skills). Така гра зможе допомогти в формуванні необхідних умінь життєзабезпечення людини в сучасних умовах, розширить межі знання не лише тих, хто хоче та повинен вчити хімію, а збагатить розуміння правил поведінки з хімічними речовинами будь-якої людини, яка захоче грати.

Таким чином, використання мережевої комп'ютерної гри на основі хімічних знань дозволить вивчати властивостей окремих речовин і процеси цікаво, актуально, достатньо наочно, активно, спільно, інтенсивно, з орієнтацією на розвиток, організовуючи вільний час із користю. А використання сучасних мережевих комп'ютерних ігор у освітньому процесі закладів освіти, зокрема при вивченні хімії, має значні перспективи розвитку як в Україні, так і в світі, тому подальшим завданням вбачаємо реалізацію такої гри та дослідження її впливу на успішність вивчення хімії.

1. Werbach, K., Hunter, D. For the Win, Revised and Updated Edition: The Power of Gamification and Game Thinking in Business, Education, Government, and Social Impact. Pennsylvania: Wharton school press. – 2020.

ПИТАННЯ ВИБОРУ СТУДЕНТАМИ ХІМІЧНИХ ДИСЦИПЛІН

Антрапцева Н.М.¹, Біла Г.М.²

¹Національний університет біоресурсів і природокористування України

²Національний університет харчових технологій, Bilagalina2017@gmail.com

Сьогодні диктує студентам нові виклики і пропозиції щодо вибору хімічних дисциплін при здобутті першого рівня вищої освіти. Так у Національному університеті харчових технологій для бакалаврів спеціальності 161 “Хімічні технології та інженерія” за освітньо-професійною програмою “Хімічна технологія” передбачено вивчення 16 навчальних хімічних дисциплін, серед яких чотири обов’язкових та дванадцять вибіркових.

Предметом вивчення однієї з вибіркових навчальної дисципліни “Комп’ютерні розрахунки в хімічній технології” є розрахункові задачі хімічної технології, які потребують застосування сучасних комп’ютерних засобів, класи програмних систем, що можуть бути застосовані для розробки моделей та розрахунку хіміко-технологічних процесів та хіміко-технологічних систем.

Отримані навички комп’ютерних розрахунків з використанням прикладних математичних програм студенти використовують при виконанні теоретичних завдань, лабораторних і курсових робіт, різних інженерних і наукових розрахунків, а також під час науково-дослідної роботи та при підготовці магістерських кваліфікаційних робіт.

Метою викладання навчальної дисципліни “Комп’ютерні розрахунки в хімічній технології” є формування знань, умінь та навичок роботи з пакетами прикладних програм Excel, MathCad і MathLab, моделюючим комплексом ChemLab, призначених для математичних обчислень і візуалізації числових даних, а також для вирішення задач аналізу

та синтезу хіміко-технологічних систем при проектуванні та управлінні складними хіміко-технологічними комплексами.

Основними завданнями при вивченні дисципліни “Комп’ютерні розрахунки в хімічній технології” є ознайомлення студентів із принципами, можливостями, особливостями сучасних засобів комп’ютерної математики, поглиблення знань з основних розділів вищої математики, здобуття навичок розв’язання задач лінійної алгебри, аналітичної геометрії, математичного аналізу з використанням прикладних програм Excel, MathCad і MathLab; формування уявлень про сучасні можливості комп’ютерного моделювання та навичок самостійного проведення теоретичних і експериментальних досліджень з використанням сучасних комп’ютерних технологій.

З метою кращого засвоєння теоретичних основ дисципліни використовують різні наочні посібники, технічні засоби навчання, комп’ютерну техніку, а саме презентації, виконані із застосуванням програми PowerPoint та електронні освітні ресурси в мережі Internet тощо.

Лабораторні роботи студенти виконують при вивченні відповідної теми, що сприяє кращому засвоєнню теоретичного матеріалу і дає можливість студентам познайомитися з роботою в математичних, інженерних програмних середовищах та навчитися самостійно виконувати необхідні розрахунки.

Увесь курс розділено на два змістових модулі кожен з яких включає три теми. Перша тема «Вступ до дисципліни. Особливості використання пакету Microsoft Excel 2007» знайомить студентів із базовими функціями пакету. Під час виконання лабораторної роботи з цієї теми студент має можливість розв’язати хімічну задачу, використовуючи саме цей продукт і самостійно зробити висновок про переваги і недоліки різних версій програми Excel для рішення власної задачі, а також про точність і достовірність одержаних результатів.

Друга лабораторна робота «Розв’язування типових задач хімії та аналізу в середовищі пакету Mathcad» за темою «Особливості використання математичного пакету MathCad та його функціональні можливості» передбачає не просто вивчення її та використання для розв’язку задачі, але у висновках студент має змогу порівняти як переваги самої програми MathCad у різних її версіях, так і зробити порівняльний аналіз із уже вивченими версіями Excel. Таким чином, одержаний результат розв’язку хімічної задачі привчає студента не тільки проводити звичайні розрахунки за допомогою програмного забезпечення, але і самостійно робити порівняльний аналіз та вибір найбільш коректного програмного пакету, враховуючи також суть і фізико-хімічні властивості технологічного процесу, які відбуваються на базі хімічних реакцій.

Третя тема «Обробка експериментальних даних в середовищі пакету Excel і MathCad та побудова графіків» є підсумковою і дозволяє пропонувати студентам нові, цікаві задачі, які можуть бути частиною їхньої наукової роботи, курсової чи бакалаврської роботи, або частиною магістерської роботи. Саме у третій лабораторній роботі студент має змогу не тільки одержати числовий результат, але і зобразити його наочно, у вигляді графіка. Безпосереднє графічне представлення результату досить часто є наглядним і показовим результатом самої експериментальної частини роботи, що дозволяє зробити висновки і про хід проходження хімічного процесу чи хімічної реакції. Висновки у третій лабораторній роботі є більш повними, проаналізованими та ґрунтовнішими оскільки базуються на знаннях та практичних навичках одержаних при виконанні попередніх лабораторних робіт.

Такий комплексний підхід до вивчення дисципліни «Комп’ютерні розрахунки в хімічній технології» відкриває нові можливості у вивченні сучасного програмного забезпечення та вмінні проводити аналіз і вибір необхідного програмного продукту для правильної обробки результатів експериментальних досліджень. Відкриваються здібності студента вчитися, аналізувати та робити правильні висновки щодо розумного і якісного вибору того чи іншого програмного забезпечення.

Отже, питання вибору студентами дисциплін хімічного спрямування є однією із необхідних умов одержання комплексних і ґрунтовних знань.

СУБЛІМАЦІЯ ТА ЇЇ ВИКОРИСТАННЯ В ХІМІЧНОМУ ЕКСПЕРИМЕНТІ

Барашивець І.С., Євдоченко О.С.

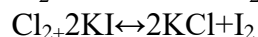
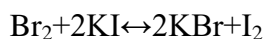
Житомирський державний університет імені Івана Франка, irabarashivets1202@gmail.com

На сьогоднішній день використання сублімації є досить поширеним методом очищення твердих речовин, який конкурує з перегонкою, висушуванням та іншими методами. Адже знання методики виконання та застосування її на практиці є необхідними для вирішення практичних питань при роботі фахівців.

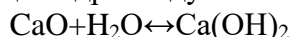
Сублімація – це процес переходу твердих речовин в газоподібний стан без плавлення, минаючи рідку фазу, а десублімацією – процес кристалізації твердої фази з пари, минаючи рідкий стан. Даним методом очищають кристалічний йод, бензойну та щавлеву кислоти, алізарин та багато інших речовин. Природними сублімаційно-десублімаційними процесами є утворення газових гідратів, десублімація водяної пари в атмосфері. Сублімації піддається лід (кристалізована вода), широкого застосування набуло сублімаційне сушіння (ліофілізація) – це процес видалення розчинника з заморожених розчинів, гелів, суспензій і біологічних об'єктів, заснованих на сублімації льоду. Сублімацію використовують в хімічній промисловості при виробництві вибухонебезпечних речовин, а також у харчовій промисловості при виготовленні розчинної кави із замороженого кавового екстракту шляхом зневоднення у вакуумі.

Відомо, що від чистоти реактивів залежить правильність результатів та якість проведеного експерименту. Одним із важливих у хімічному експерименті та аналізі є метод очищення твердих органічних та неорганічних речовин від смольних сумішей та нелетких домішок шляхом сублімації. Возгонку проводять за атмосферного тиску, у вакуумі, в потоках інертного газу (N₂, CO₂ та ін.) За атмосферного тиску можна сублімувати йод, розглянемо даний процес детальніше.

Кристалічний йод часто містить вологу, домішки хлору та бромиду. Для очищення йоду масою 5-6 грамів ретельно розтираємо його у фарфоровій ступці з невеликою кількістю (0,2-0,3 грам) йодиду калію і оксиду кальцію. Домішки бромиду та хлориду будуть вступати у взаємодію з калій йодидом:



Внаслідок реакції утворюються нелеткі сполуки – бромід та хлорид калію. З оксидом кальцію реагує вода з утворенням кальцій гідроксиду:



Подрібнений йод обережно поміщаємо в термостійкий стакан, на який ставимо круглодонну колбу, заповнену на 1/3 холодною водою, стакан нагріваємо на електророзпалювальній або піщаній бані. Йод сублімує з виділенням фіолетових парів та осідає у вигляді кристалів на холодному дні колби, здійснюючи процес десублімації, а нелеткі домішки – кальцій гідроксид, бромід та хлорид калію залишаються на дні стакана. Через деякий час, коли на дні стакану не залишається йоду, даємо стакану повністю охолонути. Якщо йод має бути особливої чистоти, можна провести повторну сублімацію. Очищений йод збираємо у бюкс з пришліфованою кришкою та зберігаємо в ексікаторі.

Сублімацією можна очищувати багато речовин, при роботі з невеликою кількістю речовин роботу здійснюють використовуючи лабораторний мікросубліматор. Проводячи очищення речовин даним методом слід враховувати той факт, що підвищення температури призводить до прискорення процесу сублімації, але в результаті цього утворюються дрібнокристалічні та менш очищені кристали речовини.

Таким чином, використання методу сублімації та десублімації є досить важливим в техніці хімічного експерименту та інших галузях хімії, хімічній та харчовій промисловості.

1. Косогін О.В., Лінючева О.В., Мірошніченко Ю.С. Техніка хімічного експерименту 2019. –192–193с.

2. Жаровський Ф.Г., Пилипенко А.Т., П'ятницький І.В. Аналітична хімія.–1982. – 450с.

ПОРІВНЯЛЬНИЙ АНАЛІЗ ІНТЕРАКТИВНИХ-ОНЛАЙН ПЕРІОДИЧНИХ ТАБЛИЦЬ ХІМІЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ

Бардадим О. В.

Черкаський національний університет ім.Б.Хмельницького, bardadym_oleh@ukr.net

Майбутні вчителі природничих наук повинні активно застосовувати на своїх уроках інтерактивні дошки. За допомогою веб-сайтів, учні легше засвоюють новий матеріал в ігровій та інтерактивній формі. Яскравим прикладом для цього є веб-періодична таблиця хімічних елементів, яка собою являє інтерактивний-онлайн інтернет-ресурс, що відображає періодичну таблицю в цифровому вигляді із гіперпосиланнями на різні матеріали і представлена у довгій формі. Відмінність від класичного варіанту полягає в тому, що: інформація (текстова, графічна) про хімічний елемент міститься у вигляді гіперпосилання. З педагогічної точки зору позитивним аспектом слід вважати, що в інтерактивній-онлайн таблиці інформацію зібрано в одному середовищі та є можливість її використовувати в інтерактивній формі для того, щоб зацікавити учнів (наприклад, демонструвати зв'язок хімії з життям; візуально представити вигляд простих речовин; використовувати відео про хімічні елементи та про хімічні реакції).

В таблиці 1 для майбутніх вчителів предметників(хімія) наведений порівняльний аналіз інтерактивних-онлайн періодичних таблиць хімічних елементів.

Таблиця 1

Порівняльний аналіз інтерактивних-онлайн періодичних таблиць хімічних елементів

№	Ресурс	Переваги
1	https://twitter.com/chemistry_easyl/status/903485386206330880	Гарна палітра кольорів; двомовність хімічних елементів; вказано ступінь окиснення кожного хімічного елемента; представлено класифікацію на металічні, напівметалічні та неметалічні хімічні елементи; логічно розміщені позначки про радіоактивність та атомний радіус, електронегативність.
2	http://www.rsc.org/periodic-table)	Сортування хімічних елементів за допомогою спеціальних клавiш на: групами, періодами, поділ за енергетичними підрівнями (s,p,d,f); існує можливість класифікації на металічні та неметалічні хімічні елементи; використання позначки «температура» для того, продемонструвати в якому агрегатному стані перебувають речовини; за допомогою спеціальної клавiши можна дізнатися про застосування хімічних елементів; про кожен елемент при швидкому перегляді містить інформацію про: порядковий номер, атомну масу, про густину; існує версія як: веб так і мобільний додаток.
3	http://ed.ted.com/periodic-videos	Містить спеціальні команди для класифікації хімічних елементів на: металічні, неметалічні, лужні, лужноземельні, напівметали, інертні гази хімічні елементи; кожен елемент містить посилання на відео про певний хімічний елемент.
4	http://elements.wlonk.com/ElementUses.htm	Відображено у графічному вигляді інформацію про застосування хімічних елементів; містить спеціальні «іконки» для асоціації з певними хімічними елементами.

5	https://research.google.com/bigpicture/elements/	Застосування хімічних елементів у навколишньому середовищі відображено у вигляді діаграм.
6	http://www.periodictable.com	Відображає хімічні елементи у вигляді їх простих речовин з невеликими фактами .
7	https://ptable.com/#	Містить відомості про хімічні елементи: температуру, агрегатний стан, про будову атома(заповнення електронів по підрівням), сполуки, які може утворювати той чи інший хімічний елемент з іншими елементами.
8	https://www.msichicago.org/play/goreact/	Містить інформацію про ступінь окиснення, про поширення хімічних елементів, моделювання певних реакцій.
9	https://www.seilnacht.com/Lexikon/psval.htm	Реальний вигляд відображення хімічних елементів, заповнення електронними комірками.
10	https://science.widener.edu/svb/tutorial/ptable.html http://www.ilpi.com/genchem/periodicquiz.html	Дозволяє попрактикуватися пошуку елементів у періодичній таблиці хімічних елементів.
11	https://mooc.lektorium.tv/courses/course-v1:cpm+cpm_chem1+2016_10/1b1ce71f19984779a03e49ca03b40748/	Інформація про енергію, температуру, ізотопи, густину та інші довідникові значення про хімічні елементи.
12	http://www.dreamwv.com/primer/page/s_pertab.html [13]	
13	https://www.scientificamerican.com/article/chemistry-the-elements-revealed-interactive-periodic-table/ [14]	Містять інформацію про: історію хімічного елемента, поділ на металічні та неметалічні хімічні елементи, цікаві факти, історію відкриття, фізичні дані про елементи, агрегатний стан.
14	https://inl.gov/periodic-table/	
15	http://www.chemicalelements.com/elements/li.html	
16	https://www.webelements.com/	
17	https://www.corrosionsource.com/FreeContent/1/Periodic%20Table	

Отже, використовуючи інтерактивну Періодичну систему хімічних елементів майбутні вчителі повинні вміти застосувати інтернет-ресурси для навчальних цілей та допомагати учням в ігровій та інтерактивні формі засвоювати теоретичний матеріал. Також в ігровій формі вчитель повинен за допомогою онлайн-таблиць сформувавши уявлення учням про: хімічний елемент; класифікацію елементів; поділ на енергетичні підрівні; агрегатний стан елемента; радіоактивність; ступінь окиснення та поширення хімічних елементів; сполуки, які може утворювати той чи інший хімічний елемент з іншими елементами; моделювання певних хімічних реакцій та інше. Сам же вчитель формує компетентність використання онлайн-ресурсів для освітньої мети.

ВСЕУКРАЇНСЬКИЙ ОСВІТНІЙ ПРОЕКТ НЦ «МАНУ» ТА КОРПОРАЦІЇ DOW «ПОЛІМЕРИ ТА ЕКОЛОГІЯ»:

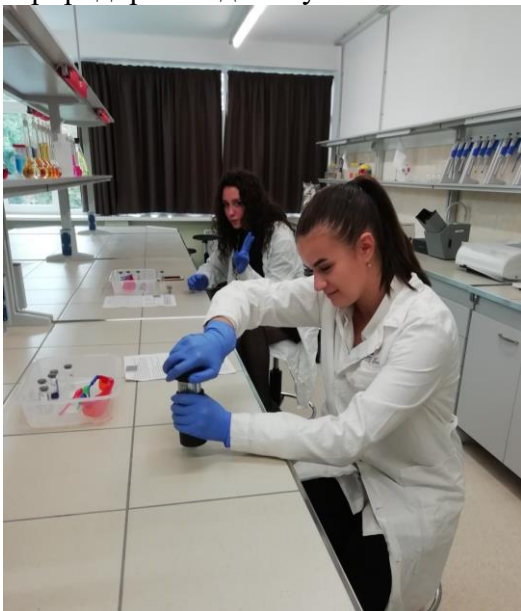
ЯК ЗРОБИТИ НАУКУ ПРО ПОЛІМЕРИ ДОСТУПНІШОЮ ДЛЯ ШКОЛЯРІВ

Бей І.М.^{1,2}, Толстов О.Л.^{1,2}, Буткевич А.М.¹, Хлюпа І.О.¹, Пещеріна Т.В.¹

¹Національний центр «Мала академія наук України»

²Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України, a.tolstov@ukr.net

Важко уявити сучасний світ без полімерних виробів. Від пакування, одягу, будівельних та оздоблювальних матеріалів, до високотехнологічних приладів та гаджетів – полімери зустрічаються нам щодня на кожному кроці. І хоча високомолекулярні речовини, як їх «лагідно» називають вчені, не є виключно винаходом людства, саме синтетичні полімери, створені людиною, забезпечили не лише зростання комфорту нашого повсякденного життя та стрімкий розвиток сучасних технологій, але й перетворилися на непомітну на перший погляд, проте одну з найбільших загроз для довкілля. Мова йде про відходи полімерного виробництва та виробів, що вийшли з ужитку, до яких природа просто не встигла адаптуватися і відпрацювати механізми їх утилізації. За даними центру глобальних досліджень, щороку кількість полімерних відходів збільшується на близько 275 млн.т [1], що в природі розкладатимуться століттями, отруюючи довкілля.



Вивчення властивостей полімерів.

Заняття в лабораторії «Ex Lab» НЦ «МАНУ»

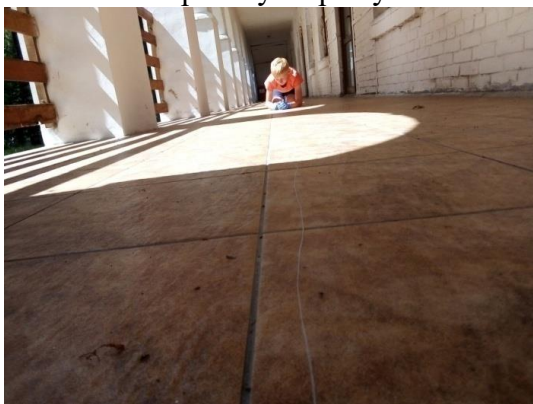
На сьогодні перед людством стоїть нелегка задача правильно розставити розділові знаки щодо полімерів у виразі «виробляти неможливо відмовитись» як у всім добре відомій з дитинства казці. Звісно, в першу чергу пересічним громадянам на думку спадає погодитись з екоактивістами, які закликають до повної відмови від виробництва та використання синтетичних полімерних матеріалів. Проте для людей більш глибоко знайомих з даною проблемою це рішення не видається шляхом до спасіння планети. Заміна синтетичних матеріалів на природні, для створення яких потрібне залучення ресурсів (родючих ґрунтів, води), призначених для виробництва продуктів харчування, створює додатковий їхній дефіцит та може обернутися для людства та планети ще більшою катастрофою. Не варто забувати що майже 1 млрд людей страждає від хронічного голоду, який спричиняє загибель майже

10 млн. людей щороку. Найбільш раціональним виходом з даної ситуації є поглиблення досліджень та пошук нових шляхів утилізації відпрацьованих полімерних виробів з максимальним зменшенням обсягів споживання полімерних виробів з короткою «тривалістю життя» – одноразового посуду та зайвого пакувального матеріалу. Балансування між виробництвом, споживанням та збільшенням обсягів переробки полімерних виробів вимагають досить ґрунтовних знань з області полімерної хімії не лише від спеціалістів – технологів, екологів тощо, але й будуть корисними для звичайних споживачів.

Формування свідомого сприйняття проблем споживання і утилізації відходів, в тому числі полімерних, найкраще починати змалечку – таким чином молоде покоління не сприйматиме ці питання відсторонено, так би мовити «з примусу». Відповідно до викликів сьогодення щодо проблеми полімерних забруднень Національним центром «Мала академія наук» за підтримки всесвітньо відомої корпорації Dow Chemicals [2], яка є однією з провідних виробників хімічної продукції у світі, у 2019 р. було започатковано міждисциплінарний освітній проект «Полімери та екологія» для учнів 8-11 класів закладів загальної середньої освіти.

Проект покликаний сформувати в молоді свідоме ставлення до раціонального природокористування та ресурсозбереження через отримання знань про полімери, їх корисні властивості та переваги над іншими матеріалами, особливості їх застосування, проблеми мінімізації полімерних відходів, їх утилізації та вторинного використання, вивчення можливості та раціональне використання природної відновлювальної сировини в створенні полімерних матеріалів нового покоління. В рамках проекту на базі хіміко-біологічної лабораторії «Ex Lab» НЦ «Мала академія наук України» [3] у 2020 р. було відкрито навчально-дослідницький центр для школярів «PolyLab», оснащений сучасним лабораторним обладнанням, призначеним для всебічного вивчення полімерів.

Вже впродовж 2 років учні, які відвідують практичні заняття, що проводяться викладачами ExLab, в рамках виконання проекту отримують базові знання про полімери,



Творчий підхід – запорука успіху. Учні літньої хімічної наукової школи НЦ МАН захоплено формують волокна поліаміду-6,6

сучасні способи їх одержання, досліджують корисні властивості полімерів та полімерних матеріалів, з якими безпосередньо пов'язані їх напрями застосування, знайомляться з основними принципами оцінювання впливу полімерів на навколишнє середовище, опановують можливості вторинної переробки різних полімерів, та успішно використовують на практиці базові принципи створення сучасних полімерних матеріалів з природної відновлювальної сировини.

Подальше втілення проекту у життя надасть всім небайдужим і зацікавленим юним дослідникам потрібні знання та вміння вивчати стан, ефективність використання та утилізації полімерних

матеріалів в родині, школі, своєму населеному пункті, вплив цих процесів на екологічну ситуацію на регіональному рівні, поглиблювати інформованість учнів з цих питань у своєму та сусідніх закладах освіти, підвищувати активність школярів у розробці власних стартапів з раціонального природокористування, утилізації та вторинного використання полімерів, спрямованих на пошук шляхів оздоровлення окремих місць в різних куточках країни. Немає сумнівів, що учні, які беруть участь у роботі за проектом, запропонують конкретні рішення, спрямовані на вирішення зазначених проблем та покращення екологічної ситуації на регіональному та загальнодержавному рівні.



Навчально-дослідницький центр «Polylab»

1. <https://ourworldindata.org/plastic-pollution>
2. Офіційна Web-сторінка корпорації Dow Chemicals в Україні: <https://ua.dow.com/uk-ua>
3. Офіційний сайт навчальної дослідницької лабораторії ExLab НЦ «Мала академія наук України»: <http://exlab.com.ua>

ДО ПРОБЛЕМИ ФОРМУВАННЯ ПОНЯТЬ ПРО ХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ВОДНЮ (НА ПРИКЛАДІ РЕАКЦІЇ ГОРІННЯ ВОДНЮ НА ПОВІТРІ) У КУРСІ ХІМІЇ 11 КЛАСУ (ПРОФІЛЬНИЙ РІВЕНЬ) ЗАГАЛЬНООСВІТНЬОЇ ШКОЛИ В УМОВАХ ДИСТАНЦІЙНОГО НАВЧАННЯ

Бондарук К.А., Горбуль А.М., Камінський О.М.

Житомирський державний університет імені Івана Франка, bondaruk20katuchka@gmail.com

Водень, як горючий, не отруйний та досить доступний газ, має достатньо широке застосування. Одним із перспективних напрямів сучасного використання водню є створення на його основі паливних елементів автомобілів, які не шкодять навколишньому середовищу через відсутність вихлопних газів. Як відзначають автори [1], паливним елементом (ПЕ) називають електрохімічний генератор, який забезпечує перетворення хімічної енергії на електричну. Слід відмітити, що такі перетворення відбуваються також і в класичних електричних акумуляторах. Проте, на відміну від акумуляторів, паливні елементи мають дві важливі відмінності:

- вони функціонують доти, доки паливо (відновник) та окиснювач надходять із зовнішнього джерела;

- хімічний склад електроліту в процесі роботи не змінюється, тобто паливний елемент не потрібно перезаряджати [1].

Вперше про можливість створення ПЕ повідомив у 1839 р. англійський вчений – аматор у галузі фізичної хімії Вільям Гроув (до речі, суддя за фахом). Спостерігаючи процес електролізу води в розчині сульфатної кислоти, вчений виявив, що після відключення зовнішнього струму в електролітичній комірці генерується постійний струм. Потім певний час роботами такого роду вчені не займалися. Однак, інтерес до досліджень паливних елементів відродився в середині ХХ сторіччя [1].

Тому перспектива використання водню в якості пального досі залишається актуальним завданням сучасної науки та інженерії.

В роботі нами було детально проаналізовано програму 11 класу (профільний рівень) загальноосвітньої школи, зокрема, розділ II. «Неметалічні елементи та їхні сполуки»; тема: «Гідроген. Водень» [2].

Серед очікуваних результатів навчальної діяльності в учнів під час вивчення теми (згідно програми) повинен сформуватися діяльнісний компонент, який полягає в тому, що учень експериментально добуває, збирає і перевіряє водень на чистоту. Це, в тому числі, забезпечується виконанням вчителем таких демонстраційних експериментів:

1. Добування водню в лабораторії та способи його збирання.
2. Перевірка водню на чистоту.
3. Горіння водню в кисні.

Якщо ми говоримо про класичні способи одержання водню в лабораторії, які пропонують підручники з хімії 11 класу, наприклад, взаємодія алюмінію, цинку чи заліза з розчином хлоридної кислоти. Враховуючи активність зазначених металів, а також кількість виділеного водню, ми вважаємо більш перспективним способом в даному випадку саме взаємодію алюмінію з хлоридною кислотою: $2Al + 6HCl \rightarrow 2AlCl_3 + 3H_2 \uparrow$.

Дійсно, в цій реакції водень виділяється досить швидко, особливо якщо використовувати замість гранул алюмінію алюмінієву фольгу, скручену у невеликі гранули.

Для демонстрації горіння водню, його спочатку перевіряють на чистоту. Для цього водень набирають у пробірку (тримають її вертикально дном до верху) і підносять отвором до полум'я – якщо водень в пробірці «загарчить» - це означає, що він не чистий і такий водень підпалювати небезпечно. Підпалювати водень, що виділяється під час реакції, можна лише тоді, коли він спалахуватиме практично без звуку.

Оскільки водень на повітрі (і в кисні також) горить практично безбарвним полум'ям, то виникають певні труднощі при демонстрації такого експерименту.

Трохи більше року тому весь світ сколихнула пандемія, викликана COVID-19, одним з наслідків якої був перехід навчання на дистанційну форму. Дистанційна форма навчання має ряд переваг, в порівнянні з очною формою, однією з яких є можливість демонстрації відео дослідів (віртуальна лабораторія чи віртуальний відео практикум).

Проте, через безбарвне горіння водню, якісно відзняти такий відеоролик стає проблематично.

Щоб вирішити дану проблему ми пропонуємо провести наступну демонстрацію: в конічну колбу на 250 мл налити 40 мл розчину хлоридної кислоти (3:2), додати два шпателя купрум хлориду або мідного купоросу і добре перемішати. Алюмінієву фольгу скрутити в трубку довжиною 5-10 см і вкинути її в реакційну суміш. Коли водень почне інтенсивно виділятися – запалити його біля отвору колби. Відбувається спалах водню зелено – синього кольору. Інтенсивне горіння спостерігається протягом хвилини (Рис.1.). Забарвлення полум'я пояснюється тим, що водень виділяється з великою швидкістю, захоплюючи при цьому іони Cu^{2+} з розчину (саме вони надають полум'ю такого забарвлення). Дослід краще виконувати під тягою, оскільки реакційна суміш сильно розігрівається і в кінцевому результаті виділяються отруйні пари HCl .



Рис.1 Горіння водню в присутності солей Cu^{2+} .

Даний експеримент суттєво покращує картину горіння водню на повітрі в порівнянні з класичним дослідом, а тому на відео цей процес видно чіткіше.

1. Ковтун Г., Полункін Є. Паливний елемент — основа водневої енергетики // Вісн. НАН України. – 2006, № 3. – с.78 – 83.

2. Навчальна програма Хімія для закладів загальної середньої освіти (профільний рівень) загальноосвітньої школи (затверджено Міністерством освіти і науки України наказ № 1407 від 23.10.2017 р.). / Укладачі програми: Бобкова О.С., Бухтіяров В.К., Валюк В.Ф., Величко Л.П., Дубовик О.А., Павленко В.О., Пугач С.В.

ХІМІЧНІ ЗАДАЧІ ЕКОЛОГІЧНОГО ЗМІСТУ ЯК ЕФЕКТИВНИЙ ЕЛЕМЕНТ ЕКОЛОГІЧНОГО ВИХОВАННЯ ТА СПОСІБ ВПРОВАДЖЕННЯ ПОНЯТЬ КОНЦЕПЦІЇ СТАЛОГО РОЗВИТКУ

Бондарчук Т.О.

Пісківська загальноосвітня школа I-III ступенів, ezevikaa@meta.ua

Сьогодні людство стикнулося з проблемою забруднення навколишнього середовища. Великі міста і маленькі селища, океани і невеликі потічки, орні землі і навіть заповідні території – усі однаково страждають від діяльності людини. Проте людство здатне побороти цю проблему за умови спільної систематичної роботи. Актуальний екологічний стан

довкілля та непродумана діяльність людини не повинна жахати суспільство. Всі ці аспекти мають спонукати людство діяти та вирішувати цю проблему комплексно і послідовно. І починати ознайомлення з даною проблемою потрібно якомога раніше. Основне завдання вчителя, а особливо вчителя хімії, - ознайомити здобувача освіти з актуальним станом екологічного середовища. Ця інформація повинна спонукати його бережно ставитися до природи. Необхідно оволодіти знаннями, які речовини шкодять довкіллю і як саме проходить процес забруднення. А в результаті замислитись над використанням властивостей речовин та результатом непродуманої діяльності людини.

Найбільші можливості в реалізації екологічної освіти має предмет хімія. При його освоєнні здобувачі освіти знайомляться з різноманітними промисловими процесами, можливостями використання сировини, переробкою нафти, газу. Також дізнаються як прискорити чи уповільнити хімічний процес та оптимізувати хімічний процес.

У сучасної людини обов'язково має бути сформована екологічна культура. Здобувач освіти знайомиться з можливостями забруднення атмосфери, гідросфери і літосфери техногенними речовинами, вичерпністю ресурсів та їх попереднім нераціональним використанням. Про проблеми кислотних опадів, смогу, парникового ефекту, опустелення територій, скорочення площ лісів та їх причини. А також, як результат, вплив на живу природу і на саму людину [1].

На уроках хімії варто використовувати різноманітні форми і методи роботи для зацікавлення учня, поглиблення його знань з даної теми. Можна запропонувати здобувачам освіти виконання різноманітних проектів екологічного спрямування. Що можуть бути виконані у різних формах як самостійно так і у групі. Можна обрати таку тему, що буде висвітлювати локальні, регіональні або, навіть, планетарні проблеми.

Також для формування екологічної освіти можна застосовувати екологічні ігри, тренажери, дискусії, диспути, предметні тижні, закладання та аналіз дослідів. На уроках також можна застосувати метод лепбуку і хімічні задачі екологічного змісту [3].

За характером діяльності здобувачів освіти задачі по хімії поділяються на репродуктивні, пошукові і творчі. Компетентнісно-орієнтовані завдання в задачах мають познайомити і навчити дитину знаходити потрібну інформацію, визначати головне, планувати дії, вибирати найоптимальніший варіант вирішення проблеми. Такі задачі вчать застосовувати знання, вміння, навички на практиці. Задачі міжпредметного змісту можуть бути практико-орієнтовані, ціннісно-орієнтовані, проблемно-пошукові та задачі пов'язані з комунікативними потребами особистості. Саме ціннісно-орієнтовані задачі розкривають питання проблем життєдіяльності людини та її здоров'я, а також проблем довкілля. До такої групи задач і відносяться хімічні задачі екологічного змісту. [2]

Згідно з чинною програмою по хімії в 8 класі є тема «Кількість речовини, розрахунки за хімічними формулами». В цій темі учням можна запропонувати таку задачу екологічного змісту.

Задача

Чадний газ негативно впливає на атмосферу. Також, CO здатен знизити можливість гемоглобіну крові переносити кисень по організму, що викликає ряд захворювань. Щороку в атмосфері викидається 500 млн. т. CO, що утворюється через неповне окислення палива. Який об'єм за н.у. займе чадний газ такої маси?

Наступною темою в 8 класі є «Основні класи неорганічних сполук». До цієї теми можна запропонувати таку задачу екологічного змісту.

Задача 1

Який об'єм вуглекислого газу утвориться при спалюванні в печах ТЕЦ 12,7 т. коксу?

Задача 2

В хімічних лабораторіях утворюється велика кількість рідких відходів. Їх не можна просто виливати в каналізацію, а варто збирати і потім нейтралізувати. Відходи містять розчин NaOH. Яку кількість HCl треба використати для нейтралізації 4,1 моль лугу?

В 9 класі є тема «Початкові поняття про органічні сполуки». В цій темі також можна запропонувати ряд задач.

Задача 1

Пів гектару соснового лісу за 3 місяці виділяє 900 кг кисню. На новорічні свята було вирубано 5 га соснонок. Яку масу і об'єм кисню могли б вони синтезувати за рік?

Задача 2

Під час акції «Посади дерево» учні школи висадили 43 дерева. Визначте масу кисню, що утворюють ці дерева за рік, якщо одне дерево виділяє таку масу кисню, яка повністю прореагує з 38 кг вуглекислого газу?

Такі задачі спонукатимуть здобувача освіти задуматися не лише про теоретичні знання, а і про міжпредметні зв'язки. Здійснюють можливості реалізації наскрізної змістової лінії «Екологічна безпека і сталий розвиток». Вони можуть спрямувати увагу дитини на екологічні проблеми місцевості та їх вплив на здоров'я людини та живий світ. Також питання, що розглядаються в задачах такого типу спонукають дитину задуматися про актуальний стан довкілля та можливі варіанти розвитку подій на нашій планеті. Тому використання таких задач доцільне та перспективне.

1. Баранова О. Питання охорони природи на уроках хімії: / О. Баранова // Біологія та хімія. – 1997. – № 2. – С. 28-29.

2. Шехонин А.А., Тарлыков В.А., Клещева И.В. и др. Компетентностно-ориентированные задания в системе высшего образования: учеб. пособ. – СПб.:НИУ ИТМО, 2014.– С. 98.

3. Щербина А. П. Екологічне виховання учнів на уроках хімії та в позакласній роботі // Наукові записки – 2012. – № 1. С. 119-122.

МЕТОДИКА ТА ЗАСОБИ ДИСТАНЦІЙНОГО ВИВЧЕННЯ ТЕМИ «ХІМІЧНІ РЕАКЦІЇ» КУРСУ ХІМІЇ ЗАКЛАДУ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ

Брік О.В., Анічкіна О.В.

Житомирський державний університет імені Івана Франка, oleksandrabrik125@gmail.com

Сучасна освіта в Україні потребує оновлення змісту, форм і методів навчання та виховання молодих студентів та учнів. Тому, на сьогодні, одним із головних завдань викладання природничих наук, та педагогічних в цілому, є впровадження інноваційних технологій у навчальний процес, створення умов для дистанційного навчання в закладах загальної середньої освіти, модернізація існуючих методів та засобів навчання шляхом включення електронних ігор у навчальний процес. В даний час кожен учень має пристрій із можливостями доступу до Інтернету, що провокує цей розвиток. Дистанційне навчання час від часу стає надзвичайно актуальним, в часи карантину та пандемій, коли учні віддалені від закладу освіти.

Тема «Хімічні реакції» є важливою для курсу хімії закладу загальної середньої освіти, оскільки передбачає опанування основами хімічних явищ, накопичення фактів їх проходження, класифікації існуючих реакцій. Тому учні в процесі вивчення цієї теми повинні засвоїти такі результати навчання: визначати ступінь окиснення елементів у сполуці за формулою сполуки; розрізняти реакції сполучення, заміщення, обміну та розкладу; окисно-відновні та реакції без зміни ступеня окиснення; екзотермічні та ендотермічні, оборотні та необоротні реакції; валентність та ступінь окиснення елементів; складати хімічні формули бінарних сполук на основі ступеня окиснення елементів; рівняння найпростіших окисно-відновних реакцій на основі електронного балансу, термохімічні рівняння; рівняння оборотних і необоротних реакцій; характеризувати процеси окиснення, відновлення, сполучення, розкладу, заміщення, обміну; вплив різних факторів на швидкість хімічних реакцій; роль окисно-відновних процесів у навколишньому середовищі [2]. Засвоєння цих знань дозволить учням проілюструвати основні типи хімічних реакцій; відновників і

окисників, з якими людина зустрічається в житті. Крім того, вони будуть обізнані з процесами окиснення та відновлення, заснованими на електронній будові атомів, і зможуть висловити судження про значення хімічних реакцій у природі, промисловості та повсякденному житті.

Не менш важливим за теоретичні знання є демонстрування експериментів, але на жаль нам добре відомо, що з об'єктивних і суб'єктивних причин проведення експерименту буває неможливим. Більшість учнів не мають можливості придбати та зберігати хімічні речовини у себе вдома. У таких випадках доцільно застосовувати відеодемонстрації з обов'язковим коментуванням вчителя всіх етапів експериментальної роботи. Мультимедійні засоби не можуть зовсім замінити справжньої, «живої» експериментальної роботи, але можуть стати ефективним засобом формування досвіду спостереження за хімічним експериментом [1].

Вивчаючи ступінь окиснення учні навчаються складати хімічні формули бінарних сполук за ступенями окиснення елементів, таке вміння дозволяє усвідомити різницю між окисно-відновними реакціями та реакціями без зміни ступеня окиснення, тому актуальним є повторення такого пройденого матеріалу. Повторення та перевірку теоретичних знань у межах дистанційного навчання можна провести на такій платформі як *LearningApps.org*. Ця програма є сервісом для підтримки процесів навчання та викладання за допомогою невеликих інтерактивних модулів. Ці модулі можуть використовуватись безпосередньо як навчальні ресурси або для самостійної роботи [4].

Також для перевірки знань учнів з теми «Хімічні реакції» можна використати тести. Використання тестів полягає як у використанні наявних у інтернет-просторі, так і самостійному створенні завдань різних форм. Тести – далеко неідеальний спосіб перевірки засвоєння матеріалу, але найкращий з тих, які ми на сьогодні маємо в умовах дистанційного навчання та оптимізації часу та зусиль вчителя. Основними перевагами тестів є їх об'єктивність, неупередженість, можливість швидкої автоматичної перевірки великої кількості відповідей. Одним з найшвидших і простих способів створення тесту є використання Google Forms, який є частиною офісного інструментарію Google Drive. Аналізуючи можливості Google-форм в методичному навігаторі [5] можна визначити наступні їх переваги: створення таких типів тестових запитань: тестові завдання закритої форми з множинним вибором (вибір однієї правильної відповіді), прапорці (вибір декількох правильних відповідей), введення тексту, вибір зі списку, шкала, сітка, дата та час. Не потрібно тиражувати матеріал опитування на всіх респондентів, оскільки існує функція перемішування запитань у варіанті та відповідей в окремому завданні. Немає потреби особисто спілкуватися з респондентами, збирати їх всіх в один час і в одному місці, оскільки існує функціонал для визначення ліміту часу на виконання завдання та припинення приймання відповідей. Результати опитування зберігаються і постійно доступні в Інтернеті. Результати опитування автоматично опрацьовуються, результати відповідей доступні учням одразу після виконання тестів та представляються у вигляді наочних узагальнених діаграм, які можна аналізувати в якості роботи над помилками.

Навіть в умовах карантину метод «мозкового штурму» можна використовувати під час дистанційного навчання. Цей метод заснований на використанні знань учнів, здобутих на попередніх уроках. Він вимагає коротких, швидких і точних відповідей і передбачає вислуховування ідей без їх обговорення. Цей метод можна виконати у формі відеовікторини.

Вивчення екзотермічних і ендотермічних реакцій зазвичай займає незначну кількість часу, тому необхідно вдосконалити такий метод, показуючи навчальні фільми на цю тему, оскільки навчальні фільми відтворюють певні процеси як у вигляді реальних спеціальних зйомок, так і тривимірної комп'ютерної графіки. А домашнім завданням із цієї теми буде реалізація одного з проєктів: «Ендотермічні реакції на службі людині», «Екзотермічні реакції в життєдіяльності живих організмів», «Енергетичний обмін людини – екзо- чи ендо- ?» [3]. Спосіб презентування результатів проєктної діяльності учні обирають на власний розсуд (презентація, відеоматеріал).

Отже, нові методи, засоби, форми навчання, сучасні освітні технології допомагають учням вивчити хімію, формуючи тим самим їхню незалежність та підвищуючи інтерес до процесу засвоєння знань, а вчителю – дозволяють зробити курс більш яскравим, технічним, витонченим та сучасним. Вони допомагають зробити опанування таким надзвичайно абстрактним предметом, як хімія, цікавим і наочним. Метою впровадження дистанційних технологій у навчальний процес є глибше розуміння навчальних матеріалів. Формуються такі здібності: спілкування (безпосереднє спілкування і за допомогою засобів мережі), інформаційні (здатність шукати інформацію з різних джерел та можливість критично її осмислювати) та самоосвіта (вміння вчитися самостійно). Як свідчить практика, якщо учень не навчиться самостійно приймати рішення, не зможе визначити зміст своєї навчальної діяльності та знайти спосіб її реалізації, він не зможе якісно опанувати той чи інший предмет. Окрім того, дистанційне навчання має також освітню функцію – воно допомагає формувати провідні риси особистості: активність, самостійність, самовдосконалення, креативність.

1. Анічкіна О.В. Можливості використання віртуальної хімічної лабораторії у формуванні експериментально-методичних вмінь студентів проводити шкільний хімічний експеримент / Актуальні проблеми державного управління, педагогіки та психології : збірн. наук. праць Херсонського національного технічного університету. – Херсон: Вид-во ПП “Олді-плюс”, 2015. – Вип. 1 (12). – С. 7–11.

2. Програма для загальноосвітніх навчальних закладів “Хімія. 7-9 класи” затверджена наказом МОН України від 07.06.2017 № 804 “Про оновлені навчальні програми для учнів 5-9 класів загальноосвітніх навчальних закладів”.

3. Хімія : підруч. для 9 кл. загальн. навч. закл./М.М Савчин – К: Грамота, – 2017 – 256.

4. Навчальна платформа для учнів та вчителів - <https://learningapps.org/about.php>

5. Методичний навігатор. Google-сервіси - <https://sites.google.com/a/lyceum2.cv.ua/metodicnij-navigator/google-servisi/google-forms>

ПРОБЛЕМИ ХІМІЧНОЇ ОСВІТИ В УМОВАХ ПАНДЕМІЇ COVID-19

Бутенко О. М., Петровська В. В.

Національний університет харчових технологій, sval_kov@ukr.net

В умовах пандемії COVID-19, що торкнулася більшості країн світу і практично всіх сфер суспільного життя, перед системою освіти в цілому і перед кожним навчальним закладом гостро постало питання у найкоротші терміни перейти на дистанційну форму навчання. Тому цифрові технології стали невід’ємною частиною сучасної освіти. Центральні і місцеві влади, керівники освітніх установ, викладачі, здобувачі освіти та їхні опікуни були змушені терміново адаптуватися до нових умов навчання, опановуючи нові формати дистанційної взаємодії.

Залучені практики трансформації очного навчання у онлайн-середовище або дистанційні освітні формати можна класифікувати за окремими напрямками:

- організація навчання з використанням освітніх онлайн-платформ (наприклад, українська платформа онлайн-освіти Prometheus, на якій розміщують не тільки вітчизняні курси, але також переклад кращих зарубіжних програм);
- передача освітнього контенту по теле- і радіоканалах (цей напрямок найбільш придатний для навчальних програм загально-освітніх закладів);
- проведення занять за допомогою соціальних мереж, месенджерів та електронної пошти;
- тиражування «твердих» копій навчальних матеріалів та їхня доставка здобувачам освіти за місцем перебування (цей напрямок в Україні не набув поширення у зв’язку з особливостями фінансування і звітності навчальних закладів).

В умовах пандемії теоретичні і практичні заняття з хімічних дисциплін більшістю навчальних закладів було організовано у онлайн-форматі із застосуванням різноманітних інструментів дистанційного навчання, серед яких:

- системи керування цифровим навчанням (Google classroom, Moodle, Blackboard, Canvas);
- додатки для навчання на базі мобільних пристроїв;
- програми з розширеною оффлайн-функціональністю;
- масові відкриті онлайн-курси (МООК);
- сервіси самонавчання;
- електронні рідери;
- програми, що забезпечують можливість спільної роботи в режимі онлайн (Skype, Zoom, WebEx, Google Meet);
- інструменти для створення цифрового навчального контенту і численні електронні бази навчальних матеріалів.

Однак, на тлі питань загального характеру, зокрема наявності каналів якісного зв'язку, відповідного матеріально-технічного і програмного забезпечення, організації занять теоретичної і практичної підготовки з використанням мультимедійних засобів, а також впровадження різноманітних способів контролю знань здобувачів освіти, хімічна наука стикнулася з питанням проведення у дистанційному форматі лабораторних занять, метою яких традиційно є набуття здобувачами освіти практичних навичок роботи з лабораторним обладнанням і хімічними реактивами.

Традиційно підготовка і проведення лабораторного заняття складається з кількох загальних етапів:

- 1) попередня підготовка студента (знайомство з теоретичними відомостями, методикою виконання експерименту, властивостями речовин, порядком виконання необхідних розрахунків, засвоєння правил техніки безпеки при виконанні роботи);
- 2) перевірка викладачем готовності студента до виконання роботи;
- 3) отримання студентом індивідуального завдання;
- 4) виконання студентом експериментальної частини;
- 5) заповнення бланка-звіту з лабораторної роботи із зазначенням отриманих результатів;
- 6) обробка експериментальних даних шляхом проведення відповідних розрахунків;
- 7) захист виконаної роботи, в процесі якої студент відповідає на запитання викладача.

Майже всі перелічені етапи, за винятком виконання експериментальної частини, можуть бути реалізовані через дистанційні платформи навчання. Для цього теоретичні відомості і опис лабораторної роботи, а також індивідуальні завдання у вигляді результатів вимірювань і бланк-звіт достатньо розмістити на віртуальній платформі. Контрольні заходи можуть бути організовані, наприклад, у тестовій формі або як співбесіда викладача і студентів у режимі онлайн-конференції. Хоча на дистанційній платформі неможливо забезпечити виконання експериментальної частини, цей недолік може бути частково компенсований наочними фото- і відео-демонстраціями лабораторного експерименту. Нажаль, у більшості вітчизняних навчальних закладів підготовка таких матеріалів не проводилася, отже вітчизняна система освіти виявилася неготовою до таких викликів під час пандемії.

Одним з інноваційних методів навчання хімічним дисциплінам, реалізованих у закордонних освітніх установах, є віртуальний лабораторний практикум. Цей метод має як переваги, так і недоліки. До останніх, зокрема, належить неможливість придбання навичок практичної роботи з обладнанням і хімічними реактивами, неможливість особисто дізнатися про органолептичні властивості хімічних речовин. Однак при проведенні віртуальних дослідів ризик при роботі з їдкими і небезпечними речовинами мінімізується, знижуються витрати на необхідні реактиви (не завжди доступні широкому колу неспеціалізованих навчальних лабораторій). Безсумнівною перевагою віртуального середовища є і той факт, що

студенти можуть підключитися до освітнього процесу та провести необхідні досліди в будь-який зручний для них час, в тому числі компенсуючи пропущені аудиторні заняття.

Іноземні версії лабораторних практикумів, таких як Online Resources for Teaching and Learning Chemistry або CK-12 Chemistry Simulations, малодоступні для вітчизняних користувачів через невідповідність навчальних програм і мовні перепони, а локальні проекти по створенню лабораторних практикумів у навчальних закладах України за ініціативою окремих представників викладацького складу, ще знаходяться на стадії розробки і мало придатні на цей момент для впровадження у навчальний процес. Такі волонтерські ініціативи мають бути підтримані з боку держави щонайменше через відповідне матеріально-технічне забезпечення навчальних закладів.

Проте, враховуючи світовий досвід пандемій минулого, не слід розраховувати, що найближчим часом суспільне життя повернеться до звичного ладу, отже розробка віртуальних програм і платформ, накопичення демонстраційних матеріалів і досвіду роботи онлайн з метою підвищення рівня навчання хімічним дисциплінам залишаються актуальними.

МЕТОДИКА ТА ЗАСОБИ ДИСТАНЦІЙНОГО ВИВЧЕННЯ ТЕМИ «НІТРОГЕНОВМІСНІ ОРГАНІЧНІ СПОЛУКИ» (РІВЕНЬ СТАНДАРТУ) ЗАКЛАДУ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ

Гончарук Л.О., Тітов Ю.О.

Житомирський державний університет імені Івана Франка, lidia120899@gmail.com

Процес навчання, організований дистанційно з використанням комп'ютерних телекомунікацій, забезпечує доступ до численних джерел інформації, що зберігаються в пам'яті мережевого комп'ютера та розповсюджуються за допомогою комунікаційних технологій. Одним з головних принципів дистанційного навчання в закладах загальної середньої освіти є його доступність. Ще однією, важливою перевагою дистанційного навчання хімії є можливість передавати сучасні та оновлені знання учням. Інтернет постійно розширює свої функції, послуги, інформацію, інтелектуальні тренажери тощо. Сучасний Інтернет, виконує інтерактивну функцію, з функціями пошуку (каталоги, колекції посилань), інформацією (електронні бібліотеки, віртуальні лабораторії, електронні книги і журнали, методична література), дозволяючи учням і вчителям спілкуватися за допомогою електронної пошти, форумів, особистих чатів, а також планувати проведення відео конференцій [1].

В умовах дистанційного навчання ефективність навчального процесу покращилась завдяки використанню сучасних інформаційно-комунікаційних технологій. Це допомагає активізувати пізнавальну діяльність учнів, розвинути їх самостійність у здобутті знань, посилити їх позитивну мотивацію до навчання та дозволити формувати інформаційні та цифрові компетентності. Освітні інноваційні ресурси можуть пояснити зміст навчання, особливо ті, що пов'язані з внутрішньою будовою нітрогеновмісних органічних речовин та їх фізико-хімічними процесами, що є недоступним для спостереження в шкільних лабораторіях. Дистанційне навчання передбачає не лише самостійне оволодіння учнями навчального матеріалу, але й контроль, з боку вчителя, за рівнем засвоєння нових знань.

Наступні результати навчання можна отримати, вивчаючи тему «Нітрогеновмісні органічні сполуки» під час процесу навчання: учні можуть називати загальні формули та функціональні групи амінокислот та амінів; складають молекулярні та структурні формули амінів та амінокислот за назвами і формулами; пишуть рівняння реакцій, які описують хімічні властивості цих речовин, зможуть пояснювати зміст таких понять: функціональна аміногрупа, пептидна група та інші; амфотерність амінокислот також будуть здатні наводити приклади амінів, амінокислот, білків, класифікувати ці сполуки за групами; установлювати зв'язки між складом, будовою та властивостями нітрогеновмісних органічних речовин [2].

В процесі навчання ми організували вивчення матеріалу з даної теми і вибрали наступний план, який дозволить реалізувати формування результатів навчання. Засвоєння теми розпочинається з вивчення амінів, їх номенклатури, будови молекули, ізомерії, фізичних та хімічних властивостей. Раціональність у цій темі полягає у використанні мультимедійних презентацій та використанні відео-демонстрації 3D моделей молекул амінів та амінокислот, та маркерів доповненої реальності. Це значно підвищує інтерес до вивчення органічної хімії (тобто нітрогеновмісних органічних сполук) та дає можливість учням поєднувати хімічні знання та цифрові навички, також це покращує якість сприйняття складного теоретичного матеріалу.

Для вивчення хімічних властивостей нітрогеновмісних органічних сполук доцільним буде використання хімічного експерименту, який в умовах дистанційного навчання є віртуальним. Проілюструвати хімічні властивості нітрогеновмісних органічних сполук можна за допомогою відеоекспериментів віртуальної хімічної лабораторії, яка відтворює відеофрагменти реальних хімічних експериментів. Це забезпечує ознайомлення учнів з особливостями хімічного експерименту, дозволяє багаторазово відтворити проходження експерименту, розглянути зовнішні ознаки вихідних речовин і продуктів реакції з близька. Для вчителя віртуальний хімічний експеримент дозволяє за відсутності реактивів і обладнання або за відсутності доступу до закладу освіти забезпечити повноцінне включення демонстраційного хімічного експерименту в навчальний процес, організацію проведення лабораторних дослідів і практичних робіт як на репродуктивному так і на творчому рівні тощо. Засобом перевірки знань учнів може бути застосування онлайн-тестування. Для цього в нагоді можуть стати тестові завдання, що створені за допомогою Google-форм. Крім того онлайн-тестування може бути застосоване як елемент закріплення або бути онлайн-тренажером для учнів. Для вчителя використання таких засобів сприяє оптимізації часу та фізичних можливостей, адже перевірка фото зображень виконаних тестів забирає багато часу та створює додаткове навантаження на органи зору.

Необхідною умовою успішності оволодіння хімічною наукою в закладі загальної середньої освіти є використання методу проєктів, як в урочній так і позаурочній діяльності. Робота над проєктом виконується, як правило в малій групі, що навіть в дистанційному режимі навчання може мати місце, оскільки електронні платформи дозволяють спілкуватися он-лайн і виконувати спільне завдання. Наприклад, особливо цікавим може стати в даній темі виконання проєктів «Натуральні волокна тваринного походження: їхні властивості, дія на організм людини, застосування», «Анілін – основа для виробництва барвників.», «Синтез білків», «Збалансоване харчування – запорука здорового життя», «Виведення плям органічного походження».

Отже використання інноваційних технологій, дистанційного навчання та широкої доступності девайсів дозволить перетворити класичний традиційний урок в інноваційний простір для здобування необхідних результатів навчання, сформує прогресивне ставлення до хімічної науки, як сучасної, необхідної та важливої для кожної людини і суспільства в цілому. Саме дистанційне навчання дозволить кожному відчувати себе унікальним, створити індивідуальну траєкторію освіти, відчувати себе успішним.

1. Биков В.Ю. Дистанційний навчальний процес: навч. посіб. / В.Ю. Биков, В.М. Кухаренко. – Київ: Міленіум, 2005. – С. 292

2. Навчальна програма Хімія для закладів загальної середньої освіти (рівень стандарту) загальноосвітньої школи (затверджено Міністерством освіти і науки України наказ № 1407 від 23.10.2017 р.). / Укладачі програми: Бобкова О.С., Бухтіяров В.К., Валюк В.Ф., Величко Л.П., Дубовик О.А., Павленко В.О., Пугач С.В. Режим доступу: <https://mon.gov.ua/ua/osvita/zagalna-serednya-osvita/navchalni-programi/navchalni-programi-dlya-10-11-klasiv>

МІЖДИСЦИПЛІНАРНА ІНТЕГРАЦІЯ ПРИ ВИВЧЕННІ ТОКСИКОЛОГІЧНОЇ ТА СУДОВОЇ ХІМІЇ СТУДЕНТАМИ КАФЕДРИ ХІМІЇ ФАРМАЦЕВТИЧНОГО ФАКУЛЬТЕТУ

Деркач Г.О.

Івано-Франківський національний медичний університет, gderkach@ifnmu.edu.ua

Одним з важливих критерієм успішного засвоєння отриманих знань з предмету “Токсикологічної та судової хімії” є систематизація та розвиток надбаних умінь отриманих протягом вивчення різних дисциплін, зокрема органічної, аналітичної та фармацевтичної хімії, ін.

Відтворення та застосування на практиці міжпредметних зв'язків можливе тільки при цілеспрямованій співпраці викладача із студентами. Реалізація даного процесу може бути досягнута за рахунок високого рівня узагальнення, що важливо для сприйняття цілісності отриманих знань та вміння конкретно вирішувати поставлені завдання та проблеми[1].

Самостійність, науковість, системність та потенціал одержання знань формується в результаті вміння встановити та відтворити міжпредметні зв'язки.

Даний процес потребує спеціально організованої роботи з вивченням головних положень навчальної теми, основних понять навчального предмету та дисципліни в цілому[2].

Важливу роль в реалізації наскрізних міждисциплінарних зв'язків відіграє інтеграція, яка сприяє переходу отриманих знань та методів з одного предмету в інший.

Наприклад, засвоєння теми “Дослідження модельних «служних» хлороформних витяжок на наявність і вміст лікарських речовин хроматографічними методами”. Одним з хроматографічних методів являється тонкошарова хроматографія (ТШХ), яка використовується в якісному та кількісному аналізі лікарських засобів.

Застосування тонкошарової хроматографії, як методу аналізу, має місце не тільки в токсикологічній та судовій хімії, але й при вивченні аналітичної та фармацевтичної хімії. ТШХ являється одним з чутливих, точних та достатньо зручних методів розподілу та ідентифікації речовин та лікарських засобів[3].

Міжпредметна інтеграція сприяє закріпленню певних тем і розділів, засвоєнню узагальнюючих понять, що використовуються в різних спеціальних дисциплінах.

1. Литвинова Т.Н., Выскубова Н.К. Межпредметная интеграция курса общей химии в медицинском вузе // Фундаментальные исследования. – 2004. – №3. – С.73-75.

2. Литвинова Т.Н., Быков И.М., Волкова Н.К. Межпредметная интеграция химических дисциплин в медицинском вузе // Современные проблемы науки и образования. – 2009. – №2. – С.51-52.

3. Болотов Б.Б. Аналітична хімія: навчальний посібник. – Х: Прапор, НафУ, 2004. – 480с.

ВИКЛАДАННЯ ДИСЦИПЛІНИ «ІНФОРМАЦІЙНІ СИСТЕМИ І РЕСУРСИ В ХІМІЇ» В УМОВАХ КАРАНТИННИХ ОБМЕЖЕНЬ

Жильцова С.В.

Донецький національний університет імені Василя Стуса, sv.zhiltsova@donnu.edu.ua

Цифрова трансформація освіти є одним із пріоритетних напрямків роботи МОН України, особливо в умовах пандемії. Для успішної реалізації цього пріоритету важливі наявність ресурсної бази, а також відповідної підготовки в усіх учасників освітнього процесу. Гостро стоїть питання якості навчання у віддаленому режимі для здобувачів вищої освіти природничих спеціальностей, для яких важливою є не лише ґрунтовна теоретична підготовка, але й набуття навичок практичної роботи в лабораторії. За рік, що минув з

початку переходу на дистанційний режим навчання у вищій школі, при викладанні дисциплін хімічного спрямування активніше стали використовуватися можливості онлайн-демонстрації лабораторних робіт, підготовки відповідних відеоматеріалів та можливостей адаптації деяких робіт для проведення їх у домашніх умовах. Водночас, якщо курс не передбачає роботи безпосередньо в хімічній лабораторії, але вимагає вмінь і навичок роботи з хімічною інформацією, пошуком і обробкою даних, цей недолік дистанційного режиму навчання не є таким критичним. Зокрема, при вивченні освітнього компонента «Інформаційні системи і ресурси в хімії» здобувачами вищої освіти, які навчаються за освітньо-професійною програмою «Хімія» спеціальності 102 «Хімія» в Донецькому національному університеті імені Василя Стуса, можливості дистанційної освіти можуть бути використані достатньо повно.

Метою освітнього компонента є ознайомлення здобувачів освіти з програмними засобами загального призначення і спеціалізованим програмним забезпеченням, необхідним у роботі хіміка. В структуру курсу входять засоби MS Office, які активно використовуються для роботи з хімічними текстами, виконання розрахунків і побудови графічних залежностей, презентації результатів власних досліджень (Word, Excel, PowerPoint). Курс також дає уявлення про основні способи представлення структурної інформації, використання спеціалізованого програмного забезпечення для візуалізації хімічних структур (пакет ACD/Labs) і можливості пошуку хімічної інформації в мережі Internet, включаючи бази даних хімічних структур, сайти постачальників хімічних реактивів, видавництва наукової періодики тощо.

Курсом передбачено ознайомлення з теоретичним матеріалом та виконання лабораторних робіт, спрямоване на вдосконалення існуючих та набуття нових навичок спеціального спрямування. За умови успішного виконання програми курсу у здобувачів сформуються загальні та спеціальні компетентності, а також результати навчання, передбачені освітньою програмою «Хімія» та спрямовані на виконання комп'ютерних обчислень, використання інформаційно-комунікаційних технологій для спілкування та роботи з даними, вміння працювати самостійно та в команді з орієнтацією на результат.

Матеріали для роботи з дисципліни розташовані на Порталі спеціальності 102 «Хімія» Донецького національного університету імені Василя Стуса, платформі дистанційного навчання Moodle та в групі MS Teams. Після введення дистанційного режиму навчання відбувалося засобами MS Teams. В групі містилися усі необхідні теоретичні та методичні матеріали. Здобувачі освіти мали можливість в онлайн-режимі ознайомитися з матеріалами лекцій у вигляді презентацій, крім того, використовувалися демонстрація екрану та дошка MS Teams для спільного застосування. По завершенні теоретичного блоку розпочиналося виконання лабораторних робіт з консультаціями та поясненнями викладача, коли в цьому була необхідність. Виконані роботи здобувачі вкладали у вигляді окремих завдань, за які отримували оцінки та за потреби коментар викладача. Важливим інструментом була можливість використання віртуального робочого столу для роботи зі спеціалізованим програмним забезпеченням, якщо здобувачі не мали змоги встановити їх на свої пристрої. Це дозволяло вчасно виконати усі заплановані завдання, в тому числі під час модульного контролю. По завершенні курсу здобувачі проходили тест на платформі Moodle, який охоплює усі теми та включає питання закритого типу з однією та кількома вірними відповідями та питання на відповідність. Аналіз результатів тестування показав, що кількість вірних відповідей становила від 50 до 88 %, при цьому спостерігалася позитивна кореляція з результатами поточного оцінювання знань здобувачів.

Таким чином, запропонований підхід до викладання освітнього компонента «Інформаційні системи і ресурси в хімії» для здобувачів освіти за освітньою програмою «Хімія», що полягає в поєднанні ресурсів MS Teams та Moodle, є достатньо успішною практикою та дозволяє реалізувати усі заплановані завдання курсу.

СТВОРЕННЯ ЕЛЕКТРОННОГО НАВЧАЛЬНОГО КУРСУ «ТЕРМОДИНАМІЧНІ ТА КІНЕТИЧНІ АСПЕКТИ ПЕРЕБІГУ РЕАКЦІЙ. ВПЛИВ ТЕМПЕРАТУРИ» НА ПЛАТФОРМІ MOODLE

Житник О. П., Ютілова К. С., Швед О. М., Розанцев Г. М.

Донецький національний університет імені Василя Стуса, zhytnyk.o@donnu.edu.ua

Технологія дистанційного навчання базується на принципах відкритого навчання, широко використовує комп'ютерні навчальні програми різного призначення та створює за допомогою сучасних технологій інформаційне освітнє середовище для постачання навчального матеріалу та спілкування. Новітні технології дозволяють вирішити проблеми забезпечення якісної освіти у випадках недоступності або обмеженої доступності очного навчання, що безперечно є актуальним в умовах пандемії. Однією з платформ для дистанційного навчання, які набули найбільш широкого використання, є платформа MOODLE (Modular Object Oriented Distance Learning Environment), яка включає різноманітні засоби для розробки дистанційних курсів і перевірки знань здобувачів.

Для успішного переходу від традиційної до дистанційної форми навчання слід вирішити ряд психолого-педагогічних, організаційних і технічних проблем. Перш за все потрібно спроектувати й розробити дистанційний курс відповідно до навчальної програми, рівня знань студентів, їх попередньої загальної і професійної підготовки із врахуванням індивідуальних особливостей.

Метою роботи є створення за допомогою засобів онлайн-платформи MOODLE дистанційного електронного навчального курсу «Термодинамічні та кінетичні аспекти перебігу реакцій. Вплив температури», який призначений для здобувачів IV курсу СО «Бакалавр» спеціальності «102 Хімія».

На етапі проектування електронного курсу «Термодинамічні та кінетичні аспекти перебігу реакцій. Вплив температури» було сформульовано основні педагогічні завдання курсу. З огляду на сучасний стан розвитку фізико-органічної і фізико-неорганічної хімії та з метою послідовного і всебічного висвітлення теми курсу, лекційний матеріал і завдання поточного та підсумкового контролю було присвячено:

- вивченню закономірностей впливу температури на швидкість реакції;
- аналізу основних положень теорій активованого комплексу та активних зіткнень;
- встановленню взаємозв'язку між властивостями розчинника та станом реагуючих сполук і їх реакційною здатністю;
- освоєнню методів і принципів урахування впливу специфічної і неспецифічної сольватації при визначенні кінетичних закономірностей реакцій у розчинах;
- використанню графічних і математичних методів для розрахунку швидкості, констант швидкості та активаційних параметрів реакцій.

На етапі розробки і впровадження було створено електронний навчальний курс, що складається з п'яти тематичних розділів. У кожному розділі розміщено повний текст лекції, наведено різнопланові семінарські завдання для сумісного обговорення, що включають розв'язок задач і проблемні теоретичні питання для дискусії за тематикою лекції. В кінці розділу наведено тестові завдання різних типів – завдання з однією відповіддю, множинний вибір, відповідність, вірно-невірно, задачі з числовою відповіддю. Підсумковий контроль включає в себе теоретичні питання, тестові завдання і задачі. Курс містить демонстраційні відеоматеріали із зовнішніх Інтернет-джерел, які служать як додаткова інформація для поглиблення знань і розширення світогляду здобувачів. Основні поняття курсу представлені у глосарії, пошук термінів у якому здійснюється за алфавітом. Для ефективного спілкування між викладачем і студентами на сторінці курсу розміщено форму зворотного зв'язку. Найважливіші повідомлення, оголошення й актуальні новини від викладача надходять користувачам курсу через форум «Новини».

Розроблений курс відповідає вимогам МОН України до електронних навчальних курсів і забезпечує високу ефективність у засвоєнні та розумінні матеріалу здобувачами.

АДАПТАЦІЯ КУРСУ «СУЧАСНІ МЕТОДИ СИНТЕЗУ НЕОРГАНІЧНИХ ТА ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК» ДО ВИКЛАДАННЯ НА ПЛАТФОРМІ MOODLE

Заболотна М. В., Бахалова Є. А., Швед О. М.

Донецький національний університет імені Василя Стуса, zabolotna_m@donnu.edu.ua

Реалії нашого світу спонукають учасників освітнього процесу до готовності надавати та отримувати освітні послуги як в очному, так і в дистанційному варіантах. У режимі дистанційного навчання у ВНЗ важливу роль відіграє платформа дистанційного навчання Moodle (Modular Object Oriented Distance Learning Environment), яка надає розвинутий набір інструментів для комп'ютеризованого навчання.

Moodle – система управління вмістом сайту (Content Management System – CMS), що спеціально розроблена для створення онлайн-курсів викладачами, надає доступ до багатьох можливостей, починаючи від режиму лекції, до тестової перевірки знань. Система має простий та інтуїтивно зрозумілий інтерфейс, що надає змогу як студентам, так і викладачам користуватися сервісом з комфортом та користю.

Метою роботи є адаптація курсу «Сучасні методи синтезу неорганічних та органічних сполук» для дистанційного вивчення вибіркової дисципліни у системі Moodle студентами III курсу СО «Бакалавр» денної форми навчання спеціальності 102 «Хімія»

Відповідно до робочої програми організація навчання за дисципліною відбувається в двох форматах:

- 1) аудиторні заняття (лекції, лабораторні заняття);
- 2) самостійна робота здобувача.

Оскільки курс «Сучасні методи синтезу неорганічних та органічних сполук» включає виконання лабораторних робіт, які виконуються здобувачами під керівництвом викладача, повна адаптація до дистанційного викладання не може бути реалізованою. Проте у зв'язку з вимушеним переходом на дистанційне навчання постало питання, як здійснити заплановані лабораторні роботи? Платформа Moodle, як і інші комп'ютерні системи такого спрямування, не може замінити повноцінний лабораторний практикум, проте надає певні можливості для часткової компенсації практичної підготовки здобувачів.

У даному дослідженні виконання лабораторних робіт відзнято в реальному практикумі та змонтовано в програмі DaVinci Resolve. Для реалізації лабораторного практикуму обрано модуль діяльності «Завдання» на платформі Moodle, який дозволяє викладачам видавати завдання, збирати роботи, оцінювати їх та залишати відгуки на ці роботи. Студенти можуть відправляти будь-який цифровий контент (файли), такий як текстові документи, електронні таблиці, картинки, аудіо та відео файли. При розгляді завдання викладач може залишати текстові відгуки або файли з детальним роз'ясненням по роботі студента. Максимальний обсяг для файлів 150 Мб. Відео-файли зазвичай мають більший обсяг, тому здобувачам пропонується перейти за посилання для перегляду лабораторної роботи. У фінальному варіанті послідовність виконання лабораторних робіт в модулі «Завдання» виглядає так:

- Студент завантажує файл «лабораторна робота», в якому представлені завдання або досліди, і оформлює їх в лабораторний журнал.
- Переходить за наданим в «змісті завдання» посиланням, де має можливість переглянути відео з дослідами і записує спостереження в лабораторний журнал.
- Сканує або фотографує свій лабораторний журнал та одним файлом завантажує в систему.
- Викладачу приходять повідомлення в Moodle та на корпоративну пошту.
- Викладач перевіряє роботу та виставляє оцінку.
- Студент отримує повідомлення про те, що його роботу оцінили та може переглянути оцінку і коментарі до роботи.

Даний підхід до проведення лабораторного практикуму в умовах дистанційного навчання було успішно реалізовано як перший етап практичної підготовки. Другим етапом практичної підготовки є закріплення цих навичок в умовах очної форми навчання.

МЕТОДИКА ТА ЗАСОБИ ДИСТАНЦІЙНОГО ВИВЧЕННЯ ТЕМИ "ТЕОРІЯ БУДОВИ ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК" КУРСУ ХІМІЇ (РІВЕНЬ СТАНДАРТУ) ЗАКЛАДУ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ

Завадська С. В.

Житомирський державний університет ім.І.Франка, SD04051992@ukr.net

Дистанційне навчання - це форма організації навчального процесу і педагогічна технологія, основою якої є керована самостійна робота студентів, а також широке застосування у навчанні сучасних інформаційно-телекомунікаційних технологій. Дистанційне навчання відрізняється від інших форм навчання високою інтерактивністю та системою управління пізнавальною діяльністю студентів, передбачає диференціацію й індивідуалізацію навчання. Окрім того, навчальний процес, організований дистанційно на базі комп'ютерних телекомунікацій, надає можливість доступу до численних джерел інформації, які зберігаються у пам'яті мережних комп'ютерів і розповсюджуються через технічні засоби зв'язку, що є широкою базою різного навчального матеріалу.

Метою даної роботи є дослідження програмного забезпечення дистанційного навчання з хімії у закладах загальної середньої освіти та підтвердження того, що дистанційне навчання є необхідною та перспективною моделлю організації навчального процесу. Відповідно до мети визначено такі завдання: розкрити сутність поняття "дистанційне навчання" ; охарактеризувати переваги методики та засобів дистанційного навчання у сучасних школярів; провести урок на тему "Теорія будови органічних сполук" за допомогою одного із засобів дистанційного навчання; провести анкетування та опитування серед учнів та вчителів щодо необхідності дистанційного навчання; проаналізувати доцільність та ефективність упровадження дистанційного навчання з хімії для закладів загальної середньої освіти.

На сьогодні дистанційне навчання є однією з провідних світових тенденцій в освіті – ця технологія реалізує принцип безперервної освіти і здатна задовольнити постійно зростаючий попит на знання в інформаційному суспільстві. Засобами, що забезпечують у дистанційному навчанні використання усіх форм взаємодії є сучасні інформаційні телекомунікаційні технології. Найбільш поширеними засобами організації дистанційного навчання є засоби, що базуються на інтернет-технологіях: електронна пошта, відеоконференції, чати, форуми, веб-сайти, онлайн-бібліотеки, файли розсилок. Усі ці засоби часто комбінуються з традиційними друкованими матеріалами. Одним із найпоширенішим із засобів є онлайн-платформа Zoom-сервіс для проведення відео конференцій та онлайн-зустрічей. Zoom підходить для індивідуальних та групових занять. Користувачі можуть використовувати додаток як на комп'ютері, так і на планшеті. До відеоконференції може підключитись кожен за посиланням або ідентифікатором конференції. У платформу вбудована інтерактивна дошка, яку можна демонструвати учням.

Отже, головною особливістю дистанційного навчання є самоосвіта як основа дистанційного навчання, що передбачає самомотивацію учня щодо власного навчання, а також високий рівень самореалізації. Очевидно, що сьогодні дистанційна освіта займає чільне місце в навчальному процесі, підвищує його ефективність за рахунок створення для учнів можливостей самостійно навчатися в позааудиторний час. Однак, потребує подальшого вивчення й уточнення різноманітність оптимальних форм, методів і засобів дистанційного навчання з урахуванням специфіки. Доцільним, на наш погляд, є дослідження різноманітних способів стимулювання учнів до самостійної, зокрема дослідницької роботи. Це сприятиме не лише своєчасному виконанню домашніх завдань, а й підвищить якість освіти та заохочуватиме до подальшої самоосвіти.

1. Длинський Є. В. Дистанційне навчання – одна з прогресивних форм підготовки фахівців // Теоретичні питання культури, освіти та виховання: збірник наукових праць. - К. : Вид. центр КНЛУ, 2010. - Вип. 42. - С.202-207.

2. Козубовська, І. В. Дистанційне навчання в системі освіти : навчальний посібник Ужгород : Вид-во Ужгородського нац. ун-ту, 2002. – 364 с

АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ ХІМІЧНОЇ ОСВІТИ У ЗАКЛАДАХ З ПОГЛИБЛЕНИМ ВИВЧЕННЯМ ХІМІЇ

Іванічева Р. В.; Прибора Н. А.

Національний педагогічний університет імені М. П. Драгоманова

ivanicevarimma@gmail.com, natapry@gmail.com

У профільних закладах освіти з поглибленим вивченням природничих наук особливою складовою є хімічна освіта. Вона визначається трьома загальними рівнями: загальнокультурна, загальноосвітня та профільна. Вивчення хімії на профільному рівні в природничо-математичному напрямі передбачене у таких циклах: хіміко-біологічному, агрохімічному, хіміко-математичному, хіміко-технологічному.

Профільне вивчення предметів запроваджується у старшій школі. Зазвичай батьки спільно зі своєю дитиною беруть участь у виборі профілю навчання, адже це важливий етап у формуванні професіонального спрямування учня. При цьому особливу увагу звертають на те, як заклади освіти підготовлені до реалізації профільного навчання: звертають увагу на оснащення кабінетів, кваліфікацію учителів, злагоженість у педагогічному середовищі, відкритість до запровадження інноваційних методик тощо.

Шкільна хімічна освіта – це важлива базова компонента підготовки майбутнього спеціаліста хіміка, біолога, еколога, агрохіміка, лікаря, біотехнолога. Профільне навчання хімії має на меті допомогти учневі, передусім, пізнати світ експерименту та професії у всіх її аспектах, підготувати до самостійного життя. Саме тому вкрай важливо у класах природничого профілю забезпечити здобувачам освіти високий рівень хімічної підготовки як в теоретичному, так і в практичному планах.

Першою і найактуальнішою, на нашу думку, проблемою хімічної освіти у закладах з поглибленим вивченням хімії є вчителі. Викладання у таких класах потребує постійного підвищення кваліфікації. Адже не може працювати у спеціалізованому закладі освіти вчитель, який залишається осторонь новітніх тенденцій науки, упровадження сучасних методик. Наразі інформаційний простір рясніє безліччю можливостей професійного росту. Скористатися ними – нагальна необхідність сучасного педагога.

Друга актуальна проблема стосується власне закладу освіти. Адже не всі профільні хімічні класи оснащені лабораторіями з необхідним обладнанням. Для проведення хімічного експерименту (а хімія це в першу чергу експериментальна наука!) необхідна лабораторія з максимальним набором хімічних реактивів, підведенням води та електричного струму. Оскільки ми живимо у XXI столітті, то для педагогів не в новинку користуватись віртуальними лабораторіями. Такі інноваційні технології полегшують життя не тільки педагогам, але і закладу освіти. Але потрібно розуміти всі “за” та “проти” їх використання. Не секрет, що більшість учителів спираються суто на віртуальні лабораторії або відеофрагменти, що вкрай неприпустимо. Віртуальні лабораторії можна використовувати під час дистанційного навчання або змішаного, але ні в якому разі не як основний засіб навчання. Відеодемонстрації ні в якому разі не призначені для підміни живого експерименту. Екран телевізора, як і екран монітора комп'ютера, являє собою віртуальний світ. Тоді як учням надзвичайно важливо якщо не потримати у руках, то, принаймні, побачити своїми очима явища не на екрані, а насправді, «живцем». Відеозаписи не дозволяють здобути і удосконалити експериментальні навички, що є основними в професіях, пов'язаних з хімією.

Третя не менш актуальна проблема – це недооцінювання такої форми діяльності на уроці, як групова робота. Вона передбачає спільне планування навчальної діяльності, вибір методів та засобів її здійснення, формує в учнів уміння працювати у колективі, розвиває толерантність до думки інших учнів, зміцнює дисципліну, розвиває здатність до правильної організації спільної роботи. Як показує аналіз літератури та спостереження за викладацькою діяльністю, більшість вчителів не використовують групову роботу тому, що вона вимагає попередньої підготовки як з боку вчителя, так і з боку учнів. Педагог має попередньо продумати кожну хвилину уроку, правильно об'єднати учнів у групи за інтелектуальною

складовою, і, звичайно ж, бездоганно знати матеріал уроку, який буде опановуватись за груповим методом.

На нашу думку ці три проблеми є найактуальнішими у сучасній спеціалізованій школі. Адже без високого науково-методичного рівня підготовки педагога, без належного матеріального забезпечення і без правильно підібраних форм, методів і засобів навчання отримати чудовий результат неможливо.

ОСОБЛИВОСТІ ЕЛЕКТРОННОГО ТЕСТУВАННЯ З ХІМІЇ В УМОВАХ ДИСТАНЦІЙНОГО НАВЧАННЯ

Кусяк Н.В., Колесникова І.Ю.

Житомирський державний університет ім.І.Франка, nkusyak@ukr.net

В сьогоденнішніх реаліях учасники освітнього процесу пристосовуються до онлайн-навчання, тому застосування інформаційних технологій в традиційній організації навчального процесу дозволяє його оптимізувати та зробити його більш керованим, що є важливим та актуальним. Сьогодні вчителям пропонується широкий вибір освітніх сервісів та платформ, які дозволяють забезпечити всі етапи проведення уроку, починаючи від реєстрації класу, проведення уроків та діагностики знань учнів. Низка сервісів дозволяє розширити звичайний набір можливостей та ресурсів для проведення віртуальних уроків та занять, обміну та перегляду інформації (відео-та аудіо матеріали, фото- та графічні зображення), можливість інтерактивної участі учня. Крім того, дистанційне навчання дозволяє вибудувати індивідуальний напрямок роботи з учнями.

Не секрет, що значною популярністю під час дистанційного навчання користується тестовий контроль успішності учнів на етапі перевірки та закріплення навчального матеріалу, оскільки крім швидкої та ефективної діагностичної функції контролю, сприяє розвитку психологічних якостей учнів, розвитку умінь знаходити оптимальні рішення за короткий проміжок часу [1]. Кожна технологія тестування повинна володіти такими характеристиками, як наявність інтерактивного інструментального середовища, можливість вибору алгоритму тестування, інтегрованість в різноманітні освітні технології, профільність, масштабність, доступність, створення бази тестових багаторівневих завдань, а також направленість на досягнення високих результатів та підвищення мотивації.

Електронне тестування, зокрема при викладанні хімії в школі, має ряд переваг перед традиційними формами і методами контролю в умовах дистанційного навчання: швидка, зручна, автоматизована обробка отриманих даних; сам процес тестування більш цікавий для учнів; більш раціональне використання часу уроку; тестування можна застосовувати до всіх груп учнів; об'єктивність оцінок; можливість здійснення самоконтролю і взаємоконтролю.

Але, поряд з позитивними, є і негативні сторони в застосування електронних тестів. Учитель не може простежити логіку міркувань учнів, в тестуванні присутній елемент випадковості, тестовий контроль не сприяє розвитку усного і писемного мовлення учнів. Мінімізувати негативні моменти можуть евристичні питання (наприклад, «...розглядаючи синтез амоніаку за реакцією $N_2 + 3H_2 \leftrightarrow 2NH_3$ можна поставити питання про можливі шляхи підвищення виходу амоніаку; можливі відповіді (правильні): застосування каталізатору; підвищення тиску; вибір оптимальної температури», або «пояснити, чому концентровану сульфатну кислоту можна перевозити в залізних цистернах, а розведену – ні...» з відповідними варіантами [2]) чи творчі завдання під час виконання тих чи інших засобів контролю знань учнів, які позбавляють можливості швидкого пошуку однозначної відповіді за допомогою електронної шпаргалки.

1. Сергієнко В.П. Методичні рекомендації зі складання тестових завдань. — К.: НПУ, — 2011. — 41 с.

2. Буденкова Н. М., Мисіна О. І. Застосування активних методів навчання у формуванні довершеної особистості // Молодий вчений. – 2018. – № 4.1 (56.1). – С. 1–5.

МЕТОДИКА ТА ЗАСОБИ ДИСТАНЦІЙНОГО ВИВЧЕННЯ ТЕМИ «ПОЧАТКОВІ ПОНЯТТЯ ПРО ОРГАНІЧНІ СПОЛУКИ» КУРСУ ХІМІЇ ЗАКЛАДУ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ

Ломанчук А.Л., Анічкіна О.В.

Житомирський державний університет імені Івана Франка, lomalina@ukr.net

В сучасних умовах карантину, здобувачі середньої освіти віддаленні від закладів освіти, тому будь-який вчитель покликаний забезпечити учнів успішним оволодінням теоретичного матеріалу, сформуванню початкових вмінь проводити хімічний експеримент, розв'язувати розрахункові та експериментальні задачі тощо. Для цього вчителю необхідно по-новому налаштуватися на подання навчального матеріалу, щоб діти в повному обсязі змогли зрозуміти та сприйняти його. Вивчення теми «Початкові поняття про органічні сполуки» реалізується в 9 класі закладу загальної середньої освіти. Теоретичний матеріал теми є надзвичайно складним, оскільки формує відмінні від неорганічної хімії поняття та явища, але є надзвичайно необхідним та актуальним, оскільки органічна хімія виступає підґрунтям розуміння хімічної складової життя біологічних систем. Вивчення теми передбачає підготовку учнів до засвоєння знань про найважливіші класи органічних сполук, які будуть вивчатися в 10 класі на рівні стандарту або профільному рівні в закладі загальної середньої освіти. Структура теми представлена наступними підтемами – «Вуглеводні», «Оксигеновмісні органічні сполуки» та «Нітрогеновмісні органічні сполуки» [1]. Зміст теми можна представити такою схемою.



Основним завданням вивчення теми є усвідомлення учнями необхідності здобутих знань, як основи розуміння життя, як біохімічного процесу. Тому знання учнів про постійний контакт з органічними та неорганічними сполуками в повсякденному житті, усвідомлення єдності неживої та живої природи, і саме вивчення їх властивостей дозволить зрозуміти, що це є необхідною умовою для забезпечення і підтримки нормального функціонування природи і організму людини зокрема. Також, в подальшому, на основі теоретичних знань, учні зможуть встановлювати зв'язки між будовою і властивостями речовин. Дані знання будуть актуальні і для учнів, які налаштовані пов'язати своє життя, наприклад, з фармацевтичною або з хімічною промисловістю.

На сучасному етапі, у вивченні хімії провідне місце відводиться інформаційним технологіям, особливо комп'ютерним. Це допомагає активізувати навчальний процес, включати всіх учнів в роботу на уроках, створювати умови для самостійного вивчення навчального матеріалу, підвищувати інтерес учнів до хімії, а також допомагає вчителю організувати перевірку навчальних досягнень учнів. Тому при дистанційному вивченні хімії можна використовувати такі засоби:

1. Для забезпечення якісного комунікування вчителя з учнями можна використати можливості таких електронних платформ – Zoom, Google Meet, Google Клас, Classroom, електронна пошта, месенджери Viber, WhatsApp, Skype тощо.

2. Для пояснення матеріалу можна використовувати показ електронних презентацій та проєкційну дошку (в Zoom, наприклад), на якій може писати формули та рівняння не лише вчитель, але й учні.

3. Обов'язковим є включення до онлайн-уроків відеодемонстрацій, відеороликів із лабораторними дослідженнями, що відповідають всім існуючим вимогам до демонстрацій.

Коментування демонстраційних експериментів учителем, а не «німе» включення їх в урок, стане запорукою їх успішності; збагачення методичної палітри проблемними, частково-пошуковими відеоекспериментами дозволить реалізувати навчання не лише на репродуктивному, а й творчому (дослідницькому) рівні.

4. Засобом перевірки знань школярів може бути застосування систем тестових завдань створених у Google-формах, онлайн-тестів «На Урок» [2]. Такі тестування можуть бути застосовані і як елемент закріплення, систематизації, узагальнення матеріалу.

5. Електронна платформа LearningApps.org дозволить створювати дидактичні ігри різних типів для використання в ході онлайн-уроків, самостійної роботи учнів і з метою для дозвілля.

Отже, забезпечення якісного проведення уроків із хімії є одним із основних завдань в умовах річного дистанційного навчання учнів. Основна діяльність вчителя хімії має бути спрямована на застосування сучасних інноваційних технологій, як засобів оптимізації освітнього процесу та чинників успішності в навчанні учнів, оскільки збуджують цікавість до вивчення складної хімічної науки. Для вчителя створення методичного інструментарію дистанційного навчання стає запорукою формування індивідуальної траєкторії навчання кожного учня, адже врахування індивідуальних потреб і можливостей дозволить досягнути успішності в навчанні, зробивши уроки технологічними, інтенсивними та сучасними.

1. Навчальна програма з хімії для загальноосвітніх навчальних закладів (затверджено Наказом МОН України від 07.06.2017 № 804). / *Укладачі програми (2012 р.):* Величко Л.П., Дубовик О.А., Котляр З.В., Муляр С.П., Павленко В.О., Титаренко Н.В., Ярошенко.

3. Онлайн-тести «На Урок». Інтерактивні завдання для контролю знань і залучення учнів до активної роботи в класі та вдома [Електронний ресурс] / Режим доступу: <https://naurok.com.ua/test>

МЕТОДИКА ТА ЗАСОБИ ДИСТАНЦІЙНОГО ВИВЧЕННЯ ТЕМИ « РОЗЧИНИ» КУРСУ ХІМІЇ ЗАКЛАДУ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ

Мельник Т.М., Анічкіна О.В.

Житомирський державний університет ім. Івана Франка, tanyamelnyk51@gmail.com

Хімія в закладі загальної середньої освіти є навчальним предметом, у якому існують реальні можливості залучити учнів до дослідницької роботи, розвинути їх творчі здібності в процесі вивчення різних хімічних та фізико-хімічних процесів.

Тема «Розчини» є однією з ключових у змісті шкільного курсу хімії, оскільки знання та уміння, які формуються в ході її вивчення є необхідними як для подальшого здобуття хімічних знань, так і для формування культури поведінки з речовинами в побуті. Тема «Розчини» має широкі можливості експериментальної роботи на уроці, як вчителя так і учнів, що забезпечує формування дослідницьких здатностей, потягу до пізнавальної роботи, розуміння єдності природи. Поширеність і доступність розчинів робить їх також унікальним об'єктом для навчально-дослідницької діяльності учнів. Значну кількість занять цієї теми можна організувати в формі навчальних досліджень як лабораторних, так і домашніх. Розвитку навчально-дослідницьких здібностей учнів на уроках хімії можна досягти тільки в тому випадку, якщо ставити перед ними послідовно посилені теоретичні, практичні або експериментальні завдання, саме в ході їх виконання учні отримують та закріплюють нові знання та систематизують вже наявні [3].

Реалізація домашнього хімічного експерименту з теми «Розчини» потребує критичного аналізу запропонованих в програмі з хімії для закладів загальної середньої освіти прикладів, адже виготовлення розчину кухонної солі, не має жодного зовнішнього ефекту, є достатньо часто використовуваним в побуті, тому не дозволить збудити пізнавальний інтерес і не вплине на емоційну сферу учнів. Тому ми пропонуємо використати для виготовлення розчинів забарвлені речовини, обов'язково провести можливі реакції іонного обміну, дозволити учню відчувати себе в умовах домашньої лабораторії справжнім хіміком-

дослідником. У дистанційному навчанні, як і будь-якому іншому учень має пройти шлях від незнання до знання, від невідомого до відомого, від сприйняття інформації через її розуміння до відтворення та використання на різних рівнях. Постає питання, як в умовах дистанційного навчання подати матеріал більш доступно та якісно, забезпечити ілюстративність матеріалу, організувати не лише навчальну, а й діагностичну та контролюючу функції. Для викладу матеріалу вчитель використовує сучасні інформаційні інноваційні технології за допомогою інтерактивних методів і різних платформ із можливістю передачі аудіо-візуального матеріалу (Skype, Zoom, Viber, YouTube, Telegram та ін.)

Платформи Moodle, Google Classroom, ClassDojo, Classtime, LearningApps.org, Google-форми надають можливість презентувати навчальний матеріал у різних форматах (текст, електронна презентація, відеоматеріал), здійснювати тестування та опитування школярів, працювати з інтерактивною дошкою. Учитель має змогу проводити тестування, опитування, систематизувати, оцінювати діяльність, переглядати результати виконання завдань, застосовувати різні форми оцінювання, коментувати й організовувати ефективне спілкування з учнями в режимі реального часу [1].

Вчителю необхідно врахувати наявність в темі демонстраційних і лабораторних експериментів. В умовах дистанційного навчання провести таке заняття доволі складно. Вчитель в мережі інтернет має знайти досліди, які вказані в навчальній програмі або самостійно відзняти проведення таких експериментів. В ході демонстрації відеороликів хімічних експериментів на уроці, вчитель повинен коментувати кожен етап проведення, організовувати спостереження за проходженням експерименту, намагатися використовувати елементи проблемності в ході перегляду відеоекспериментів. Також необхідно повторювати правила техніки безпеки, адже правильне поводження з речовинами починається зі знання про їх властивості. Основною вимогою до використання відеороликів на уроці є висока якість зображення. Якісно відзнятих відео в мережі інтернет дуже мало, тому є проблема у демонструванні власновідзнятих відео або проведення хімічних експериментів офлайн. Експеримент не лише збагачує школярів новими поняттями, вміннями, навичками, але є також способом перевірки достовірності отриманих знань, сприяє глибшому розумінню матеріалу, дозволяє більш повно здійснювати зв'язок з життям, майбутньою практичною діяльністю. Хімічний експеримент формує і розвиває в учнів спостережливість, допитливість, винахідливість, акуратність в роботі [2].

Для повторення і закріплення матеріалу можна використовувати дидактичні ігри. В іграх розвиваються творчі здібності, самостійний пошук відповідей, логічне мислення, активність учнів. Новий погляд на дидактичні ігри дозволяє здійснити платформа LearningApps.org. Створення дидактичних ігор в електронному форматі дозволяє учням здобувати знання, закріплювати та систематизувати їх, застосовувати певні знання та вміння на практиці. Доступність і цікавість електронних дидактичних ігор для учнів виступає запорукою зростання цікавості до вивчення хімії. Робота над навчальними проектами в даній темі має надзвичайно широкі можливості, адже більшість хімічних реакцій, які оточують людину відбуваються саме в розчинах, тому проектна технологія має можливість бути широко реалізована, а можливість проведення деяких хімічних реакцій в домашніх умовах, забезпечує практичну складову навчального проекту.

Отже, на сучасному етапі найдовшого карантину в світовій історії, дистанційного навчання більше року, вчитель хімії повинен свідомо ставитися до організації електронного навчання учнів. Поєднання онлайн навчання, електронних засобів, інформаційно-комунікаційних технологій, дозволить досягнути результату та мінімізувати шкоду такого навчання для вивчення природничих наук, адже достатній рівень обізнаності кожної людини в галузі природничих наук – запорука раціонального ставлення людства до речовин і способів їх використання.

1. Лотоцька А., Пасічник О. Організація дистанційного навчання в школі, – 2020. – 71с.
2. Базелюк О. В., Спірін О. М., Петренко Л. М., Каленський А. А. та ін. Технології дистанційного професійного навчання. Методичний посібник. – Житомир: «Полісся», 2018. – 160 с.

ВИКОРИСТАННЯ ТЕХНОЛОГІЇ AUGMENTED REALITY ДЛЯ ПРОВЕДЕННЯ ІНТЕГРОВАНИХ УРОКІВ БІОХІМІЧНОГО СПРЯМУВАННЯ

Мідак Л.Я., Кузишин О.В., Буждиган Х.В., Пахомов Ю.Д.

Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, lilia.midak@gmail.com

На сучасну пору освіта переживає епоху трансформації, пов'язаної зі змінами підходів до навчання, стрімким розвитком інформаційно-комунікаційних технологій та цифровізацією суспільства. Сучасний учень під час навчання у школі повинен набути вмінь та навичок, необхідних йому для опанування професій майбутнього та сьогодення. Саме тому особливе місце у шкільній освіті набуває здобуття знань з природничих і технічних наук у поєднанні з навичками 21-го століття, таких як уміння спілкуватися, працювати в команді та вчитися протягом життя. Реформування шкільної освіти також передбачає посилення проектної, командної та групової активності учнів у навчальному процесі. Досвід показує, що інтегроване навчання, за якого матеріал доповнюється та повторюється іншими напрямками, дає набагато кращий результат у порівнянні з традиційним вивченням дисциплін [1-3].

Вивчення шкільного курсу хімії передбачає встановлення міжпредметних зв'язків з дисциплінами в галузі природничих наук та інших галузях науки та мистецтва, а також повсякденного життя. Результатом інтеграції природничо-математичних дисциплін з елементами технологій та інженерії є STEM-освіта. Зважаючи на стрімкий розвиток інформаційно-комунікаційних технологій, у якості складової Т – технології на STEM-уроках та під час виконання STEM-проектів доцільно використовувати сучасні ІТ-розробки. До таких сучасних трендів належить технологія доповненої реальності (Augmented Reality, AR), яка дозволяє якісно візуалізувати навчальний матеріал у 3D та сприяє кращому його сприйняттю та засвоєнню [4]. Хімія вважається складною наукою, яка оперує поняттями, які не можуть стати об'єктами безпосереднього розуміння, та вимагають створення певних образів та асоціацій в уяві учнів. Неоднозначність 2D-зображень призводить до того, що дуже часто важливі поняття є незрозумілими та не засвоюються. Враховуючи ще і той факт, що більшість сучасних учнів є візуалами, можна зробити висновок, що навчальний матеріал з природничих дисциплін та хімії, зокрема, вимагає якісної 3D-візуалізації. Використання у навчальному процесі застосунків, що містять технології AR, очевидно, може спростити сприйняття теоретичного матеріалу учнями, оскільки вони матимуть можливість віртуально взаємодіяти з об'єктом вивчення, досліджувати його та закріпити одержані знання на практиці (змоделювати віртуальні об'єкти в режимі реального часу) [4].

Метою роботи є створення мобільного додатку LiCo. School (на платформі Android) для візуалізації хімічної будови органічних, біологічно активних речовин, які можна використати вчителю та учням для проведення інтегрованих уроків біохімічного спрямування; розкриття особливостей використання STEM-технологій в навчанні природничих дисциплін. Для даного мобільного додатка було розроблено 3D-зображення молекул для вивчення хімії щастя, хімії запаху, хімії страху, хімії болю тощо.

Завантажити додаток можна за QR-кодом (рис.).

Для використання технології AR мітки доповненої реальності створено [5] на основі платформи «Vuforia»; 3D-об'єкти змодельовані [5] в програмі 3DMax, об'єкти доповненої реальності реалізовано за допомогою багатоплатформового інструменту для розробки дво- та тривимірних мобільних додатків «Unity 3D».

Програми з природничих наук мають багато тем, які просто не можливі без інтеграції. Вивчення будови органічних сполук на уроках хімії у 9 та 10 класах стане цікавішим для учнів, якщо розглянути будову молекул, які викликають у нас щастя, радість та кохання, а саме дофамін, серотонін, окситоцин та ендорфін.



Рис. QR-код для завантаження мобільного додатку LiCo. School.

Для вивчення теми «Обмін речовин та перетворення енергії в організмі людини» у 8 класі з біології можна провести інтегрований урок. Відповідно до навчальної програми учень повинен наводити приклади вітамінів, характеризувати склад харчових продуктів, їжу як джерело енергії, обмін речовин та перетворення енергії в організмі людини, харчові й енергетичні потреби людини, пояснювати функціональне значення для організму білків, жирів, вуглеводів, вітамінів, води та мінеральних речовин. Забезпечення цієї знань своєї компоненти можливе за умови інтеграції знань з фізики, хімії та біології. Але оскільки ця тема розглядається учнями у 8 класі, а вітаміни – це органічні сполуки, вивчення яких тільки розпочинається на уроках хімії у 9 класі, то доцільно спростити подачу матеріалу візуалізацією з використанням технології доповненої реальності [4]. Тоді цей матеріал кожен учень зможе переглянути на своєму мобільному телефоні чи планшеті, «потримати» молекулу вітаміну на руці, що зробить урок особливо цікавим. Такий підхід допоможе учням аналізувати ситуацію, критично мислити та робити відповідні висновки про користь продуктів харчування, а знання, одержані на уроці будуть потрібними і в дорослому житті.

Технологію доповненої реальності можна використовувати також час вивчення хімічної природи біологічно активних речовин, зокрема хімії запаху, а також у процесі підготовки та захисту навчальних проектів (Тема 3. Оксигеновмісні органічні сполуки: «Етери та естери в косметичі»).

Використання навчального матеріалу у розробленому мобільному додатку вчителі хімії можуть використовувати під час проведення STEM-уроків. Візуалізація навчального матеріалу у 3D полегшує його сприйняття та засвоєння. Правильно підібраний демонстраційний матеріал допомагає краще зрозуміти різноманітні процеси та явища, будову хімічних сполук та механізми їх взаємодій.

1. Борисенко В. Інтегроване навчання: тематичний і діяльнісний підхід [Електронний ресурс] / Валентина Борисенко. – 2017. – Режим доступу до ресурсу: <https://mozaikaped.blogspot.com/2017/08/integrované-navchannja-tematychnyj.html?view=flipcard>.
2. Інтегрований урок сьогодні. [Електронний ресурс]. – Режим доступу до статті: <http://pleyady.kiev.ua/dumki-vgolos/6732-integrovanij-urok-sogodni.html>
3. Інтегровані уроки: від теорії до практики. [Електронний ресурс]. – Режим доступу до статті: <http://osvitanova.com.ua/posts/1776-intehrovani-uroky-vid-teorii-do-praktyky>
4. Midak L., Kuzyshyn o., Baziuk L. Specifics of visualization of study material with augmented reality while studying natural sciences // Open educational e-environment of modern University, special edition. – 2019. – P. 192-201.
5. Caudell T. P. Augmented reality: An application of heads-up display technology to manual manufacturing processes // Proceedings of the Twenty-Fifth Hawaii International Conference on System Sciences. January 7-10, 1992. Kauai, Hawaii. Volume 2: Software Technology Track / Edited by Jay F. Nunamaker, Jr. and Ralph H. Sprague, Jr. – Los Alamtos: IEEE Computer Society Press, 1992. – P. 659-669.

ВАГОВИЙ МЕТОД У ДОСЛІДЖЕННІ ЯКОСТІ ПОВІТРЯ

Неук Ю. П., Анічкіна О. В.

Житомирський державний університет імені Івана Франка, neukulia94@gmail.com

Формування експериментальних і дослідницьких умінь найефективніше відбувається в межах проектної технології навчання, оскільки саме вона потребує практичного результату. Так в закладі загальної середньої і вищої освіти можливо провести проект із визначення загальної запиленості атмосферного повітря. Це може стати темою цікавого проекту адже навіть у достатньо відомих, на перший погляд, місцях показник запиленості повітря не буде однаковим і не завжди буде відповідати очікуванням.

Першим етапом визначення запиленості повітря є визначення маси пилу в зразку повітря. Проводиться такий аналіз ваговим методом, який полягає в аспірації зразку повітря крізь доведений до постійної маси щільний паперовий фільтр (синя смужка) та зважуванні пилу, який поглинеться фільтром.

Методика визначення запиленості атмосферного повітря полягає в встановленні маси фільтру до початку зважування з точністю до 4 знаки після коми в грамах, проведенні аспірації повітря протягом 60 хвилин, висушуванні фільтру за температури 100-105°C та визначенні маси фільтру з пилом. За різницею мас можна визначити вміст пилу в повітрі, за умови роботи аспіратор в сталому режимі (приблизно 20 л/хв). Отримані результати необхідно порівняти з граничнодопустимими концентраціями, визначеними Державними санітарними правилами охорони атмосферного повітря населених місць (від забруднення хімічними та біологічними речовинами) [3]. Для селітебних зон (територія міста, селища тощо) де можуть знаходитися люди різного віку (діти, особи похилого віку, хворобливі люди тощо) встановлюються дві величини ГДК речовин, які забруднюють атмосферу – максимальна разова та середньодобова. Граничнодопустимі концентрації недиференційованого за складом пилу (аерозолі) за ДСП охорони атмосферного повітря можуть приймати значення максимальної разової ГДК – 0,5 мг/м³, середньодобової – 0,15 мг/м³. Таким чином, можна встановити запиленість атмосферного повітря, а, відповідно, і вплив його на людей, які вдихають таке повітря значний час. Також ваговим методом можна встановити кількість твердих часток, які вдихає курець під час паління та пасивний курець вдихаючи дим цигарок.

Таким чином, найпростіші хімічні дослідження є актуальними, оскільки дозволяють усвідомити людині значення хімії для створення безпечного середовища існування. Використання вагів у сучасних хімічних дослідженнях і досі є необхідним, адже ще немає жодного способу, який допоможе встановити точну масу зразка за короткий час. А використання проектної технології навчання в закладах загальної середньої та вищої освіти збагачує хімію практичним змістом.

1. Державні санітарні правила охорони атмосферного повітря населених місць (від забруднення хімічними та біологічними речовинами). Режим доступу: <https://zakon.rada.gov.ua/rada/show/v0201282-97#Text>

ФОРМУВАННЯ ПОНЯТЬ ПРО КОЛОЇДНІ РОЗЧИНИ В КУРСІ ХІМІЇ 11 КЛАСУ ЗАКЛАДУ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ ЗАСОБАМИ ДИСТАНЦІЙНОГО НАВЧАННЯ

Ольховська Л.Л., Камінський О.М.

Житомирський державний університет імені Івана Франка, liuda.olhovska525@gmail.com

Вчення про колоїдні розчини відіграє надзвичайно велике практичне значення при вивченні різноманітних природничих наук, зокрема: хімії, біології та медицини тощо. Наприклад, вже давно відомо, що цитоплазма клітин рослинних і тваринних організмів — це складна колоїдна система. Більшість процесів, які відбуваються в організмі тісно пов'язані з

колоїдними розчинами. Такі важливі для правильного функціонування організму рідини, як кров, лімфа чи спинномозкова рідина, є колоїдами. Також багато продуктів харчування є колоїдними системами: яйця, молоко, майонез, фруктове желе, мармелад, холодець тощо. З колоїдними системами людина повсякчас зустрічається в побуті: це різні миючі та чищачі засоби, зубна паста, шампунь, клеї тощо. Враховуючи все вище зазначене, вивчення колоїдних розчинів в курсі хімії середньої школи є досить актуальним завданням. В даній роботі ми проаналізували навчальну програму за 11 клас (профільний рівень) загальноосвітньої школи на тему IV: «Дисперсні системи» (Розділ IV. Узагальнювальне повторення найважливіших питань курсу хімії) [1]. З метою досягнення очікуваних результатів навчальної діяльності в учнів під час вивчення даної теми в умовах дистанційного навчання в країні та світі ми пропонуємо використати таку схему віртуальної хімічної лабораторії (відео практикуму), яку вчитель може створити за допомогою свого смартфона чи планшета і використовувати її для пояснення цієї теми.

Знаннєвий компонент:

Учень: називає типи дисперсних систем – ми пропонуємо для закріплення цього результату навчання виконати відео експерименти, пов'язані з одержанням різних класів колоїдних систем (наприклад, одержання суспензій, емульсій, гелів, пін, аерозолів тощо);

формулює визначення понять: колоїдні й істинні розчини – пропонуємо відзняти досліди, що стосуються одержання та стійкості колоїдних систем та порівняння з властивостями істинних розчинів (наприклад, коагуляція золів).

Діяльнісний компонент:

характеризує колоїдні й істинні розчини – дослідження кінетичної стійкості колоїдних систем.

пояснює сутність і причини коагуляції колоїдів – пропонується виконання таких експериментів: коагуляція золю ферум (III) гідроксиду; взаємна коагуляція золів; оборотна та необоротна коагуляція золю яєчного білку тощо.

експериментально визначає дисперсні системи за їх характерними ознаками – відеоролики, що демонструють оптичні властивості колоїдних систем, зокрема, розсіювання світла колоїдом (ефект Тіндаля – Фарадея).

Ціннісний компонент:

оцінює значення колоїдних розчинів у природі та на виробництві – очистка забрудненої води коагуляцією золем ферум (III) гідроксиду.

На нашу думку, створення такої відео колекції експериментів, що пов'язані з колоїдними розчинами, класами колоїдних систем тощо полегшить розуміння учнів цього досить об'ємного та складного матеріалу теми, в тому числі, в умовах дистанційного навчання.

1. Навчальна програма Хімія для закладів загальної середньої освіти (профільний рівень) загальноосвітньої школи (затверджено Міністерством освіти і науки України наказ № 1407 від 23.10.2017 р.). / Укладачі програми: Бобкова О.С., Бухтіяров В.К., Валюк В.Ф., Величко Л.П., Дубовик О.А., Павленко В.О., Пугач С.В.

ОРГАНІЗАЦІЯ СИСТЕМНОГО ВИВЧЕННЯ ТЕМИ «РОЗЧИНИ» В 9 КЛАСІ ЗАГАЛЬНООСВІТНІХ ШКІЛ

Перлова О.В., Абалакіна А.О.

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, abalakinaalina@gmail.com

Вимоги сучасного суспільства до процесу навчання обумовлюють необхідність формування у учнів загальноосвітніх шкіл системних знань з хімії, структура яких адекватно відповідає структурі хімічної науки. Оволодіння системними знаннями складає основу для створення у учнів хімічного стилю мислення. Відомо, що системний підхід – це підхід до всебічного вивчення певної проблеми. Він є корисним у випадках, коли намагаються дослідити об'єкт з різних боків, комплексно. Системний підхід базується на принципах єдності, розвитку, глобальної мети, функціональності, ієрархії, організованості тощо.

Мета роботи – розробка методики формування системних знань учнів з різним ступенем мотивації при вивченні теми «Розчини» на усіх ланках навчання (вивчення нового матеріалу, повторення та закріплення матеріалу, систематизація та узагальнення знань).

Вибір теми «Розчини» обумовлений великою роллю, яку відіграють розчини у природі, побуті, сільському господарстві, науці (зокрема, у медицині, фармації, біології) та техніці. Хімія розчинів є теоретичною основою гідрометалургії, галургії, аналітичної хімії. Виробництва, в основі яких лежать хімічні процеси, зазвичай пов'язані з розчинами; великотоннажні синтези в хімічній промисловості здійснюються, як правило, у розчинах. Крім того, певні види класифікації речовин базуються на їх властивостях у розчинах.

Проведено аналіз сучасної літератури з дидактики та методики навчання хімії. З'ясовано, що системні знання з хімії характеризуються рухливістю (перенесенням набутих знань на нові умови, на інші речовини), доведеністю (обґрунтованістю), можливістю використовувати набуті знання у практичній діяльності. Безліч знань з хімії становить систему при наявності взаємних зв'язків між окремими елементами знань. Цілісною виявляється лише така система знань, внутрішні зв'язки якої надають їй нову якість. При цьому знання, що утворюють систему, володіють іншими якостями, ніж ті ж знання поза системою. Цією новою якістю, що входить у систему знань з хімії, є їх системність.

Проведено аналіз навчальної програми з хімії (тема «Розчини») для загальноосвітніх навчальних закладів зі стандартним та поглибленим вивченням хімії, а також порівняння змісту цього розділу у навчальних програмах України і країн СНД (Республіка Білорусь, Казахстан тощо). Встановлено, що темі «Розчини» у програмах для стандартного рівня відводиться недостатня кількість годин (для України 6 годин), тоді як для поглибленого рівня – 25 годин (Україна). Отже, на жаль, лише навчаючись у школах (класах) з поглибленим вивченням хімії, учні можуть здобути системні теоретичні знання та практичні навички з даної теми. Порівнявши теми «Розчини» у навчальних програмах для поглибленого рівня в Україні та країнах СНД, можна зробити висновок, що практичні частини програм в кількісному вираженні збігаються, але в Україні програмою передбачено більша кількість демонстрацій, лабораторних дослідів, домашніх експериментів, наукових робіт. Безумовно, це сприяє розвитку самостійності, пізнавального інтересу, систематизації, узагальнення і поглиблення знань школярів з даної теми.

Аналіз викладення теми «Розчини» у підручниках для 9 класу загальноосвітніх навчальних закладів (автори П.П. Попель, Л.С. Крикля; О.В. Григорович; Н.М. Буринська) та з поглибленим вивченням хімії (А.М. Бутенко), а також у посібнику О. Березан «Комплексна підготовка до Зовнішнього Незалежного Оцінювання» показав, що при перевірці знань учнів недостатньо уваги приділяється тестуванню з теоретичного матеріалу, більшість наведених тестів уявляють собою розрахункові задачі. Тому було складено близько 100 тестових завдань різних типів та різних рівнів складності з теоретичного матеріалу теми «Розчини». Проведено апробацію цих завдань серед обдарованих учнів при їх підготовці до IV етапу Всеукраїнської олімпіади з хімії.

ОСОБЛИВОСТІ ОЦІНЮВАННЯ НАВЧАЛЬНИХ ДОСЯГНЕНЬ УЧНІВ ПРИ ВИВЧЕННІ ХІМІЇ В УМОВАХ ПАНДЕМІЧНОЇ КРИЗИ

Поліщук А.О., Кусяк Н.В.

Житомирський державний університет ім.І.Франка, arsenpoliss@gmail.com

При пандемії Covid-19 дистанційне навчання із використанням цифрових технологій (зокрема технологій дистанційного навчання Office 365, Google Classroom [1]) є важливим для всіх учасників освітнього процесу: учнів, їхніх батьків і вчителів. Проте організація викладання хімії та оцінювання досягнень учнів закладів загальної середньої освіти має свої особливості в таких умовах.

У наказі МОН України «Про затвердження Положення про дистанційне навчання» зазначено, що є дистанційним навчанням [2]. Відтак останнє передбачає: 1) доступ усіх учасників освітнього процесу до Інтернету, 2) технічне забезпечення, 3) належне володіння цифровими технологіями для навчання у дистанційній формі (учителями та учнями). Також треба наголосити, що за методичними рекомендаціями Міністерства освіти України про організацію дистанційного навчання в школі, розроблених у зв'язку з пандемією Covid-19, необхідно при оцінюванні й контролі навчальних досягнень учнів: повідомити завдання та вказати конкретні строки надання відповідей на них для перевірки, надати зрозумілу інструкцію про порядок виконання роботи. При цьому треба враховувати несприятливі моменти, що можуть виникнути, наприклад нестабільна робота комп'ютерних мереж чи робота з незнайомими платформами та ін. Треба враховувати, що дистанційне навчання вимагає більшого часу, необхідного для надання відповідей учнями для оцінювання учителем [2]. Особливої уваги учителя в умовах дистанційного навчання потребує не лише поглиблення знань із найважливіших питань хімії, але й періодичне повторення.

Щодо викладання хімії, то завдання із хімії потребують не лише вивчення й закріплення теоретичного матеріалу, але мають і практичну складову – проведення лабораторних дослідів, практичних робіт. І тут важливо учителю постійно звертати увагу на техніку безпеки при їх здійсненні, а також на інструктаж із методики проведення таких видів роботи, і варто повторювати теоретичні питання, вивчення яких тісно пов'язане із хімічними експериментами та розв'язуванням розрахункових задач. Треба пам'ятати учителю, що оцінювання практичних робіт має бути постійним, а оцінювання лабораторних робіт є вибіркоким. За наказом МОН України № 1/9-430 та інструктивно-методичними рекомендаціями щодо викладання навчальних предметів у закладах загальної середньої освіти у 2020/2021 навчальному році, наведених як додаток до цього наказу, фіксується інформація про особливості оцінювання навчальних досягнень учнів, в тому числі з хімії. Так, при виставленні тематичної оцінки учителем мають враховуватись всі види навчальної діяльності, що мають бути оцінені протягом вивчення курсу хімії, і семестрове оцінювання відбувається на основі тематичних оцінок, проте необхідно брати до уваги важливість теми і тривалість її розгляду, складність змісту, динаміку особистих досягнень учня чи учениці; на основі семестрових результатів відбувається річне оцінювання. Також треба наголосити на можливості скоригованих семестрових оцінок. Відтак, повторення найважливіших теоретичних питань не тільки дозволяє покращити засвоєння матеріалу, поглибивши знання учнів, але й дає можливість такого коригування семестрових оцінок, а згодом річних. Тобто, оцінювання має за основну мету не контроль і перевірку досягнень учнів, а виступає важливою складовою зворотного зв'язку. Крім того, має відбуватися «коригуюче навчання» - повторення вивченого матеріалу за минулий навчальний рік на початку нового, і для цього треба, знову ж таки, звертати увагу на «ключові теми» і найголовніші теоретичні питання з кожної теми, зокрема на основі діагностичних завдань (усних співбесід) з учнями.

1. Кухаренко В. М., Бондаренко В. В. Екстрене дистанційне навчання в Україні. – Х.: Міськадрукарня, 2020. – 409 с.

2. Логоцька А., Пасічник О. Організація дистанційного навчання в школі: методичні рекомендації. – 2020. – 36 с.

МЕТОДИКА ТА ЗАСОБИ ДИСТАНЦІЙНОГО ВИВЧЕННЯ ТЕМИ «ОСНОВНІ КЛАСИ НЕОРГАНІЧНИХ СПОЛУК» КУРСУ ХІМІЇ ЗАКЛАДУ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ

Подорожня О.О., Романишина Л.М.

Житомирський державний університет імені Івана Франка, podoroznya2805@gmail.com

Протягом останнього року технології дистанційного навчання стають більш актуальною та в деяких випадках основною формою навчання в закладах загальної середньої освіти, адже вони дозволяють продовжувати освітній процес під час карантину та інших надзвичайних обставин. Перехід до дистанційних методів навчання в школах змушує вчителів адаптуватися до нової для них форми навчання та призводить до появи нових методів та засобів навчання що будуть сприяти ефективному вивченні та засвоєнню учнями нових знань.

Вивчення теми "Основні класи неорганічних сполук" є дуже важливим етапом вивчення хімії в школі, адже знання властивостей класів неорганічних сполук — запорука подальшого успішного вивчення та освідомлення неорганічної хімії, усвідомлення генетичних зв'язків між класами неорганічних сполук і взаємозв'язку простих і складних речовин.

Поняття про класи неорганічних сполук починає формуватися ще в сьомому класі під час вивчення таких тем як : кисень та вода, адже ці речовини беруть участь в утворенні оксидів, основ, кислот та солей. Знайомство з самими класами неорганічних сполук та їх вивчення відбувається в восьмому класі. Таким чином ця тема сприяє не тільки формуванню нових знань, але й розвитку раніше набутих, які стають підґрунтям для подальшого вивчення неорганічної хімії.

Вивчення теми починається з класифікації основних видів неорганічних сполук на кислоти, основи, оксиди та солі. Опіраючись на набуті раніше знання учні можуть спробувати самостійно дати визначення цим термінам, а також навести приклади сполук відповідних класів. При вивченні даної теми учні вивчають номенклатуру, навчаються називати речовини за формулами та вивчають тривіальні назви деяких речовин. Учні вивчають способи добування; фізичні властивості речовин та основні типи хімічних реакцій в які може вступати той чи інший клас сполук; дізнаються як використовуються ті чи інші речовини в побуті та де їх застосовують в промислових масштабах.

Виклад даного матеріалу та його пояснення під час дистанційного навчання можна проводити за допомогою комп'ютерних інформаційних технологій. Таким чином вчитель може організувати навчальний процес залучаючи до роботи на уроці всіх учнів, зацікавлювати учнів до самостійного вивчення хімії в позаурочний час та ефективно проводити перевірку знань учнів. Для комунікації з учнями вчитель може застосовувати такі платформи як Zoom, Google Meet; для наочного викладення інформації можна використовувати електронні презентації та інтерактивну дошку, на якій можуть писати як учитель так і учні (особливо ефективно використовується при розв'язанні задач, написанні рівнянь хімічних реакцій, складання перетворень тощо). Для перевірки знань учнів можна використовувати тести Google-форм, які мають можливість навіть розставлення коефіцієнтів у написаних рівняннях хімічних реакцій.

Також важливим етапом у вивченні даної теми є розрахункові задачі, учні навчаються проводити розрахунки маси, об'єму, кількості речовини реагентів та продуктів реакції за хімічними рівняннями.

Для кращого засвоєння знань учнями в темі передбачено проведення дванадцяти демонстрацій, шести лабораторних дослідів та однієї практичної роботи. Для вчителя в даний час такі види роботи при впровадженні в дистанційний процес навчання є найскладнішими, адже досліди показані на екрані комп'ютера не можуть викликати такого ефекту як досліди проведені власноруч або побачені своїми очима. Таким чином щоб забезпечити ефективне та результативне проведення таких уроків вчитель має знайти (або

зняти)якісно відзняте відео дослідів, продемонструвати його коментуючи так щоб учням було зрозуміло що відбувається на екрані та провести аналіз досліду з учнями.

Також, ефективним чинником формування експериментальних умінь в умовах дистанційного навчання стає домашній хімічний експеримент, проведення якого зможуть забезпечити речовини з аптеки, магазини побутової хімії та продовольчих товарів, ветеринарні та квіткові магазини. Самостійне проведення простого, навіть примітивного експерименту дозволить здобувачам вищої освіти сформувати основні види експериментальних умінь, сформувати первинний експериментальний досвід, зацікавити учнів до вивчення хімії, сформувати інтерес до пізнання природи.

1. Навчальна програма з хімії для загальноосвітніх навчальних закладів (затверджено Наказом Міністерства освіти і науки України від 07.06.2017 № 804). / *Укладачі програми (2012 р.):* Величко Л.П., Дубовик О.А., Котляр З.В., Муляр С.П., Павленко В.О., Свинко Л.Л., Титаренко Н.В., Ярошенко О.Г. *Над оновленням програми (2017 рік) працювали:* Величко Л.П., Дубовик О.А., Бобкова О.С., Баланенко В.В., Пугач С.В., Рогожнікова О.В.

2. Методика викладання шкільного курсу хімії: Посібник для вчителя / Н. М. Буринська, Л. П. Величко та ін.; За ред. Н. М. Буринської. – К. : Освіта, 1991. – 350 с.

3. Сайт для вчителів хімії міста Києва. [Електр. ресурс]. – режим доступу: <http://chemists.ipko.kubg.edu.ua/>

4. Розробки з хімії. [Електр. ресурс]. – режим доступу: <https://naurok.com.ua/biblioteka/himiya>

СПОСОБИ ПЕРЕВІРКИ РІДИННИХ ТЕРМОМЕТРІВ

Свиридюк А.В., Євдоченко О.С.

Житомирський державний університет імені Івана Франка, SVIRIDYUKALISA02@gmail.com

Температура – це скалярна фізична величина, яка є характеристикою середнього значення кінетичної енергії реального тіла в будь-якому агрегатному стані(твердому, газоподібному, рідкому). Вимірювання температури дуже важливий процес в проведенні хімічних дослідів. Оскільки температура не є конкретною фізичною величиною, для того, щоб її визначити, температуру перетворюють в іншу вимірювану фізичну величину. Для цього використовують різні речовини, фізичні властивості яких залежать від температури. Найчастіше користуються перетворенням температури в електричний сигнал, який можна буквально зареєструвати простими методами. Обширно використовують також властивість газів і рідин змінювати свій об'єм за зміни температури, що лежить в основі газових і рідинних термометрів. Здатність обраної речовини реагувати на зміну температури називається термометричною властивістю. Існують два методи вимірювання температури: контактний і безконтактний. Вимірювання температури проводять термометрами різного типу, які можна згрупувати таким чином:

Дилатометричні (термометрична властивість – зміна об'єму);

Манометричні (термометрична властивість – зміна тиску);

Електричні (термометрична властивість – зміна рухливості електронів);

Пірометри (термометрична властивість – зміна випромінювання);

Термохімічні (термометрична властивість – зміна спектру поглинання внаслідок фазового переходу) [2].

Найпопулярнішими та найпростішими серед приладів для вимірювання температури є рідинні термометри (підвид дилатометричних), де термометричною рідиною є металева ртуть, ртутні альмагами, спиртові розчини та ін. Сучасні термометри складаються з майже циліндричного резервуара, заповненого рідиною і вакуумної капілярної трубки. Ртутні термометри набули широкої популярності через високу теплопровідність, малу теплоємність металевої ртуті та значний температурний діапазон рідкого стану. Ртутні термометри можуть

бути паличковими і трубчастими. Вони не мають високої точності вимірювання, але вони зручні, хімічно і термо стійкі.

Вимірювання температури вимагає дотримування обережності та правил, адже дані прилади є достатньо чутливими. Ртутні термометри термічно інертні та не відразу сприймають температуру навколишнього середовища. Тому необхідно чекати поки вся ртуть в термометрі прийме температуру середовища, в якому він знаходиться. Не можна нагрівати термометри вище максимальної температури, зазначеної на шкалі, адже це може спричинити поломку капіляра або спотворення показань термометра в подальшому. Ще одне важливе правило – не допускати різкого охолодження термометра, який перед цим був нагрітим. Значним недоліком скляних термометрів є зміна показань з часом через старіння скла, у результаті якого відбувається зміна об'єму ртутного резервуара і капіляра, що призводить до зсуву нульової відмітки [1]. Правильність показників термометра час від часу необхідно перевіряти, порівнюючи їх з показниками еталонного термометра. Часто термометри перевіряють, визначаючи температури кипіння або плавлення хімічно чистих речовин, підібраних таким чином, щоб охопити великі інтервали температур.

У нашому дослідженні ми перевіряли правильність показань термометра лабораторного ТЛС 2 з діапазоном $-30...+70^{\circ}$, визначаючи нульову точку за шкалою Цельсія шляхом занурення термометра в дистильовану воду з льодом. Для цього в стакан на 300 мл помістили ретельно подрібнений лід (отриманий замороженням дистильованої води) додатково промитий охолодженням до 0° дистилатом. Лід мав вигляд густої каші. При визначенні нульової точки не допускали, щоб лід плавав у воді, для цього стакан з льодом додатково помістили у більший стакан на 500 мл з такою ж льодяною кашею. Зробивши заглиблення дерев'яною паличкою вставили термометр у лід таким чином, щоб нульова точка дещо виступала. Термометр залишили на 10 хвилин (перед відліком показань по термометру необхідно злегка постукати дерев'яною паличкою). Показання знімали тричі [3].

Таблиця

Значення нульової точки термометра ТЛС 2 за шкалою Цельсія

Спроби	1	2	3	Середнє значення $t^{\circ}\text{C}$
Значення температури $t^{\circ}\text{C}$	-0,5	-0,5	-0,5	-0,5

Абсолютну похибку показань температури визначали за формулою:

$$\Delta = |N_{\text{дійсн}} - N_{\text{вим}}|, \quad \Delta = |0 - 0,5| = 0,5$$

Таким чином, абсолютна похибка термометра лабораторного ТЛС 2 з діапазоном $-30...+70^{\circ}$ становить 0,5, це необхідно враховувати під час його використання, та обов'язково вводити відповідну поправку, а саме всі показники даного термометра збільшувати на $0,5^{\circ}$.

Показання термометрів можна перевіряти по еталонному термометру, поміщаючи обидва термометри у киплячу дистильовану воду або в розтоплений до 250° парафін, в залежності від діапазону показників термометрів. Ще одним із важливих виправлень показників термометра є виправлення на виступаючий стовпчик ртуті з використанням термометра Аншютца.

Для контролю перебігу та умов проведення експериментів необхідно дотримуватись правил використання вимірювальних приладів та обов'язково проводити їх перевірку. Існує багато способів перевірки правильності показників приладів для вимірювання температури та зокрема ртутних термометрів. Але перед початком роботи навіть з новим термометром його необхідно перевірити та враховувати поправку при зніманні показників значення температури.

1. Косогін О.В., Лінючева О.В., Мірошніченко Ю.С. Техніка хімічного експерименту Київ : КПІ ім.Ігоря Сікорського, 2019 – 387 с.
2. Рачинский Ф. Ю., Рачинская М. Ф. Техника лаборат. работ. – Л.: Химия, 1982 – 432.
3. Степин Б. Д Техника лабораторного эксперимента в химии: Учеб. пособие для вузов. М.: Химия, 1999. - 600 с.

МЕТОДИКА ТА ЗАСОБИ ДИСТАНЦІЙНОГО ВИВЧЕННЯ ТЕМИ «ПЕРІОДИЧНИЙ ЗАКОН ТА ПЕРІОДИЧНА СИСТЕМА ХІМІЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ» КУРСУ ХІМІЇ ЗАКЛАДУ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ

Свиридюк А.П., Анічкіна О. В.

Житомирський державний університет імені Івана Франка, sviridiuk.n@ukr.net

Дистанційне навчання стає дедалі більш актуальною формою навчання на всіх рівнях освіти. Активне впровадження такої форми навчання в освітній процес вимагає пошуку нової методики та засобів ефективного засвоєння учнями навчальних предметів із урахуванням їх специфіки. Особливо гостро постає питання вивчення предметів природничого та практичного характеру, одним із яких є хімія. Багатоманіття тем, передбачених навчальною програмою з хімії для закладів загальної середньої освіти, вимагає використання вчителем різноманітних методів і засобів у межах дистанційного навчання. Особливої уваги потребує вивчення теми «Періодичний закон та періодична система хімічних елементів». Адже, саме ця тема є основою вивчення курсу хімії закладу загальної середньої освіти в цілому. Особливість вивчення теми «Періодичний закон та періодична система хімічних елементів» полягає в теоретичному спрямуванні, значній абстрактності понять, неможливості демонстрування реальних об'єктів, які вивчаються. Отже, з'являється необхідність у використанні ефективних засобів наочності для пояснення абстрактних понять, зображення надмалих частинок тощо [1].

Використання інформаційно-комунікаційних технологій в ході навчання хімії розглядається різними авторами як спосіб створення додаткових умов для вивчення хімії не лише під час дистанційного, але і очного навчання, появу нових завдань та оновлення цілей навчання [2, 3]. Дослідження науковців різних країн свідчать про покращення сприйняття та засвоєння знань учнями з теми «Періодичний закон та періодична система хімічних елементів» при застосуванні наочних, графічних та ігрових форм та методів роботи [4].

Поступово і в українських школах вдосконалюються та впроваджуються різноманітні платформи та ресурси для дистанційного вивчення школярами періодичного закону. Цей процес значно прискорився в зв'язку з дією карантинних обмежень протягом тривалого часу, що унеможливило відвідування навчальних закладів учителями та учнями. Таким чином, активізувалась розробка та вдосконалення вчителями різноманітних онлайн-ресурсів для вивчення періодичного закону та періодичної системи хімічних елементів [5-7]. Такі ресурси розробляються, у тому числі, на сайтах закладів освіти та дають можливість дистанційно проводити уроки, реалізуючи основні цілі навчально-виховного процесу та навчального предмету.

Однак, можливість розробляти та впроваджувати інноваційні методи роботи з учнями в ході вивчення хімії, напряму залежить не лише від фахової підготовки вчителя, але й від його обізнаності та вмінні використовувати комп'ютерні технології в освітньому процесі [8, 9]. Адже комп'ютеризація життя сучасних учнів призводить до «нецікавості» усього, що не передбачає використання комп'ютера, смартфона та мережі Інтернет. Тому учителю доречно залучати учнів до навчального процесу саме через інформаційно-комунікаційні технології. Крім пояснення нового матеріалу, перевірки знань, учитель може залучати учнів до створення сайтів, ігор, тестів, презентацій тим самим реалізуючи міждисциплінарні зв'язки, та роблячи вивчення хімії цікавішим. Такі форми та методи роботи можуть бути впроваджені не лише у межах аудиторного вивчення хімії, але і під час позакласної, індивідуальної та проектної роботи.

З огляду на це, вважаємо доцільним трансформування змісту теми в низку електронних ресурсів. Так, теоретичний матеріал теми варто представити в вигляді блок-схем і таблиць, саме це дозволить системно та наочно викладати матеріал в ході он-лайн уроків, включати в електронні презентації до уроків і представлення проєктів, дозволить учням самостійно працювати вдома над заповненням схем і таблиць тощо. Ілюстрації будови атома виконані з допомогою елементів доповненої реальності (англ. augmented reality, AR) дозволить учням

усвідомити внутрішню структуру як малоелектронних так і багатоелектронних атомів і рух електронів в них. Для формування розуміння зв'язків між фізичними властивостями простих речовин і будовою їх атомів і молекул, ознайомлення із фізичними властивостями основних простих речовин необхідним буде використання кібер-колекцій. Обов'язковим є демонстрація відеороликів хімічних експериментів, які засвідчать зміни властивостей речовин у періодах і групах, дозволять пов'язати властивості хімічних речовин, елементів що їх утворюють і будову їх атомів. Контроль засвоєння знань зручно та швидко можна проводити з допомогою тестів у Google-формах, це дозволить розмістити в тесті зображення періодичної системи та необхідних малюнків у якості запитань або відповідей, що дозволить сформулювати уявлення учнів про складні теоретичні поняття теми. Для емоційного розвантаження, зацікавлення, підтримання уваги в ході вивчення складної теоретичної теми доцільним буде використання електронних дидактичних ігор на створення пар, формування логічної послідовності, упізнавання тощо, як в урочній так і позаурочній роботі.

1. Лукашова Н. Еволюція методики вивчення періодичного закону / Н. Лукашова, Н. Буринська. // Біологія і хімія в рідній школі. – 2014. – №4. – С. 41–45.
2. Биков В.Ю. Моделі організаційних систем відкритої освіти : монографія / В.Ю. Биков. – К. : Атіка, 2009. – 684 с.
3. Ставицька І. В. Інформаційно-комунікаційні технології в освіті [Електронний ресурс] / І. В. Ставицька // Національний технічний університет України «КПІ» – Режим доступу до ресурсу: <http://confesp.fl.kpi.ua/node/1103>.
4. Roddy P. K. High school chemistry students' learning of the elements, structure, and periodicity of the periodic table: contributions of inquiry-based activities and exemplary graphics : дис. докт. пед. наук / Roddy Phares Knight – Louisiana, 2003. – 287 с.
5. Сайт викладача хімії [Електронний ресурс] : [Веб-сайт]. – Електронні дані.– Режим доступу:<https://sites.google.com/view/kuzmenkoolga/%D0%B3%D0%BE%D0%BB%D0%BE%D0%B2%D0%BD%D0%B0%D1%81%D1%82%D0%BE%D1%80%D1%96%D0%BD%D0%BA%D0%B0?authuser=0>.
6. Отримання знань [Електронний ресурс] : [Веб-сайт]. – Електронні дані.– Режим доступу : <https://disted.edu.vn.ua/courses/learn/10294>
7. Нова освіта [Електронний ресурс] : [Веб-сайт]. – Електронні дані.– Режим доступу : <https://osvitanova.com.ua/posts/3586>.
8. Анічкіна О. В. Використання електронних колекцій в процесі вивчення хімічних дисциплін у вищій школі. In: Problems and achievements of modern science: International scientific-practical conference, Cork, Ireland.-2019.
9. Авдєєва О. Ю. Підготовка майбутнього вчителя хімії до застосування інноваційних технологій. In: Сучасні тенденції навчання хімії: V Науково-методична конференція, 29 березня 2019 р, Львів.

МЕТОДИКА ТА ЗАСОБИ ДИСТАНЦІЙНОГО ВИВЧЕННЯ ТЕМИ “КИСЕНЬ” КУРСУ ХІМІЇ ЗАКЛАДУ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ

Свідерська Т.С.

Житомирський державний університет ім.І.Франка, tat.sviderskaya@gmail.com

Вирішення нових освітніх завдань в житті українського суспільства, вимагає вироблення відповідної організаційної структури системи освіти, яка б не тільки забезпечувала знаннями, а реалізувала принцип «освіта упродовж усього життя». Тому школа має собою представляти соціальний інститут, однією з основних цілей якого має стати підготовка фахівця, здатного до самоосвіти і швидкого, гнучкого реагування у динамічному середовищі. Виходячи зі сказаного особливого значення набуває впровадження дистанційних форм і засобів навчання [2].

Дистанційне навчання – це інтерактивна взаємодія з використанням комп'ютерних і телекомунікаційних технологій, які забезпечують взаємодію учителів та учнів на різних етапах навчання, доставку учням основного обсягу навчального матеріалу та самостійну роботу з навчальними матеріалами [2].

Зокрема, для вивчення теми “Кисень” у 7 класі закладу загальної середньої освіти доцільним буде спочатку використати короткі відеолекції (до 15 хвилин) або он-лайн уроки на задану тему, вміст яких повинен бути спрямований на полегшення опанування та вивчення учнями нової теми [2]. Теоретичний зміст теми представлений у підручниках, посібниках і інших джерелах інформації, тому вчителю необхідно допомогти учням усвідомити та систематизувати необхідні знання. У відеолекціях на тему “Кисень” має бути розкрито перелік тем, відповідно до діючої програми з хімії для закладів загальної середньої освіти [2].

У ході такої роботи вчитель може допомогти розібратися в новому теоретичному матеріалі, роз'яснити основні проблемні питання, використати в якості ілюстративного матеріалу відеоролики хімічних експериментів із відповідним коментуванням. Використати схеми, малюнки, зображення, фото для забезпечення можливості схематизувати великий обсяг теоретичної інформації [2]. Це є фазою мотивації, а також фазою побудови знань [1].

Не менш важливим під час дистанційного навчання є безпосередній контакт з учнями за допомогою технічних засобів навчання. Доволі зручним ресурсом для цього є електронна платформа Zoom, яка допомагає організувати відеоконференції, до яких можуть долучитися учні усього класу [2]. Тут може бути проведена організаційна фаза, фаза побудови знань та фаза структурованого огляду. На відеоконференції можна детально розібрати та домогтися засвоєння теми «Кисень» за допомогою методу «незакінчених речень» або вправи «Мікрофон», «Мозковий штурм» [1].

Дистанційне навчання передбачає не лише самостійне опанування учнями навчальним матеріалом, але й контроль, з боку вчителя, рівня оволодіння новими знаннями. Для цього в нагоді можуть стати тестові завдання, що створені за допомогою Google-форм [2]. Тестові завдання можуть бути у вигляді гри «Коректор» (обери зайве), вправи «Шпаргалка» (з'єднати правильні відповіді), «Пари», «Перегони» тощо, а також у вигляді звичайних тестів. Це є фазою консолідації [1].

Таким чином, говорячи про якісно організоване дистанційне навчання, потрібно відмітити, що воно буде ефективним тоді, коли реалізується сукупність наступних дій: учитель надає учням матеріал для опанування нової теми, проводить он-лайн уроки для забезпечення тлумачення теоретичних відомостей, контролює успішність засвоєння інформації з допомогою он-лайн або оф-лайн тестувань, консультує учнів із незрозумілих питань або питань, які викликали значні утруднення та дає можливість швидко доповнити свої відповіді новою інформацією й провести коригування помилок. Реалізувати в навчальному процесі таке значне інформаційне навантаження допоможуть інформаційні, комп'ютерні та інноваційні педагогічні технології за умови їх широкого використання в викладанні хімії в закладі загальної середньої освіти.

1. Деленко О.Л. Розробки уроків до теми "Кисень". *Освітній проєкт На Урок* – URL: <https://naurok.com.ua/rozrobki-urokiv-tema-kisen-139397.html> (дата звернення 31.03.2021).

2. Учителю хімії – на допомогу в організації процесу навчання учнів під час карантинних заходів. Сумський обласний інститут післядипломної освіти: веб-сайт. URL: <http://www.soippo.edu.ua/index.php/34-2010-11-24-15-07-23/3752-uchitelyu-khimiji-na-dopomogu-v-organizatsiji-protsesu-navchannya-uchniv-pid-chas-karantinnikh-zakhodiv> (дата звернення 31.03.2021).

СТРАТЕГІЯ ВПРОВАДЖЕННЯ ЗМІШАНОГО НАВЧАННЯ В ОСВІТНІЙ ПРОЦЕС ХІМІЧНИХ ФАКУЛЬТЕТІВ ЗВО

Солдаткіна Л.М.

Одеський національний університет імені І.І.Мечникова, soldatkina@onu.edu.ua

В останні роки широке застосування інформаційно-комунікаційних технологій (ІКТ) в закладах вищої освіти (ЗВО) стало важливим елементом у зв'язку з реформуванням української вищої освіти, а також в умовах поширення коронавірусу COVID-19. Це привело до реорганізації всіх навчальних дисциплін ЗВО, а сучасний освітній процес повністю перетворився в «змішане навчання». Враховуючи, що застосування змішаного навчання для студентів хімічних спеціальностей має певні особливості, викладачі ЗВО повинні вміти працювати зі студентами на будь-якій відстані, тому що сучасний навчальний простір знаходиться не тільки в аудиторії чи хімічній лабораторії, а він усюди, де є Інтернет.

Аналіз наукових публікацій щодо проблематики змішаного навчання дозволив узагальнити різні комбінації змішаного навчання та розглянути можливість їх застосування при навчанні студентів на хімічних факультетах ЗВО:

1. Змішування традиційного та дистанційного навчання із застосуванням «перевернутого класу». Навчальні матеріали з хімічних дисциплін (лекції, презентації, методичні вказівки до практичних завдань, розрахункові завдання, тестові завдання, відеоматеріали та ін.) розміщуються на навчальних платформах, наприклад, Moodle, Google Class або ін.

2. Змішування індивідуального і групового навчання. При виконанні розрахункових лабораторних робіт, студенти-хіміки не тільки забезпечені необхідними інструктивними матеріалами і відеоматеріалами з лабораторної роботи, але є активна взаємодія між студентами і викладачем, яка дозволяє глибше розібратися в навчальному матеріалі і отримати певні компетенції.

3. Змішування внутрішнього і зовнішнього контенту. Інколи доцільним є застосування не тільки навчальних дисциплін, розроблених викладачами хімічного факультету в ЗВО, де навчається студент, але ефективним може бути опановування онлайн курсів на платформах Coursera, Prometheus та ін.

4. Змішування формального та інформального навчання. ЗВО, де навчається студент, забезпечує формальне навчання і надає студенту пакет навчальних матеріалів, в цьому разі гарантується певна траєкторія навчання. В свою чергу, інформальне навчання для студентів хімічних факультетів може відбуватися або на робочому місці, а саме в хімічній лабораторії, або у вільний час, як самоосвіта. Тобто неважливо, яким чином будуть отримані знання і вміння, а головне, щоб вони у студента були.

Стратегія впровадження змішаного навчання для певної навчальної дисципліни в галузі хімії має включати наступні етапи: 1) аналіз робочої програми навчальної дисципліни й розподіл навчального матеріалу на очну та дистанційну частини, встановлення обсягу навчального часу для кожної теми; 2) розробка необхідних навчальних матеріалів (лекції, презентації, методичні вказівки до практичних і лабораторних робіт, тестові завдання, відеоматеріали; 3) вибір навчальної платформи; 4) вибір моделей змішаного навчання; 5) організація інтерактивної діяльності студентів під час виконання різних типів навчальних завдань (практичних і лабораторних робіт та ін.); 6) контроль якості освітнього процесу.

Таким чином, стратегія впровадження змішаного навчання потребує від всіх учасників освітнього процесу цілеспрямованої роботи. Для викладача ЗВО відведена роль розробника сценарію проведення занять у формі змішаного навчання і він має врахувати особливості навчальної дисципліни при застосуванні такої форми навчання. Досвід останніх років показав, що при змішаному навчанні у студентів формуються навички адаптуватися та діяти в новій ситуації, опановувати навчальний матеріал самостійно, використовувати ІКТ у хімічних дослідженнях і професійній діяльності.

МЕТОДИЧНІ ОСОБЛИВОСТІ ВИКОРИСТАННЯ ІНОЗЕМНОЇ МОВИ ПІД ЧАС ВИВЧЕННЯ ХІМІЇ В СУЧАСНОМУ ЗАКЛАДІ СЕРЕДНЬОЇ БАЗОВОЇ ОСВІТИ

Софіюк С.В., Денисюк Р.О.

Житомирський державний університет імені Івана Франка, is.savts@gmail.com

Хімічна освіта є важливою складовою формування наукового світогляду та культури молодого покоління. Хімічні знання сприяють пізнанню особливостей взаємодії людини з різноманітними речовинами та застосування новітніх матеріалів і технологій у повсякденному житті.

Новий Державний стандарт базової середньої освіти, який набуде чинності з 1 вересня 2022 р., серед ключових компетентностей здобувачів освіти передбачає «компетентності у галузі природничих наук, техніки і технологій, що передбачають формування наукового світогляду; здатність і готовність застосовувати відповідний комплекс наукових знань і методології для пояснення світу природи; набуття досвіду дослідження природи та формулювання доказових висновків на основі отриманої інформації; розуміння змін, зумовлених людською діяльністю; відповідальність за наслідки такої діяльності» [1]. Відповідно, уже сьогодні актуальними є розробка та впровадження нових технологій навчання природничих дисциплін, зокрема хімії, які будуть продуктивними в реалізації компетентнісного потенціалу предмета.

У навчальній програмі з хімії для 7 – 9 класів серед ключових компетентностей, якими мають оволодіти здобувачі освіти, визначено спілкування іноземними мовами, що передбачає формування ряду вмінь («читати й розуміти іншомовні навчальні й науково-популярні тексти хімічного змісту; створювати тексти повідомлень із використанням іншомовних джерел; читати іноземною мовою і тлумачити хімічну номенклатуру; пояснювати хімічну термінологію іншомовного походження» [2]) і ставлень («цікавитись і оцінювати інформацію хімічного змісту іноземною мовою; обговорювати деякі питання хімічного змісту із зацікавленими носіями іноземних мов» [2]).

Подібні вміння зазначені і в новому Державному стандарті базової середньої освіти для природничої освітньої галузі (додаток 9 до Державного стандарту) [1]. Тому вважаємо, що інтеграція іноземної мови в шкільну хімічну освіту допоможе розширити світогляд здобувачів, сприятиме пізнанню нового, формуванню практичної спрямованості хімічних знань у сучасному житті.

Зараз, в умовах пандемії COVID-19, триває пошук шляхів задоволення освітніх потреб в умовах дистанційного та змішаного навчання. Перед учителями хімії постало надзвичайно складне завдання: структурувати роботу так, щоб, з одного боку, не знизився рівень знань із предмета, а з іншого – щоб не втратити зацікавленості здобувачів матеріалом.

Ще В.О. Сухомлинський зазначав: «Дуже важливо, щоб мислення учнів ґрунтувалось на дослідженні, пошуках...» [3]. Звернення до міжпредметних зв'язків, зокрема, залучення до використання іноземної мови на уроках хімії, інтеграція іншомовних знань відіграє, на нашу думку, значну роль у формуванні навичок пізнавальної діяльності.

Робота, спрямована на впровадження освітніх можливостей іноземної мови під час вивчення хімії, може проводитись у двох основних напрямках. Перший – це залучення здобувачів освіти до аналізу походження назв хімічних елементів, термінів, а пізніше – хімічної номенклатури, адже робота з такою інформацією, безперечно, може спонукати активних і допитливих до подальшого пошуку, наприклад, дослідження діяльності Міжнародного союзу фундаментальної та прикладної хімії (IUPAC), сучасних наукових тенденцій [4].

Працюючи в цьому напрямку, з часом можна простежити, як від виконання найпростіших пошукових завдань школярі переходять до підготовки дослідницьких та творчих проєктів, мультимедійних презентацій, постерів. Навіть дослідження походження назв хімічних елементів, у цікавій формі запропоноване вчителем, може відкрити багато перспектив: спонукати до аналізу наукової діяльності вчених, пізнання етапів розвитку хімії

як науки, формувати науковий світогляд, розвивати творче мислення, ініціативність, індивідуальні здібності та самостійність.

Другий напрям упровадження освітніх можливостей іноземної мови у вивчення хімії – це робота з іншомовними навчальними й науково-популярними джерелами. Безсумнівно, можливості цього напрямку тісно пов'язані з рівнем володіння здобувачами іноземною мовою (мовами), тому передусім учитель хімії має проаналізувати цей рівень і добирати джерела інформації відповідно до вікових та індивідуальних особливостей своїх учнів, а також спонукати до самоосвіти, відвідування курсів, вебінарів, майстер-класів, які допоможуть підвищити рівень володіння іноземними мовами.

Методично правильно організована робота з іншомовними джерелами на уроках хімії може стати поштовхом до подальшої участі здобувачів у міжнародних освітніх програмах, конкурсах наукових робіт, що відкриє перед ними чудові можливості для самореалізації.

Незважаючи на недоліки дистанційного навчання та труднощі, з якими стикаються й педагоги, і здобувачі освіти, воно відкриває перед нами й нові можливості. Зокрема, це стосується використання іноземної мови у процесі вивчення хімії.

Безсумнівно, в умовах дистанційного навчання вчитель хімії може впроваджувати обидва зазначені вище напрями роботи, пропонуючи при цьому цікаві інтерактивні методи навчання. До того ж, при використанні комп'ютерних програм для створення хімічних формул, при роботі з інтерактивними аркушами, інтелектуальними картами, перегляді пізнавальних відеоматеріалів від провідних навчальних та наукових закладів світу здобувачі усвідомлюють необхідність володіння іноземною мовою як засобом спілкування та розуміння, а також як ключем до необхідних джерел інформації.

Нами запроваджено підготовку та запис аудіоподкастів із презентаціями з хімії за програмою 7 – 9 класів із використанням можливостей іноземних мов. Наприклад, деякі навчальні матеріали супроводжуються завданнями-загадками із заміною певних ключових понять іншомовними (англійською та німецькою мовами); подано приклади розв'язування хімічних задач із іншомовними назвами чисел та дій; запропоновано ідеї експериментально-дослідницьких проєктів, для реалізації яких необхідно ознайомитися з іншомовними науково-популярними джерелами тощо.

Вважаємо, що подібні розробки сприятимуть розвитку інтелектуальних здібностей здобувачів освіти, посилять їх зацікавленість у підвищенні рівня хімічних знань, допоможуть подолати мовні бар'єри та стануть чудовим стимулом для безперервного пізнання нового.

1. Державний стандарт повної загальної середньої освіти // https://osvita.ua/legislation/Ser_osv/76886/

2. Хімія 7 – 9 класи. Навчальна програма для загальноосвітніх навчальних закладів, затверджена Наказом Міністерства освіти і науки України від 07.06.2017 № 804 // <https://osvita.ua/school/program/program-5-9/56133/>

3. Ідеї В.О.Сухомлинського і становлення нової української школи (До 100-річчя від дня народження В.О. Сухомлинського) Матеріали студентської науково-теоретичної конференції Корсунь-Шевченківського педагогічного коледжу. – Корсунь-Шевченківський, 2018. – 69 с.

4. Ковтун О. Номенклатурні системи в контексті розвитку теоретичних уявлень в органічній хімії / Олена Ковтун, Валентина Толмачова, Михайло Корнілов та ін. // Проблеми української термінології: міжнар. наук. конф., 27–29 верес. 2012 р.: зб. наук. пр. – Л., 2012. – С. 73–77.

КОМБІНОВАНІ ХІМІКО-МАТЕМАТИЧНІ ЗАДАЧІ В БРАЗИЛЬСЬКОМУ СТИЛІ НА ФУТБОЛЬНУ ТЕМАТИКУ

Ткач В.В.¹, Кушнір М.В.^{1,2}, Мінакова Т.Г.², Сокол Н.В.², Іванушко Я.Г.³

¹Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича

²Чернівецька гімназія №5, Україна

³Буковинський державний медичний університет

Останнім часом, діти поступово втрачають інтерес до вивчення точних та природничих наук. Це пояснюється рядом об'єктивних та суб'єктивних факторів, одним із яких є недосконалість традиційного педагогічного підходу до учнів.

Одним із засобів зацікавлення учнівської аудиторії до пояснюваного матеріалу є задіяння міжпредметних зв'язків. Хімічний матеріал дозволяє підібрати міжпредметні зв'язки хімії із будь-яким предметом шкільної програми – як природничо-математичного, так і суспільно-гуманітарного та мистецького циклу, включаючи фізичне виховання і спорт, що буде показано у даній роботі.

Футбол є чи не найпопулярнішим видом спорту на сьогодні. Його називають «грою мільйонів», «шахами під відкритим небом». Наразі – футбол – дещо більше, ніж просто спорт. Це ціла індустрія, функціонування якої неможливе без використання того чи іншого хімічного процесу.

У даній підбірці подано три комбіновані хіміко-математичні задачі на футбольну тематику.

1. Система автоматичного визначення голу – технологія, яка дозволяє визначити взяття воріт у футболі за допомогою спеціальних технічних засобів. Дана система стала актуальною після спірних моментом із перетином чи неперетином м'ячем лінії воріт. Подібні моменти виникли в фінальному матчі Англія – ФРН на Чемпіонаті Світу 1966 року, коли арбітр Тофік Бахрамов помилково зарахував гол в ворота збірної ФРН, який став вирішальним. Вже в матчі між тими ж командами на Чемпіонаті Світу у ПАР у 2010 році, коли ситуація була діаметрально протилежною – чистий гол збірної Англії, в якому м'яч, що перетнув лінію воріт збірної ФРН, відскочив назад у поле, не був зарахований арбітром, що стояв далеко від воріт, і на Євро-2012, коли чистий гол Марко Девича в ворота збірної Англії не було зараховано.

Існують декілька варіантів конструкції такої системи. За одним із них в площині воріт створюється магнітне поле, яке діє на мікрочіп, розміщений у м'ячі. Під дією магнітного поля у мікрочіпі створюється електричне коло, яке активує сенсор, розміщений на годиннику арбітра, фіксуючи взяття воріт.

Для цієї системи використовується помірно сильний феромагнетик – такий як Хром (IV) оксид. Його отримують розкладом Хром (III) нітрату за реакцією:



Утворений Хром діоксид, подібно до заліза, є чутливим до магнітного поля, через що його можна використати у системі фіксації голу.

- 1.1. Збалансуйте рівняння реакції отримання Хром діоксиду і розв'яжіть рівняння $x^2 - (a+b)x - 3(c+d) = 0$.

Для відповідної функції знайдіть:

- Область визначення функції
- Область значень функції
- Координати вершини парабол
- Область додатніх та від'ємних значень функції

1) З допомогою теореми Вієта, покажіть, що корені рівняння мають різні знаки.

2) Чи дорівнює дискримінант даного рівняння молярній масі вапняку?

3) Скласти та розв'язати квадратне рівняння, коренями якого є суми коефіцієнтів при реагентах та продуктах першої і другої реакцій

1.2. Щодо реакції, вкажіть невірне твердження:

- а) У даній реакції відбувається зміна ступеня окиснення одразу усіх елементів, атоми яких присутні у реагуючій речовині
- б) У даній реакції окисником є тільки один елемент, інші два є відновниками
- в) При розкладі 17 г Хром (III) нітрату утвориться Хром діоксид, маса якого на 11 грамів менша.
- г) При розкладі Хром (III) нітрату утворюється сполука, в якій ступінь окиснення Хрому дорівнює + 6
- д) При розкладі Хром (III) нітрату утворюються дві газоподібні речовини, одну із яких називають «бурим газом» або «лисячим хвостом».

1.3. При розкладі певної маси Хром (III) нітрату утворюється Хром діоксид і газоподібна речовина, яка за н.у. займає посудину в формі паралелепіпеда. В основі паралелепіпеда знаходиться паралелограм, діагональ якого перпендикулярна до його сторони і складає 21 см. Сама сторона дорівнює 28 см. Висота призми складає 32 см. Знайдіть початкову масу Хром (III) нітрату та масу утвореного Хром діоксиду.

2. Бутси – це спеціальне взуття для гри у футбол та регбі. Основною їх відмінністю від звичайного взуття є наявність шипів на підошві для підвищення стійкості. Спершу бутси були металевими, однак вже в 1863 році використання бутс з металевими шипами було заборонено, з огляду на високу травматичність при силовому контакті. Тепер для шипів бутс використовується карбамати (уретани) та їх полімери. Карбамати – заміщені похідні (естери та аміді) нестійкої за н.у. амінометанової кислоти (Рис. 1).

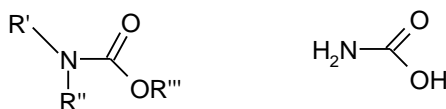
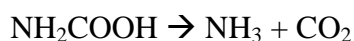


Рис. 1 Карбамати (зліва) та амінометанова кислота (справа)

Сама кислота стійка тільки за температур нижче -23° С. При нагріванні вона розкладається за реакцією:



Саме тому карбамати та їх полімери одержують не задіючи молекулу самої амінометанової кислоти.

2.1. Поясніть, чому амінометанова кислота, на відміну від аміноетанової (гліцину) є нестійкою і легко розкладається?

Щодо амінометанової кислоти та реакції її розкладу, вкажіть невірне твердження

- а) Ступінь окиснення Гідрогену в аміногрупі є позитивною, а в карбоксильній – негативною
- б) Амінометанова кислота містить зв'язок, аналогічний до пептидного
- в) Амінометанова кислота може утворити цвіттер-йон
- г) Амінометанова кислота є гомологом гліцину
- г) 41,3 г амінометанової кислоти складають її 0,7 моля

2.2. Еквімолярна суміш газоподібних амоніаку та Карбон діоксиду займає за н.у. призматичну посудину, в основі якої знаходиться рівносторонній п'ятикутник зі стороною 48 см. Висота призми складає см. Знайдіть початкову масу амінометанової кислоти, що розклалася з утворенням цього об'єму газів.

3. Хуліганство на футбольному полі та поза ним – одна із негативних сторін підтримки, яку фанати надають улюбленій команді. В пориві ненависті в випадку поразки своєї команди, або навпаки – у пориві святкування – фанати здатні практично на усе – вандалізм, погроми, бійки з фанатами команд суперників, псування майна.

Саме тому на стадіонах і прилеглих територіях вся інфраструктура виробляється із матеріалів підвищеної міцності – «антивандальних». Одним із цих матеріалів є так званий

«полікарбонат» (Рис. 2.) – поліестер карбонатної кислоти та специфічного фенольного похідного, відомого як «бісфенол А».

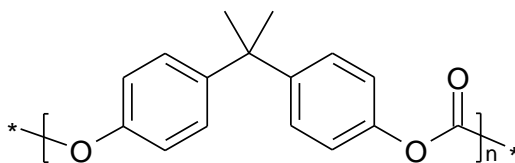


Рис. 2 Полікарбонат

Оскільки карбонатна кислота у вільному стані існує тільки у дуже специфічних умовах, полімер синтезують особливим шляхом. Спершу бісфенол А переводять у відповідний фенолят, а потім вводять його в реакцію з фосгеном. При цьому виділяється Натрій хлорид, а мономерні ланки «сшиваються» між собою.

3.1. Запишіть рівняння реакцій утворення бісфеноляту натрію та його реакції із фосгеном. Вкажіть на утворення естерної групи.

3.2. Щодо реакції та задіяних у ній речовин, вкажіть невірне твердження

а) Карбонатна кислота не відноситься до органічних кислот, оскільки не містить карбоксильної групи

б) Фосген відомий як дихлороангідрид карбонатної кислоти. Це надзвичайно отруйний газ, що використовується як бойова отруйна речовина

в) 12 г бісфенолу А складають його моль

г) Бісфенол А є ароматичною системою, знебарвлює бромну воду і вступає в реакції нітрування і сульфування

г) Бісфенол А взаємодіє як з активними металами, так і з лугами

3.3. Посудина в формі призми, в основі якої лежить шестикутник зі стороною 32 см, містить за н.у. газоподібний фосген. Він заповнює посудину на дві третини. В разі його продування крізь 1600 г 17% розчину утворюються 50 квадрильйонів однакових макромолекул. Знайдіть кількість ланок полікарбонату в кожній із таких молекул. Чи знаходиться фосген у надлишку?

МЕТОДИКА ТА ЗАСОБИ ДИСТАНЦІЙНОГО НАВЧАННЯ, ВИВЧЕННЯ ТЕМИ «ПОЧАТКОВІ ХІМІЧНІ ПОНЯТТЯ» КУРСУ ХІМІЇ ЗАКЛАДУ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ

Фірсовська Н.Ю., Анічкіна О. В.

Житомирський державний університет імені Івана Франка, Firsovskai@gmail.com

Внаслідок карантинних обмежень, пов'язаних з поширенням коронавірусу, усі учасники освітнього процесу активізували застосування сучасних технологій у процесі навчання як засіб комунікації. Активне включення в освітній процес засобів інформаційно-комунікаційних технологій уможливило здійснення освітнього процесу в умовах дистанційного навчання. Сучасний освітній процес вимагає від освітян пошуку нових методів і засобів ефективного викладання складного, теоретичного, абстрактного предмету – хімії. Теми, передбачені навчальною програмою з хімії для закладів загальної середньої освіти, дозволяють сучасному вчителю реалізовувати в практиці цілий арсенал різноманітних засобів, прийомів, методів і форм навчання адаптувавши їх до дистанційного формату.

Особливої уваги вчителів заслуговує тема «Початкові хімічні поняття», яка викладається відповідно до програми в 7 класі закладу загальної середньої освіти, адже саме вона знайомить учнів з навчальним предметом та вводить їх у світ речовин. Вивчення цієї теми стає фундаментом подальшого вивчення хімії в закладі загальної середньої освіти,

формує інтерес до предмету та науки, дозволяє зрозуміти роль хімії в житті кожної людини та суспільства в цілому. Особливістю теми «Початкові хімічні поняття» є вивчення теоретичного матеріалу з опорою на обов'язкові ілюстративні матеріали, оскільки явищ, фактів, прикладів хімічних речовин і реакцій учні ще не спостерігали і лише розпочинають сходження до хімічної науки. Тому, для уникнення схоластичності в навчанні, обов'язковим є широка ілюстрація слів вчителя, теоретичних відомостей підручника зображувальними матеріалами, хімічним експериментом, природними об'єктами.

Ускладненням даної теми виступає вивчення будови атома, хімічних елементів, ознайомлення з періодичною системою хімічних елементів Д. І. Менделєєва та хімічні формули [1]. Тож з'являється потреба у широкому використанні засобів наочності.

Сучасні засоби наочності відходять від матеріальних об'єктів, вони трансформуються в електронні засоби навчання, які становлять для учнів найбільшу цікавість. Використання інформаційних технологій у ході вивчення хімії можна розглядати, як спосіб створення умов для вивчення та зацікавленості учнів до хімії. На сьогодні в закладах загальної середньої освіти впроваджують різні платформи та ресурси для вивчення хімії. Використання різних онлайн-ресурсів дозволяє вчителям проводити цікаві уроки і спонукати учнів до самостійного навчання вдома. Але можливість впроваджувати інноваційні методи роботи зі школярами при вивченні хімії, залежить не тільки від професійності вчителя а й його вміння використовувати сучасні комп'ютерні технології [4,5]. Тому постає потреба у відповідній підготовці вчителя до професійної діяльності з використанням сучасних інформаційно-комп'ютерних технологій.

На сьогодні кількість ІТ-пристроїв зростає, досягає кількості в декілька разів більше ніж населення на планеті. Кожна людина в середньому володіє 3-4 гаджетами з доступом до мережі Інтернет, тому доцільним є залучати учнів до навчального процесу через використання девайсів [4]. Необхідно не тільки проводити вивчення нового матеріалу, перевірку знань учнів шляхом використання електронних засобів навчання на уроках, постає нагальна потреба залучати учнів до позаурочної роботи (створення проєктів, відеороликів, власних сайтів), а відповідно і до використання девайсів у ній. Саме можливість використати електронні пристрої в пізнавальному процесі, діджиталізація освіти, гейміфікація навчання дозволить збудити інтерес учнів до вивчення центральної природничої науки хімії та дозволить їм набути практичних умінь безпечного існування в світі хімічних речовин.

Для вивчення теми «Початкові хімічні поняття» в 7 класі закладу загальної середньої освіти можна використовувати такі методи та засоби:

1. Проведення он-лайн уроків на електронній платформі (найчастіше використовують платформу ZOOM, Google Classroom);
2. Розробка та використання електронних презентацій для ілюстрації та систематизації складного теоретичного матеріалу;
3. Створення електронних тестів для контролю та перевірки засвоєння навчального матеріалу (Google-форми);
4. Розробка електронних дидактичних ігор, онлайн-ігор для зняття емоційного стресу від вивчення нового предмету та створення позитивного психологічного клімату;
5. Створення електронних анімацій для пояснення та унаочнення окремих дій та операцій;
6. Створення відеороликів демонстраційних і лабораторних експериментів для ознайомлення учнів із фізичними та хімічними явищами, накопичення досвіду спостерігача за хімічними процесами;

Особливу увагу необхідно приділяти розробці саме дидактичних ігор. Оскільки учні 7 класу є достатньо інфантильними і переважним видом їх діяльності в сучасних умовах гаджетизації та гейміфікації є ігрова, основним засобом навчання може стати гра. Гра – найпростіший технічно та найбажаніший для учнів контент, що допомагає психологічно адаптуватись один до одного, сприяє поліпшенню клімату в колективі класу, знімає фізичну

втому та підтримує емоційне напруження учнів, дає можливість формувати дух навчання та взаємодопомоги, що дуже важливо при використанні дистанційного навчання [4].

Створення такої системи електронних засобів навчання до теми курсу хімії закладу загальної середньої освіти дозволить вчителю досягнути успіху у процесі вивчення хімії, адже дозволить опанувати необхідними теоретичними знаннями, сформує підвалини та забезпечить набуття хоч і простого але експериментального досвіду (виконання домашнього хімічного експерименту), забезпечить формування цікавості до пізнання оточуючого світу хімічним способом.

1. Савчин М. М. Підручник з хімії 7 клас / Марія - Віра Михайлівна Савчин. – Київ: Грамота, 2015. – 184 с.

2. Ефективна та зручна організація дистанційного навчання. « Всеосвіта» [Електронний ресурс] : [Веб-сайт]. – Електронні дані.– Режим доступу : <https://vseosvita.ua/>

3. Журнал онлайн-школа «На Урок» Дистанційне навчання під час карантину в середній школі. [Електронний ресурс] : [Веб-сайт]. – Електронні дані.– Режим доступу : <https://naurok.ua/student/blog?storinka=2>

4. Анічкіна О. В. Використання електронних колекцій в процесі вивчення хімічних дисциплін у вищій школі. In: Problems and achievements of modern science: International scientific-practical conference, Cork, Ireland.-2019.

5. Авдеева О. Ю. Підготовка майбутнього вчителя хімії до застосування інноваційних технологій. In: Сучасні тенденції навчання хімії: V Науково-методична конференція, 29 березня 2019 р, Львів.

ХІМІЧНИЙ ПОСУД: КЛАСИФІКАЦІЯ, ВИРОБНИЦТВО: УКРАЇНСЬКІ РЕАЛІЇ

Ходюк О. В.

Житомирський державний університет імені Івана Франка, sasahoduk1@gmail.com

Тема є досить актуальною, оскільки хімія – наука практична, тому під час вивчення того чи іншого явища доводиться проводити велику кількість дослідів аби встановити залежності, виявити особливості, отримати результат. Основною метою нашого дослідження було визначення центрів виготовлення хімічного посуду в Україні та різновиду продукції для проведення хімічного експерименту.

Нам були визначені основні українські підприємства, які спеціалізуються на виготовленні лабораторних скляних виробів для хімічних лабораторій та підприємств і проаналізовано їх асортимент і можливість забезпечення діяльності типової хімічної лабораторії. Найбільшим підприємством в Україні з випуску хіміко-лабораторного посуду є акціонерне товариство «Склоприлад», яке розміщене в місті Києві. Завод випускає наступні основні скляні прилади: ареометри загального та спеціального призначення, моновакуометри двотрубні, різноманітні рідинні термометри, електроконтактні термометри, гігromетри для вимірювання вологості і температури та інші прилади необхідні в кожній лабораторії. Підприємство виготовляє широкий спектр лабораторного посуду серед якого посуд, загального та спеціального призначення: бутлі з гвинтовою кришкою; ступки з пестом; воронки – лабораторні, ділильні; крапельниці; колби – Бунзена, Вюрца, Ерленмейєра, Кьельдаля, грушоподібні, круглодонні, гостродонні, плоскодонні; бювети; скляні лопатки та палички; піпетки – з двома кранами, типу ПС 178,2; пробірки – хімічні, біологічні, центрифужні, мірні; склянки – БПК, для реактивів; стакани високі та низькі різних об'ємів; скельця – годинникові, покривні, предметні; циліндри – для ареометрів, Снеллена; ексикатори; спиртівки СЛ-2; чашки – Конвея, Петрі. Мірний посуд представлений наступним асортиментом: бутирометри, бюретки, колби Кольрауша, колби мірні, мензурки, мікробюретки, мікропіпетки, мікропіпетки Салі, піпетки градуйовані, піпетки Мора, стакани мірні, циліндри. Окрім того, випускається посуд з пластику: мензурки з ручками, стакани, циліндри, банки промивні, чашки Петрі, кювети, пробірки хімічні, мікропробірки

Елендорфа, воронки, піпетки Пастера, транспортні пробірки з аплікатором. Окрім того завод виготовляє різні прилади та апарати: прямі та зворотні холодильники, пікнометри, апарати АКОВ-10, приймачі-уловлювачі, бюретки, апарати для аналізу кисню, прилади – для відбору рідин, визначення проб золота, активності вугілля, дозування рідин.

ПРАТ «Склоприлад» це бренд відомий не тільки в Україні, а й за її межами. Він успішно експортує продукцію в Молдову, Білорусь, країни Прибалтики, в Грузію, Вірменію, Азербайджан, Узбекистан, Болгарію та багато інших країн. Асортимент лабораторного посуду загального та спеціального призначення цілком достатній для забезпечення функціонування типової хімічної лабораторії. Також слід зазначити що підприємство має можливість виготовлення на замовлення окремих унікальних скляних приладів, що є необхідним для реалізації наукової роботи в закладах вищої освіти та наукових установах.

Потужним підприємством із виробництва хімічного та медичного скла на території України є ВАТ «Полтавський завод медичного скла», який ще з 1928 року виготовляє хімічний посуд. Асортимент продукції представлений скляними ампулами, мірним скляним посудом, пробірками хімічними, скляним лабораторним посудом, піпетками, нескладними технічними термометрами, а також скляними трубками, які використовують у виготовленні складніших хімічних приладів. Асортимент скляних виробів є порівняно незначним, тому забезпечити повністю типову хімічну лабораторію не вдасться, але кожна 5 пробірка в Україні вироблена на цьому підприємстві.

Найстарішим підприємством в Україні є Мар'янівський склозавод міста Житомира. Це підприємство задовольняє найвибагливіші вимоги споживачів в аптекарському посуді, адже випускає склянки різноманітні за об'ємом, формою та способами коркування. ПРАТ Костопільський завод скловиробів, виготовляє посуд медичного призначення. ТОВ «Марлен» Донецької області міста Маріуполя виготовляє лабораторний посуд, скляний фармацевтичний посуд. Асортимент продукції ПРАТ Біомедскло міста Житомира представлений широким переліком пляшок та банок для харчових продуктів і напоїв, фармацевтичних і медичних препаратів, основного лабораторного скляного обладнання.

Отже, найбільший асортимент лабораторного посуду виготовляється в місті Києві. Він активно представлений як видами, так і матеріалами, з яких виготовляється хімічний посуд. Також досить активно представлене виробництво лабораторного посуду в Полтаві, де спеціалізуються передусім на виготовленні скляного посуду. Інші заводи надають перевагу виробництву посуду спеціального призначення. Загалом, Україна має широкі можливості в забезпеченні хімічним посудом загального та спеціального призначення більшості видів хімічних лабораторій. Перспективи дослідження вбачаємо в аналізі точності вимірювального посуду, визначенні похибки вимірювання та відповідності його Державним стандартам України.

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ТИТРУВАННЯ РОЗЧИНІВ НА ЗАНЯТТЯХ АНАЛІТИЧНОЇ ХІМІЇ

Четвертак Т.Ю.

Медичний фаховий коледж Запорізького державного медичного університету,
shafranskaja@ukr.net

Вступ. Навчальні інтерактивні роботи дають змогу студентам проводити лабораторні хімічні досліди, які передбачені програмою курсу аналітичної хімії в коледжі, у трьохмірному просторі за рахунок використання інноваційних хмарних технологій.

Мета дослідження. Розкрити особливості моделювання процесів титрування розчинів на заняттях аналітичної хімії.

Матеріали та методи. Методами означеного дослідження моделювання процесів титрування розчинів визначено моніторинг хмарних платформ та уявний експеримент,

зокрема використання можливостей навчальної віртуальної платформи <https://virtual.edu.rsc.org> при вивченні хімічних процесів.

Отримані результати. З метою підвищення ефективності вивчення курсу «Аналітична хімія» майбутніми фармацевтами в умовах змішаної форми навчання, яке передбачене чинним законодавством під час пандемії, за рахунок оптимізації кількості та якості навчальних матеріалів, видозмінюються методики їх подання, а саме впроваджуються хмарні технології навчання.

Навчальною програмою курсу «Аналітична хімія» з підготовки фахівців освітньо-кваліфікаційного рівня «фаховий молодший бакалавр» спеціальність 226 «Фармація, промислова фармація» для передбачено 28 годин практичних занять та 24 години самостійної роботи, які включають виключно процеси титрування (кисотно-основного, окисно-відновного, осаджувального та комплексонометричного). Актуальність відпрацювання навичок титрування на хмарних платформах підсилюється специфікою змішаного навчання та переходом на дистанційну освіту при збільшенні статичних показників захворюваності в кожній окремій групі студентів.

Отже, за допомогою віртуальної платформи [Titration Screen Experiment](https://virtual.edu.rsc.org) (URL: <https://virtual.edu.rsc.org>) майбутніми фармацевтами опрацьовані наступні питання, які передбачені навчальною програмою курсу, а саме: сутність титриметричного аналізу; класифікація методів титриметричного аналізу; способи титриметричних визначень; лабораторний посуд, що використовується в титриметричному аналізі і вимоги ставляться до нього; калібрування мірного посуду; підвищення точності визначень за рахунок розчина-свідка; стандартні розчини; титр стандартного розчину; розрахунок титру за визначуваною речовиною; розрахунок молярної концентрації еквіваленту й титру розчину, якщо відомі маса речовини (m) у певному об'ємі розчину (V); поняття точки еквівалентності та точки кінця титрування, відмінність між ними; етапи процесу титрування; індикатори для встановлення кінця титрування; практичне застосування кривих титрування; види індикаторних похибок; способи визначення точки еквівалентності; стрибок титрування; фактори залежності величини стрибка титрування; вимоги до вихідних речовин в титриметрії; встановлення титру методом піпетування і методом окремих наважок; виготовлення розчинів стандартів з фіксаналів; індикатори при титруванні кислот та основ; зміна забарвлення індикаторів кислотно-основного титрування; показник титрування індикатора; інтервал зміни забарвлення індикатора; рівняння таутомерних перетворень індикаторів метилового оранжевого та фенолфталеїну під впливом рН середовища; особливості титрування слабких кислот; редокс-потенціал; стандартний, реальний та формальний потенціал; залежність величини редокс-потенціалу від співвідношення концентрацій окисленої та відновленої форм та від температури; розрахунки констант рівноваги реакцій; сутність перманганатометрії; стандартизація розчину перманганату калію; сутність йодометрії, броматометрії та хроматометрії; індикатори методів; інтервал зміни забарвлення та показник титрування окисно-відновних індикаторів.

Висновки. Таким чином, можливість використання навчальної віртуальної платформи <https://virtual.edu.rsc.org> при вивченні хімічних процесів в єдиному інформаційно-комунікативному освітньому середовищі дає змогу оптимізувати рівень викладання, покращити ефективність навчання та стимулювати майбутніх студентів до пізнавальної діяльності.

ФОРМУВАННЯ НАУКОВО-ДОСЛІДНИЦЬКОЇ КОМПЕТЕНТНОСТІ СТУДЕНТІВ ПРИ ВИВЧЕННІ ХІМІЇ

Швець О.Г., Івченко В.Д.

Сумський національний аграрний університет, olgvasenko@gmail.com

В сучасних умовах система вищої освіти України зазнає кардинальних змін, що полягають у переході від знаннєвої до компетентнісної парадигми. Компетентнісний підхід виконує операційну (виявлення окремих компетентностей), діяльнісно-технологічну (конструювання змісту навчання з урахуванням майбутньої професії), організаційну, діагностичну функції і розглядається як модель майбутньої ефективної роботи, соціальної взаємодії й адаптованості випускника.

Згідно з визнаною методологією TUNING виділяються 2 види компетентностей: академічні предметно-спеціальні (фахові) - *subject specific competences*. Визначають профіль освітньої програми та кваліфікацію, роблять кожну освітню програму індивідуальною; загальні - *generic competences, transferable skills*. Поєднують інструментальні (когнітивні, методологічні, технологічні та лінгвістичні здатності), міжособистісні (навички спілкування, соціальна взаємодія та співпраця) та системні (поєднання розуміння, сприйнятливості та знань, здатність планування змін для удосконалення систем, розроблення нових систем) [12].

Важливу роль у в структурі професійної компетентності випускника відіграє науково-дослідницька компетентність, як цілісна інтегративна якість особистості, що поєднує знання, уміння, навички, досвід діяльності дослідника, ціннісне ставлення та особистісні якості та виявляється в готовності й здатності здійснювати дослідницьку діяльність з метою отримання нових знань шляхом застосування методів наукового пізнання, застосування творчого підходу в цілепокладанні, плануванні, прийнятті рішень, аналізі та оцінці результатів дослідницької діяльності [3]. Формування дослідницької компетентності, згідно моделі М. Голованя, передбачає розвиток її компонентів: мотиваційно-ціннісного, емоційно-вольового, когнітивного, діяльнісного та рефлексійного.

Як зазначає С.Д. Белкіна, для формування науково-дослідницької компетентності найефективнішим визнається поєднання особистісно-орієнтованого і діяльнісного підходів, які реалізуються шляхом організації активної навчально-дослідницької діяльності студента згідно логіки наукового дослідження [1]. Погоджуємось із дослідницею щодо необхідності модернізації навчально-методичних матеріалів з метою приведення їх у відповідність завданню формування дослідницької компетентності студентів.

Вивчення хімії, як навчальної дисципліни неможливе без проведення хімічного експерименту. Він дозволяє оволодіти методами вивчення природного середовища та контролю його стану, екологічно безпечної роботи з речовинами, знезараження токсичних відходів. Так, на заняттях з хімії навчаємо студентів аналізувати ступінь хімічного забруднення продуктів харчування (наприклад, визначати кількість нітратів у фруктах та овочах, показник кислотності молока, меду та інших харчових продуктів), досліджувати твердість води, якісний склад ґрунтів, біологічних рідин тощо. Забезпечення формування, передбачених нормативними документами компетентностей, у тому числі і науково-дослідницької, у практиці викладання хімічних дисциплін реалізується за рахунок формування універсальних предметних компетенцій, а саме: використання одержаних найважливіших фактів, концепцій, принципів і теорій з хімії для розв'язання навчальних завдань якісного і кількісного характеру; з'ясування взаємозалежності між складом, будовою, властивостями і застосуванням сполук органічної та неорганічної природи та їх впливом на довкілля; володіння загальнонауковими та спеціальними хімічними методами дослідження із застосуванням сучасного хімічного обладнання; здійснення інтерпретації, оцінки та подання інформації щодо результатів дослідження у вигляді їх розрахункової, статистичної та графічної обробки; дотримання правил безпеки та здатність оцінювати ризик використання хімічних речовин.

У курсах спеціальних дисциплін студенти розвивають набуті універсальні хімічні компетентності та застосовують їх для вирішення професійно-орієнтованих питань майбутнього фаху та реалізації наукових досліджень.

Зрозуміло, що для ефективної організації науково-дослідної роботи студентів важливим є забезпечення навчальних лабораторій необхідним обладнанням і приладами. Наведемо приклад вирішення даного питання в Сумському національному аграрному університеті.

В СНАУ організовано міжфакультетську навчально-наукову лабораторію електронної мікроскопії. В лабораторії проводяться наукові дослідження мікроструктури, мікрорельєфу, фазового та елементарного складу неорганічних, металічних і біологічних зразків з використанням сканувальної (растрової) та просвічувальної електронної мікроскопії. У лабораторії проходить навчально-практична підготовка студентів факультетів ветеринарної медицини, інженерно-технологічного, будівельного, агротехнологій та природокористування, харчових технологій, які навчаються за ступенем вищої освіти «Бакалавр» та «Магістр». Зокрема практичні заняття в лабораторії електронної мікроскопії передбачені навчальними програмами дисциплін «Інструментальні методи аналізу», «Дослід у ветеринарній медицині», «Сучасні методи діагностики інфекційних хвороб», «Біологія», «Екологічна фізіологія рослин». Підготовки зразків для електронної мікроскопії передбачає, що дослідник володіє теоретичними відомостями та практичними навичками, набутими при вивченні хімії. Зокрема, знаннями про молярну концентрацію розчинів, масову частку, рН розчинів, буферні розчини, вміннями готувати розчини заданих концентрацій та навичками роботи з аналітичними вагами і рН-метром.

На базі лабораторії з 2019 по 2021 виконано наступні дослідження: Розробка методики фіксації біологічних тканин, культур мікроорганізмів та клітин крові для дослідження методом растрової електронної мікроскопії; Дослідження мікроструктури будівельної кераміки з підвищеною міцністю; Дослідження морфометричних особливостей будови та елементного складу волосу тварин з використанням растрової електронної мікроскопії; Дослідження цитогістологічних структур стебел льону довгунця; Дослідження покривних тканин бульб картоплі; Дослідження мікроструктури гемолімфи бджіл; Електромікроскопічні дослідження шкаралупи курей кросу Брама; Дослідження соматичних клітин в молоці корів, хворих на мастит.) Дослідження електрофізичних методів сушіння біологічних об'єктів.

Також проводяться курси електронної мікроскопії для молодих науковців, на яких вони опановують методику підготовки зразків та набувають навички оператора електронного мікроскопа.

Підсумовуючи вищевикладене, відзначимо, що використання навчально-наукової лабораторії електронної мікроскопії вдосконалює набуті базові хімічні знання і навички, сприяє розвитку самостійності, креативності, творчого й аналітичного мислення та забезпечує формування науково-дослідницької компетентності студентів і молодих науковців.

1. Белкіна С. Д. Методичний супровід формування дослідницької компетентності майбутніх інженерів у процесі викладання природничо-наукових навчальних дисциплін // Вісник Житомирського державного університету імені Івана Франка. Педагогічні науки. - 2015. - Вип. 4. - С. 10-14. - Режим доступу: http://nbuv.gov.ua/UJRN/VZhDUP_2015_4_4

2. Головань М. С. Сутність та зміст поняття «дослідницька компетентність» / М. С. Головань, В. В. Яценко // Теорія та методика навчання фундаментальних дисциплін у вищій школі : збір. наук. праць. Випуск VII. – Кривий Ріг : Видавничий відділ НМетАУ, 2012. – С. 55–62.

3. Рашкевич М.Ю. Болонський процес та нова парадигма вищої освіти: монографія/ Ю.М. Рашкевич. – Львів: Видавництво Львівської політехніки, 2014. – 168 с.

ЩОДО ОСОБЛИВОСТЕЙ ВИКЛАДАННЯ ТЕМИ "РОЛЬ ХІМІЇ В ЖИТТІ СУСПІЛЬСТВА" В СУЧАСНОМУ ЗАКЛАДІ СЕРЕДНЬОЇ БАЗОВОЇ ОСВІТИ

Шилюк В.В., Денисюк Р.О., Камінський О.М.

Житомирський державний університет імені Івана Франка, vika01071988zhitomyr@gmail.com

Сучасна хімічна наука проникла в усі сфери людського життя. Важко переоцінити роль цієї науки у створенні нових матеріалів, розвитку нових напрямів технологій, розв'язанні продовольчої, сировинної, енергетичної, екологічної проблем тощо. З хімічними процесами людина стикається повсякчас – починаючи від елементарного приготування їжі і закінчуючи хіміко-біологічними процесами в нашому організмі. Ставитися байдуже до неї неможливо: стільки неймовірних відкриттів не відбувалося ні в якій іншій галузі знань. [1]

Хімічна наука розвивається стрімкими темпами: виникають все нові і нові напрямки як наукових розробок і проектів, так і нових матеріалів з наперед заданими властивостями, адже потреби людини спричиняють розвиток науки як цілого, так і хімії зокрема.

Нами проаналізовано навчальну програму за 11 клас (рівень стандарту) загальноосвітньої школи на тему 5: «Хімія і прогрес людства» [2].

З метою формування результатів навчальної діяльності в учнів під час вивчення даної теми досить зручно використовувати мультимедійні презентації, метод навчальних проектів, короткі цікаві повідомлення, дискусії тощо.

Оскільки вивчення даної теми: «Хімія і прогрес людства» у закладах загальної середньої освіти більшою мірою теоритизоване, то досить зручним засобом викладання таких уроків (наприклад, урок на тему: «Роль хімії в житті суспільства» або «Зелена» хімія: сучасні завдання перед хімічною наукою та хімічною технологією») є використання мультимедійних презентацій. Одним з переваг такого засобу навчання є універсальність використання як під час офлайн, так і під час онлайн занять.

Ми пропонуємо, наприклад, такий фрагмент мультимедійної презентації на тему: «Роль хімії в житті суспільства» (Рис. 1).



Рис. 1 Фрагмент презентації уроку «Роль хімії в житті суспільства»

Такий формат викладення матеріалу допоможе учням краще засвоїти навчальний матеріал теми не залежно від форми проведення заняття.

1. Хімія - це природнича наука. Хімія в нашому житті [Електронний ресурс]. Режим доступу до ресурсу: <https://sites.google.com/site/himiaceprirodnicanauka/golovna-storinka/himia-v-nasomu-zitti>

2. Навчальна програма Хімія для закладів загальної середньої освіти (рівень стандарту) (затверджено Міністерством освіти і науки України наказ № 1407 від 23.10.2017 р.) / Укладачі програми: Дубовик О.А. (голова робочої групи), Бобкова О.С., Вороненко Т.І., Глазунов М.М., Іваха Т.С., Рогожнікова О.В.

ЗМІСТ

АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ ТА ХІМІЯ НАВКОЛИШНЬОГО СЕРЕДОВИЩА.....	5
---	---

LYSTVAN V.V., LYSTVAN K.V.

QUALITY ASSURANCE AND QUALITY CONTROL IN SPECTROSCOPIC DETERMINATION OF HEAVY METAL IONS ABSORPTION BY PLANTS	6
---	---

АЛЬОХІНА Т.М.

ЕКОХІМІЧНА ХАРАКТЕРИСТИКА ДОННИХ ОСАДКІВ ПІВНІЧНОГО ПРИЧОРНОМОР'Я	7
---	---

АНТРАПЦЕВА Н.М., БІЛА Г.М.

МЕТОДИЧНІ ОСОБЛИВОСТІ ІЧ СПЕКТРОСКОПІЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ ГІДРАТОВАНИХ МОНО- І ПОЛІФОСФАТІВ.....	9
--	---

БІЛЬЧЕНКО М.М., КАСЬЯНЕНКО Г.Я.

ГІДРОХІМІЧНА ХАРАКТЕРИСТИКА ПОВЕРХНЕВИХ ВОД	11
---	----

БОЙЧУК Б.Я., СИСА Л.В.

ЕКОЛОГІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ РІВНЯ ЗАБРУДНЕНОСТІ ДОННИХ ВІДКЛАДІВ Р.ПРУТ В ОКОЛИЦЯХ М.ЯРЕМЧЕ.....	13
---	----

БОНЮК М., КИЧКИРУК О.Ю., ЯНОВСЬКА Е.С., САВЧЕНКО Е.С., СТЕРНІК Д.

СИНТЕЗ ТА СОРБЦІЙНІ ВЛАСТИВОСТІ ЩОДО ЙОНІВ ТОКСИЧНИХ МЕТАЛІВ КОМПОЗИТІВ НА ОСНОВІ ПРИРОДНИХ МІНЕРАЛІВ.....	15
--	----

ГУЛАЙ О.І., ШЕМЕТ В.Я., КЛИМОВИЧ О.С., ЖИЛКО В.І.

ВИВЧЕННЯ ХІМІЧНОГО СКЛАДУ ЕКСТРАКТУ ЯБЛУК СОРТУ “ТАЛА” МЕТОДОМ ХРОМАТО-МАССПЕКТРОМЕТРІЇ.....	16
--	----

ЄРКО Д.В.

ЕКСПЕРТНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ 4-ММС (МЕФЕДРОН)	17
--	----

ІГНАТЕНКО М.І.

ДОСЛІДЖЕННЯ РАДІОАКТИВНОСТІ МІНЕРАЛЬНИХ ДОБРИВ	19
--	----

КАМІНСЬКИЙ О.М., ТІТОВ Ю.О., ХИЛЧЬУК Д.І.

ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДУ РЕФРАКТОМЕТРІЇ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ЯКОСТІ ПРОДУКТІВ ХАРЧУВАННЯ НА ПРИКЛАДІ МЕДУ	21
--	----

КЛОВАК В.О., ЛЕЛЮШОК С.О., КУЛІЧЕНКО С.А.

ВИЗНАЧЕННЯ ДЕКАМЕТОКСИНУ З ФЛЮОРЕСЦЕНТНИМИ РЕАГЕНТАМИ В АНТИСЕПТИЧНИХ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБАХ	22
--	----

КОВАЛЬ А.В., СТАДНІЧУК Н.О., ГОЛІНЬКО О.М., КРОНІКОВСЬКИЙ О.І.

КОНТРОЛЬ ВМІСТУ НІТРАТІВ У ПЛОДООВОЧЕВІЙ ПРОДУКЦІЇ.....	23
---	----

КОРНЯКОВА О.О., ГЛАДУН К.В., ВОРОБІЙОВА В.І., ВАСИЛЬЄВ Г.С.

ДОСЛІДЖЕННЯ КОМПОНЕНТНОГО СКЛАДУ ТА АНТИОКСИДАНТНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ЕКСТРАКТІВ ЗІ ЖМИХУ ЧОРНОЇ СМОРОДИНИ (<i>RIBES NIGRUM L.</i>) ТА АБРИКОСУ (<i>PRUNUS ARMENIACAL.</i>).....	24
---	----

КОСТИВ О.І., КОРКУНА О.Я., ОРНАТ М.П., ФУТРИК А.Н.	
АЗОСПОЛУКА ЦЕФТРИАКСОНУ З 2-МЕТИЛФЕНОЛОМ, ЯК ДЕРИВАТ ДЛЯ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ АНТИБІОТИКА У ЛІКАХ.....	25
КРОНІКОВСЬКИЙ О., МИСЮК О., СТАДНІЧУК Н.	
ЕКСТРАКЦІЯ КОМПЛЕКСІВ ТРИЗАРЯДНИХ КАТІОНІВ МЕТАЛІВ З КРАУН-ЕТЕРАМИ ТА ТРИХЛОРАЦЕТАТНОЮ КИСЛОТОЮ	26
КУШПІТ Д. К., КОНОВАЛОВА О. Ю., ШВЕЦЬ О. Г.	
КІЛЬКІСНЕ ВИЗНАЧЕННЯ СУМИ КАТЕХІНІВ З ВАНІЛІНОМ, ІММОБІЛІЗОВАНИМ В ЖЕЛАТИНОВІЙ ПЛІВЦІ	27
ЛІПКОВСЬКА Н.О., БАРВІНЧЕНКО В.М.	
СПЕКТРАЛЬНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПРИРОДНИХ КОРИЧНИХ КИСЛОТ, СОРБОВАНИХ НА ПОВЕРХНІ ОКСИДУ АЛЮМІНІЮ	28
ЛОБОЙЧЕНКО В.М., ЛЕОНОВА Н.О.	
ЩОДО ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ ХІМІЧНОГО СКЛАДУ ЗАХИСНИХ МАСОК МЕДИЧНОГО ТА НЕМЕДИЧНОГО ПРИЗНАЧЕННЯ НА СТАН ДОВКІЛЛЯ.....	31
ЖИЛКО В.В., НЕХАНЬ Н.В.	
КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭКСТРАКЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ИОННЫХ АССОЦИАТОВ ГИДРОФОБНЫХ КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ С КАТИОННЫМ КРАСИТЕЛЕМ ПИРОНИНОМ G.....	32
ОЛЕКСІВ Л.В., ТИМОШУК О.С.	
СПЕКТРОФОТОМЕТРІЯ 4-[N'-(4-ІМІНО-2-ОКСО-ТІАЗОЛІДИН-5-УЛІДИН)-ГІДРАЗОНО]-БЕНЗЕНСУЛЬФАМІДУ	34
ОСІНІНА О.П.	
ІНГРЕДІЄНТИ “ALCARELLE” І “АВІ”	35
ПАНАСЮК Д.Ю.	
ДИФЕНІЛАМІН ЯК ОРГАНІЧНА РЕЧОВИНА ТА ЙОГО РОЛЬ В КРИМІНАЛЬНОМУ ДОСЛІДЖЕННІ ВИБУХОВИХ РЕЧОВИН ТА ПРОДУКТІВ ПОСТРІЛУ.....	36
ПАНЧЕНКО Т.В., ЯНОВСЬКА Е.С., ВРЕТІК Л.О., СТЕРНИК Д., КОНДРАТЕНКО О.У., ТОВСТЕНКО-ЗАБЕЛІН М.	
СОРБЦІЙНІ ВЛАСТИВОСТІ СИЛІКАГЕЛІВ З АДСОРБОВАНИМИ КОПОЛІМЕРАМИ 4-ВІНІЛПІРИДИНУ ТА СТИРЕНУ ЩОДО ЙОНІВ FE(III)	38
ПЕТРОВА А.О., КИЧКИРУК О.Ю.	
ФІЗИЧНІ ТА ФІЗИКО-ХІМІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ У ХІМІЧНОМУ АНАЛІЗІ.....	39
ПРОЦЕНКО О.М., ДОРОШКЕВИЧ Н.Ф., РУМЯНЦЕВА Ж.О., ЛЕОНОВА Н.Г.	
ВИЗНАЧЕННЯ НРК РІЗНИХ ТИПІВ ҐРУНТІВ СВК «СЕЛИЩАНСЬКИЙ».....	40
САВЧУК Т.І., КОРМОШ Ж.О., КОРОЛЬЧУК С.І., ЮРЧЕНКО О.М.	
МЕТОДИ ВИЗНАЧЕННЯ ПЕНТАХЛОРОФЕНОЛУ	41
СКРИПИНЕЦЬ Ю.В., ЛЕОНЕНКО І.І., ВОЙТЮК О.Д., ЄГОРОВА А.В.	
ЛЮМІНЕСЦЕНТНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ФАВІПРАВІРУ З ВИКОРИСТАННЯМ КОМПЛЕКСНОЇ СПОЛУКИ ЄВРОПІО (III).....	43
ТАМАРКІНА Ю.В., ФРОЛОВА І.Б., ВЕЛИЧКО О.О., КУЧЕРЕНКО В.О.	
АДСОРБЦІЯ ФЕНОЛУ НАНОПОРИСТИМ ВУГЛЕЦЕМ З БУРОГО ВУГІЛЛЯ.....	44

ТАРАСЕНКО Н.В.

АНАЛІЗ ІСНУЮЧИХ ВИДІВ СОРБЕНТІВ ДЛЯ ПРОЦЕСІВ СОРБЦІЇ НАФТОПРОДУКТІВ
З ПОВЕРХНІ ВОДИ 47

**ТКАЧ В.В., КУШНІР М.В., ДЕ ОЛВЕЙРА С.С., ДУШ РЕЙШ Л.В., ІВАНУШКО Я.Г.,
ДА СІЛВА А.О., ЯГОДИНЕЦЬ П.І., КОРМОШ Ж.О., ЛУГАНСЬКА О.В.**

ТЕОРЕТИЧНИЙ ОПИС ВИЗНАЧЕННЯ БРОМАНТАНУ НА АНОДІ,
МОДИФІКОВАНОМУ НАНОЧАСТИНКАМИ КУПРУМ (II) СУЛЬФІДУ У
ПОТЕНЦІОСТАТИЧНОМУ РЕЖИМІ 49

**ТКАЧ В.В., КУШНІР М.В., ДЕ ОЛВЕЙРА С.С., ДУШ РЕЙШ Л.В., ІВАНУШКО Я.Г.,
ДА СІЛВА А.О., ЯГОДИНЕЦЬ П.І., КОРМОШ Ж.О., ЛУГАНСЬКА О.В., ЛИСТВАН
В.В., ДИТИНЧЕНКО І.М.**

ТЕОРЕТИЧНИЙ ОПИС ВИЗНАЧЕННЯ ГІДРОСИХІНОЛУ НА АНОДІ,
МОДИФІКОВАНОМУ КОБАЛЬТ (III) ОКСИГІДРОКСИДОМ У
ПОТЕНЦІОСТАТИЧНОМУ РЕЖИМІ 50

**ТКАЧ В.В., КУШНІР М.В., ДЕ ОЛВЕЙРА С.С., ДУШ РЕЙШ Л.В., ІВАНУШКО Я.Г.,
ДА СІЛВА А.О., ЯГОДИНЕЦЬ П.І., КОРМОШ Ж.О., ЛУГАНСЬКА О.В.**

ТЕОРЕТИЧНИЙ ОПИС ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ПРЕПАРАТУ
АЦЕТАЗОЛАМІД НА ЕЛЕКТРОДІ, МОДИФІКОВАНОМУ КОМПОЗИТОМ ПОЛІ(5-
АМІНО-1,4-НАФТОХІНОНУ) ІЗ КОБАЛЬТ(III)ОКСИГІДРОКСИДОМ 51

**ТКАЧ В.В., КУШНІР М.В., ДЕ ОЛВЕЙРА С.С., ДУШ РЕЙШ Л.В., ІВАНУШКО Я.Г.,
ДА СІЛВА А.О., ЯГОДИНЕЦЬ П.І., КОРМОШ Ж.О., ЛУГАНСЬКА О.В., КОПІЙКА
В.В.**

ТЕОРЕТИЧНИЙ ОПИС ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ПРЕПАРАТУ ЕФЕДРИН
НА ЕЛЕКТРОДІ, МОДИФІКОВАНОМУ КОБАЛЬТ (III) ОКСИГІДРОКСИДОМ 52

**ТКАЧ В.В., КУШНІР М.В., ДЕ ОЛВЕЙРА С.С., ДУШ РЕЙШ Л.В., ІВАНУШКО Я.Г.,
ДА СІЛВА А.О., ЯГОДИНЕЦЬ П.І., КОРМОШ Ж.О., ЛУГАНСЬКА О.В., КОПІЙКА
В.В.**

ТЕОРЕТИЧНИЙ ОПИС ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ПРЕПАРАТУ
ДИМЕТИЛАМІАМІН НА ЕЛЕКТРОДІ, МОДИФІКОВАНОМУ КОМПОЗИТОМ
ПОЛІПРОЛ-КОБАЛЬТ(III) ОКСИГІДРОКСИД 54

**ТКАЧ В.В., КУШНІР М.В., ДЕ ОЛВЕЙРА С.С., ДУШ РЕЙШ Л.В., ІВАНУШКО Я.Г.,
ДА СІЛВА А.О., ЯГОДИНЕЦЬ П.І., КОРМОШ Ж.О., ЛУГАНСЬКА О.В.**

ТЕОРЕТИЧНИЙ ОПИС ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ПРЕПАРАТІВ
ОРНІДАЗОЛ ТА РОНІДАЗОЛ НА ЕЛЕКТРОДІ, МОДИФІКОВАНОМУ КОПОЛІМЕРОМ
АКРИДИНОВОГО ПОМАРАНЧЕВОГО ІЗ 5-АМІНО-1,4-НАФТОХІНОНОМ 55

ЦИБА І.О., ЛЕОНОВА Н.Г.

ЕКСТРАКЦІЯ ЙОДИДНИХ КОМПЛЕКСІВ VI(III) З ВИКОРИСТАННЯМ
ІЗОПРОПІЛОВОГО СПИРТУ 57

**ЦИМБАЛЮК К.К., СНУРНІКОВА О.В., МЕЛЬНИК К.В., ФАДЄЄВ Є.М.,
АНТОНОВИЧ В.П.**

ОПТИМІЗАЦІЯ ХРОМАТО-МАС-СПЕКТРОМЕТРИЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ
ПОЛІЦИКЛІЧНИХ АРОМАТИЧНИХ ВУГЛЕВОДНІВ У ОБ'ЄКТАХ НАВКОЛИШНЬОГО
СЕРЕДОВИЩА 58

BODACHIVSKA L.YU.

MICROEMULSIONS STABILIZED BY OLEOCHEMICAL SURFACTANS 61

BONDARENKO M.E., SILENKO P.M., SHVALAGIN V.V., SOLONIN YU.M., RAGULYA A.V., ZAHORNYI M.M., GUBARENI N.I., KHYZHUN O.Y., YAROVA N.YU.

PHOTOLUMINESCENCE PROPERTIES O-DOPED CARBON NITRIDE WITH VARIOUS OXYGEN CONTENT 62

BONDARENKO M.E., SILENKO P.M., SHVALAGIN V.V., SOLONIN YU.M., RAGULYA A.V., ZAHORNYI M.M., GUBARENI N.I., KHYZHUN O.Y., YAROVA N.YU.

INFLUENCE OF THE PHASE COMPOSITION OF THE TiO_2 MATRIX ON THE PHOTOLUMINESCENCE PROPERTIES OF THE O-G- C_3N_4/TiO_2 COMPOSITE 64

GORELOV B.M., SIGAREVA N.V.

POLYMER STRUCTURE STABILIZATION FEATURES IN NANOCOMPOSITES 66

KUSYAK A.P., AVRAMENKO Y.Y., GORBYK P.P., KUSYAK N.V.

SYNTHESIS OF NANODISPERSE LUMINOPHORES FOR PHOTODYNAMIC AND OPTOPHARMACOLOGICAL THERAPY 67

POTAPENKO A.V., ZHOU M., POTAPENKO O.V., KIRILLOV S.A.

PROSPECTIVE ELECTRODE MATERIALS AND COMPONENTS FOR HIGH-RATE LITHIUM ION BATTERIES 68

PYLYPENKO O.

FORMING TWO-LAYER OXIDE FILMS ON THE Ti_6Al_4V ALLOY USING THE ELECTROCHEMICAL OXIDATION IN ORGANIC-WATER SOLUTION 70

ROZHDESTVENKA L.M., KUDELKO K.O., OGENKO V.M.

PORE FORMATION OF ANODIC ALUMINA OXIDE WITH ELECTROLYTE CONTAINING GRAPHENE OXIDE 70

АХТИРКО М.І., ФРОЛОВА А.О., СІГУНОВ О.О., МУСІНА А.О.

НІЗДРЮВАТИЙ БЕТОН З ФЕРОСИЛІЦІЕМ В ЯКОСТІ ГАЗОУТВОРЮВАЧА – ЕКОЛОГІЧНО БЕЗПЕЧНИЙ БУДІВЕЛЬНИЙ МАТЕРІАЛ 73

БЛОВА Ю.С., ДЕНИСЮК Р.О., ТКАЧУК В.В.

ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ОСОБЛИВОСТІ ПРОЦЕСУ РОЗЧИНЕННЯ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ $CD_{1-x}MN_xTE$ У ТРАВІЛЬНИХ КОМПОЗИЦІЯХ $HNO_3 - KI$ 74

БОРОВА М.М., ГОРІУНОВА І.І., ПЛОХОВСЬКА С.Г., ПУШКАРЬОВА Н.О., ЄМЕЦЬ А.І.

ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НАНОЧАСТИНОК Ag_2S , ОТРИМАНИХ МЕТОДОМ БІОЛОГІЧНОГО СИНТЕЗУ 75

ВОЛОЩУК В.В., ЛІСАЧУК Г.В., КРИВОБОК Р.В., ЗАХАРОВ А.В., ЧЕФРАНОВ Є.В.

РОЗРОБКА ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПАРАМЕТРІВ ДЛЯ СТВОРЕННЯ ЦЕЛЗІАН-СЛАВСОНІТОВОЇ КЕРАМІКИ 77

ГАЙДАЙ А.Р., ФУРТАТ І.М., МУРЛАНОВА Т.В., ВАКУЛЮК П.В., КОЗАКЕВИЧ Р.Б., ДЕМ'ЯНЕНКО Є.М., ЛОБАНОВ В.В., ТЬОРТИХ В.А., ГОЛУБ О.А.

ДОСЛІДЖЕННЯ ФІЗИКО-ХІМІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ НАНОКОМПОЗИТІВ З ОРНІДАЗОЛОМ НА ОСНОВІ НАТИВНОГО, АМІНОВАНОГО ТА МЕТИЛЬОВАНИХ КРЕМНЕЗЕМІВ..... 78

ГЕРАЩЕНКО І.І., СТЕПАНЮК К.О., КЛЮЧКОВ Д.Г.

ФІЗИКО-ХІМІЧНЕ ОБҐРУНТУВАННЯ ТА ТЕХНОЛОГІЯ ВИГОТОВЛЕННЯ НОВИХ ЛІКАРСЬКИХ ФОРМ НА ОСНОВІ НАНОРОЗМІРНОГО КРЕМНЕЗЕМУ 80

ГОРБИК П.П., ДУБРОВІН І.В., АБРАМОВ М.В.

МАГНІТНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАНОЧАСТИНОК ГАДОЛІНІЙ ІТРІЄВИХ ФЕРОГРАНАТІВ 82

ГУЗЕНКО Н.В., КРАВЧЕНКО А.А.

АДСОРБЦІЯ ЖЕЛАТИНУ НА ПОВЕРХНІ НАНОРОЗМІРНИХ ОКСИДІВ: ВИХІДНИХ ТА ПІСЛЯ ГІДРО/ТЕРМООБРОБКИ 83

ГУСАКОВА К.Г., МЕЛЬНИЧУК О.Г., ГРИГОР'ЄВА О.П., СТАРОСТЕНКО О.М., ФАЙНЛЕЙБ О.М.

ВПЛИВ ТИПУ НАНОНАПОВНЮВАЧА НА ТЕПЛОФІЗИЧНІ ТА ТЕРМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ТЕРМОСТІЙКИХ ПОЛІМЕРНИХ НАНОКОМПОЗИТІВ НА ОСНОВІ БІСФТАЛОНІТРИЛУ 85

КОБИЛІНСЬКА Н., ДУДАРКО О.

СОРБЦІЙНЕ ВИЛУЧЕННЯ $Cr(III)$, $Mn(II)$, $Co(II)$, $Pb(II)$ ТА $Cu(II)$ ІОНІВ З ВОДНИХ РОЗЧИНІВ ЗА ДОПОМОГОЮ N-ВМІСНИХ ПОЛІФУНКЦІОНАЛЬНИХ ВПОРЯДКОВАНИХ КРЕМНЕЗЕМІВ 89

КОЗАКЕВИЧ Р.Б., ПОЛІЩУК Л.М., ТУМКО А.В., ФУРТАТ І.М.

СИНТЕЗ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ КОМПОЗИТНИХ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ КРЕМНЕЗЕМУ ТА ПОЛІМОЛОЧНОЇ КИСЛОТИ 91

ЛИТВИН В.А., СУКОВАЧ Т.М., СЕМЕНОВА М.І.

КІНЕТИЧНІ ЗАКОНОМІРНОСТІ ФОРМУВАННЯ НАНОКОМПОЗИТІВ СРІБЛА НА ОСНОВІ СИНТЕТИЧНИХ ФУЛЬВОКИСЛОТ 94

ЛИТВИНЧУК А.П., ЧАЙКА М.В., КАМІНСЬКИЙ О.М.

ВПЛИВ ДЕФЕКТІВ КРИСТАЛІЧНОЇ ГРАТКИ НА ВЛАСТИВОСТІ ТВЕРДИХ ТІЛ 96

МАКІДО О.Ю., ХОВАНЕЦЬ Г.І

ОСОБЛИВОСТІ ОДЕРЖАННЯ МАГНІТНИХ НАНОЧАСТИНОК ДЛЯ ВИКОРИСТАННЯ У ФЕНТОНОПОДІБНИХ КАТАЛІЗАТОРАХ 98

МАРЧУК О.В., СМІТЮХ О.В.

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА $DyVPBSi_2S_8$ 100

МИЧКІВСЬКА Ю.С., БІЛОВА Ю.С., ДЕНИСЮК Р.О.

ЕЛЕКТРОХІМІЧНІ ПРОЦЕСИ ПРИ ВЗАЄМОДІЇ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ $Co_{1-x}Mn_xTe$ З ТРАВІЛЬНИМИ КОМПОЗИЦІЯМИ HNO_3-KI 102

ОГЕНКО В.М., ДУБРОВІНА Л.В., ДУБРОВІН І.В.

МОДИФІКУВАННЯ ТРУБЧАСТИХ КЕРАМІЧНИХ МЕМБРАН ПІРОВУГЛЕЦЕМ 104

ПИСАРЕНКО С.В., КАМІНСЬКИЙ О.М., ЧИГИРИНЕЦЬ О.Е., ЧЕРНЕНКО В.Ю.

ВИВЧЕННЯ ПРОЦЕСУ ВИЛУГОВУВАННЯ Ti^{4+} З ІЛЬМЕНІТОВОГО КОНЦЕНТРАТУ ІРШАНСЬКОГО РОДОВИЩА (УКРАЇНА) 106

ПІМІНОВ О. Ф., ШУЛЬГА Л. І., ДОМАР Н. А., ГУБЧЕНКО Т. Д., РОЛІК-АТТІА С. М. НАНОЧАСТКИ В МЕДИЧНІЙ ПРАКТИЦІ: ВІД ДІАГНОСТИКИ ДО ЛІКУВАННЯ.....	107
САХНЕНКО М.Д., КАРАКУРКЧІ Г.В., МАРКОВА Н.Б., СТЕПАНОВА І.І. ПЛАЗМО-ЕЛЕКТРОЛІТНИЙ СИНТЕЗ КАТАЛІТИЧНИХ ГЕТЕРООКСИДНИХ ПОКРИТТІВ НА СПЛАВАХ ТИТАНУ	109
РОЇК Н.В., БЄЛЯКОВА Л.О. РН-ЧУТЛИВІ ОРГАНОКРЕМНЕЗЕМНІ ПЛІВКИ: ВПЛИВ ХІМІЧНОЇ ІММОБІЛІЗАЦІЇ НА ПРОТОЛІТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ АЗОБАРВНИКА.....	110
САЛЮК О.С., ЛЕОНОВА Н.Г. ФОРМУВАННЯ І ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПІДЛОГОВИХ І НАСТІННИХ ПЛИТ	112
САРАЙ В.В., ЄРМОЛЕНКО І.Ю., ТУР Ю.І., САХНЕНКО М.Д., КАРАКУРКЧІ Г.В. ФІЗИКО-МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ГАЛЬВАНІЧНИХ ПОКРИТТІВ FE-CO-W	113
СЕЛЕЗЕНЬ А.О., ОЛЕКСЕЮК І.Д., ПІСКАЧ Л.В. ЛІКВІДУС СИСТЕМИ $Tl_2Se-CDSe-SnSe_2$	114
СІРИК Ю.В., ВОВК О.М., ГРИНЬ Л.О., РОМАНЕНКО А. О., НИЖАНКОВСЬКИЙ С.В. ОТРИМАННЯ ЕВТЕКТИЧНИХ КОМПОЗИТІВ В СИСТЕМІ $Al_2O_3 - Y_2O_3$ МЕТОДОМ ГОРИЗОНТАЛЬНОЇ СПРЯМОВАНОЇ КРИСТАЛІЗАЦІЇ.....	115
ТЕРНОВИЙ Ю.Ф., ЛІЧКОНЕНКО Н.В. ГАЗОРОЗПИЛЕНІ ПОРОШКИ ДЛЯ ВИСОКОЕФЕКТИВНИХ МАГНІТНИХ МАТЕРІАЛІВ	117
ТКАЧУК І.Г., ОРЛЕЦЬКИЙ І.Г., КОВАЛЮК З.Д. ЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ФОТОЧУТЛИВИХ ГЕТЕРОСТРУКТУР N-SnS ₂ /P-INSE, ВИГОТОВЛЕНИХ МЕТОДОМ СПРЕЙ-ПРОЛІЗУ	118
ТОМІНА А.-М. В., КАЛІНІЧЕНКО С.В. ВПЛИВ ВУГЛЕЦЕВОГО ВОЛОКНА НА ФІЗИКО-МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ПОЛІТЕТРАФТОРЕТИЛЕНУ	120
ТОМІНА В.В., СТОЛЯРЧУК Н.В., ДУДАРКО О.А., МЕЛЬНИК І.В. СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ КРЕМНЕЗЕМІВ З ДИЕТИЛЕНТРИАМІННИМИ ГРУПАМИ	122
ЧЕРНЯК А.А., ЧАЙКА М.В., ДЕНИСЮК Р.О., ТОМАШИК В.М. ВПЛИВ ЕТИЛЕНГЛІКОЛЮ НА ПРОЦЕС ХІМІЧНОГО РОЗЧИНЕННЯ МОНОКРИСТАЛІВ $Zn_xCd_{1-x}Te$	125
ШОЛОГОН В.І., КАЛАФАТ К.В., ВАХІТОВА Л.М., ТАРАН Н.А. ПІДВИЩЕННЯ ВОГНЕСТІЙКОСТІ ЕПОКСИДНИХ ПОКРИТТІВ СПОЛУКАМИ ІНТЕРКАЛЬОВАНОГО ГРАФІТУ.....	127
ЮШКЕВИЧ С.В., БИКОВ О.І., КОРНІЄНКО О.А. ФАЗОВІ РІВНОВАГИ В СИСТЕМІ $SeO_2-NO_2O_3$ ПРИ ТЕМПЕРАТУРІ 1500 °C	128

НЕОРГАНІЧНА ТА ФІЗИЧНА ХІМІЯ 130

BABIZHETSKYY V., LEVYTSKYI V.

SINGLE CRYSTAL STUDY OF $ERFE_{1-x}SI_2$, $X = 0.59$ 131

BUTENKO E. O.

PILLARED CLAYS – CATALYSTS FOR PETROCHEMICAL PROCESSES 132

CHERNII S.V.1., LOSYTSKYI M.YU., TRETYAKOVA I.M., PEKHYNO V.I., STARUKHIN A.S., GORSKI A.V., CHERNII V.YA.

SPECTRAL-LUMINESCENT PROPERTIES OF ZR AND HF PHTHALOCYANINES WITH DECANOATE-ALKYLAMINO- β -KETOENOLATE LIGANDS 133

PAVLYUK N., DMYTRIV G., PAVLYUK V.

NEW ORTHOROMBIC $MGFE_6GA_6$ PHASE 134

ROMAKA L., KONYK M., STADNYK YU.

EXPERIMENTAL STUDY OF THE TB-CU-SN TERNARY SYSTEM 135

SAVVOVA O.V., FESENKO O.I., VORONOV H.K., MOLCHANOVA K.I.

FUTURE DEVELOPMENT BACTERICIDAL CERAMIC GLAZES FOR CERAMIC TILES . 136

SHAPOVALOV S.A. ASSOCIATION WITH THE PARTICIPATION OF DYES IN SOLUTIONS: EQUILIBRIUM CHARACTERISTICS OF NANOSYSTEMS 140

TAGAEV I.A., ANDRIYKO L.S., DONIYAROV N.A., MURODOV I.N., ASROROV A.A.

PHOSPHORITE WASTE TREATMENT WITH LOW CONCENTRATIONS OF SULFURIC ACID 142

ZHORZHOLIANI N.B., AMIRKHANASHVILI K.D., MOLODINASHVILI Z.F., KHMALADZE L.I.

COORDINATION COMPOUNDS CONTAINING MEDICINAL SUBSTANCES 144

АНТРАПЦЕВА Н. М., БІЛА Г.М., ДЬОМІН Д.М.

ПРО СКЛАД ПРОДУКТІВ ВЗАЄМОДІЇ МАГНІЮ ГІДРОКСОКАРБОНАТУ З ФОСФАТНИМИ КИСЛОТАМИ РІЗНОГО АНІОННОГО СКЛАДУ 145

АНТРАПЦЕВА Н.М., ОБЛОМЕЙ С.О., ВАСИЛЕНКО І.М.

ВЗАЄМОДІЯ В СИСТЕМІ $MGSO_4-COSO_4-K_4P_2O_7-H_2O$ 146

АНТРАПЦЕВА Н.М., ШИЛІН Б.С.

ТЕРМОАНАЛІТИЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ЦИНК-МАГНІЙ ДИГІДРОГЕНФОСФАТІВ ДИГІДРАТІВ 148

БОРИСОВ Ю.С., ЯНЦЕВИЧ К.В.

ЕЛЕКТРОХІМІЧНА ПОВЕДІНКА ПЛАЗМОВИХ ПОКРИТТІВ НА ОСНОВІ FE-AL 150

БУТЕНКО Э.О

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОСНОВНЫХ ЦЕНТРОВ НА УГЛЕРОДНОЙ ПОВЕРХНОСТИ С ПОМОЩЬЮ ИНДИКАТОРОВ ГАММЕТТА 151

ВЕЛИЧКО О.В., ПІСКАЧ Л.В.

ФАЗОВІ РІВНОВАГИ НА ПЕРЕРІЗАХ $CU_2SIS(SE)_3-ZNS(SE)$ 153

ВОЛКОВА Л. К., ОПЕЙДА Й. О.

ПОВІЛЬНІ СТАДІЇ РЕАКЦІЙ *n*-АЛКАНІВ У СІРЧАНОКИСЛИХ РОЗЧИНАХ КОМПЛЕКСІВ МЕТАЛІВ 154

ГОРИНЬ А.М., РОМАКА Л.П., СТАДНИК Ю.В., РОМАКА В.А., РОМАНІВ І.М., ПАШКЕВИЧ В.З.	
ДОСЛІДЖЕННЯ НАПІВПРОВІДНИКОВОГО ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ $\text{TiCO}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sb}$	156
ДЗЯЗЬКО Ю. С., РОЖДЕСТВЕНСЬКА Л. М., ПОНОМАРЬОВА Л.М., КОЛОМІЄЦЬ Є.О., ЯЦЕНКО Т.В	
СОРБЦІЙНІ ВЛАСТИВОСТІ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ ПРИРОДНИХ ГЛИНИСТИХ МІНЕРАЛІВ	158
ДОМІНЮК Н.І., НИЧИПОРУК Г.П., МУЦЬ І.Р., ЗАРЕМБА В.І.	
КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА СПОЛУКИ $\text{NDAU}_{0,55}\text{IN}_{1,45}$	160
ЖИЛЯК І.Д., КОПЛЕВИЧ В.А., ДАВИСКИБА В.В.	
ДОСЛІДЖЕННЯ УМОВ ОДЕРЖАННЯ І ВЛАСТИВОСТЕЙ ПОДВІЙНОГО ГІДРАТОВАНОГО КАЛІЙДІАМОНІЙФОСФАТУ	161
ЖОХ О.О., ТРИПОЛЬСЬКИЙ А.І., СТРИЖАК П.Є.	
КІНЕТИЧНІ МОДЕЛІ ПЕРЕТВОРЕННЯ МЕТАНОЛУ НА ЦЕОЛІТІ ZSM-5	163
ЗЮБРИЦЬКА Ю.І., КОРДИШ О.М., РОЗАНЦЕВ Г.М.	
ДОСЛІДЖЕННЯ ГІДРОГЕНІЗАЦІЇ ДИБЕНЗИЛТОЛУЕНУ ЯК ПЕРСПЕКТИВНОГО НАПОКИЧУВАЧА ВОДНЮ	165
ЄВСЄЄВА М.В., СИДОРУК Т.І., ЮЩЕНКО Т.І.	
ГЕТЕРОМЕТАЛІЧНІ (ЛАНТАНОЇД, СТИБІЙ АБО БІСМУТ)ВМІСНІ КОМПЛЕКСИ З СЕМИКАРБАЗОНОМ САЛЩИЛОВОГО АЛЬДЕГІДА	165
КАЛЕНЮК І.С., ОНИЩУК О.О., КАМІНСЬКИЙ О.М., ТІТОВ Ю.О.	
ВИЗНАЧЕННЯ КРИТИЧНОЇ КОНЦЕНТРАЦІЇ МІЦЕЛОУТВОРЕННЯ (ККМ) В СИСТЕМІ ІЗОПРОПАНОЛ – ВОДА СТАЛАГМОМЕТРИЧНИМ МЕТОДОМ	166
КИОСЕ Т.А., ПОПРУГА Ю.И., КИОСЕ Т.М., ДАНЮКИНА О.М.	
ОКИСЛЕНИЕ ДИОКСИДА СЕРЫ В ПРИСУТСТВИИ КОМПЛЕКСОВ ЖЕЛЕЗА(III), ЗАКРЕПЛЁННЫХ НА ПРИРОДНОМ БЕНТОНИТЕ	168
КУРМАЧ М.М.1, КОНИШЕВА К.М., ЛОЗОВИЦЬКА О.І., ШВЕЦЬ О.В.	
ІЄРАРХІЧНІ ЦЕОЛІТИ – КАТАЛІЗАТОРИ РЕАКЦІЇ ГЕВАЛЬДА	169
КУРМАЧ М.М., КОНИШЕВА К.М., ЛОЗОВИЦЬКА О.І., ШВЕЦЬ О.В.	
ВИЗНАЧЕННЯ КИСЛОТНОСТІ ІЄРАРХІЧНИХ ЦЕОЛІТІВ МЕТОДОМ ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНОГО ТИТРУВАННЯ	170
КУЦІЙ А.В., МАНІЛЕВИЧ Ф.Д., ПІРСЬКИЙ Ю.К., ПАНЧИШИН Т.М.	
ЗАКОНОМІРНОСТІ ГІДРОЛІЗУ БОРОГІДРИДУ НАТРІЮ В ПРОТОЧНОМУ РЕАКТОРІ З ПЛАТИНОВИМ КАТАЛІЗАТОРОМ	171
МАРІЙЧАК О.Ю., РАДІО С.В., РОЗАНЦЕВ Г.М.	
СИНТЕЗ І КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА $\text{Na}_9[\text{Er}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 32\text{H}_2\text{O}$	173
МЕЛЬНИЧУК А.М., КИЧКИРУК О.Ю., ЯНОВСЬКА Е.С., САВЧЕНКО І.О., СТЕРНИК Д.	
СИНТЕЗ ТА СОРБЦІЙНІ ВЛАСТИВОСТІ КОМПЗИТУ НА ОСНОВІ СИЛІКАГЕЛЮ З АДСОРБОВАНИМ ПОЛІ[8-ОКСИХІНОЛІНМЕТАКРИЛАТОМ]	174
МУДРАК В.В., ЧУМАК В.В.	
КОРОЗІЙНІ ПРОЦЕСИ І МЕТОДИ ЗАХИСТУ МЕТАЛІВ ВІД КОРОЗІЇ	174

ОЛЕКСІЙ Ю.А., РИСІЧ А.В., МІЩЕНКО А.О., МАРІЙЧАК О.Ю., РАДІО С.В.	
ВПЛИВ КАТІОННОЇ ПІДГРАТКИ НА ПАРАМЕТРИ БУДОВИ ІЗОПОЛІВОЛЬФРАМАТ-АНІОНУ ЗІ СТРУКТУРОЮ ЛІНДКВІСТА	176
ОПЕЙДА Л.І., ВОЛКОВА Л.К., ПАСТЕРНАК О.М.	
КВАНТОВО-ХІМІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ МЕХАНІЗМІВ АКТИВАЦІЇ АЛКАНІВ ПО ЗВ'ЯЗКУ С–Н СІРЧАНОЮ КИСЛОТОЮ	177
ОСОКІН Я.С., ПАЛОНСКИ У.А., ВАРГАЛЮК В.Ф.	
МАРФАЛОГІЯ ДЫСПЕРСІЇ МЕДЗІ З МАЛЕІНАВАЙ КІСЛОТОЙ	179
ПАВЛЕНКО В.О., ЧАЙКА М.В., ДЕНИСЮК Р.О., ТОМАШИК В.М.	
ВПЛИВ СКЛАДУ ТРАВНИКІВ $K_2Cr_2O_7 - HBr$ НА ПРОЦЕС ХІМІЧНОГО РОЗЧИНЕННЯ $CD_{0,2}HG_{0,8}Te$	180
ПЕРЛОВА О. В., ДЗЯЗЬКО Ю.С., ДОЛИНЮК К.М., ПАЛЬЧИК О.В. , ПОЛКАРПОВ А.П. КІНЕТИКА СОРБЦІЇ СПОЛУК УРАНУ (VI) ВОЛОКНИСТИМ АНІОНІТОМ ФІБАН А-6, МОДИФІКОВАНИМ SNO_2	182
РИСІЧ А.В., ДУВАНОВА Е.С., РАДІО С.В., РОЗАНЦЕВ Г.М.	
ВИЗНАЧЕННЯ ЕНЕРГІЙ ГІББСА РЕАКЦІЙ УТВОРЕННЯ І ВЗАЄМНИХ ПЕРЕХОДІВ ІЗОПОЛІВОЛЬФРАМАТІВ В ВОДНО-ЕТИЛЕНГЛІКОЛЬНОМУ СЕРЕДОВИЩІ	184
СТАДНИК Ю.В., РОМАКА Л.П., РОМАКА В.В., ГОРИНЬ А.М., РОКОМАНЮК М.В.	
СИНТЕЗ ТА ЕЛЕКТРОКІНЕТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ ЗАМІЩЕННЯ $Er_{1-x}Sc_xNiSB$	185
СТЕЦЬКІВ А.О., ПАВЛЮК В.В.	
КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА ТЕРНАРНОЇ СПОЛУКИ $Tb_{1-x}Na_xSn_2$ ($x = 0,1$)	187
ТРОФИМЧУК І. М.	
ФУНКЦІОНАЛЬНІ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ КРЕМНЕЗЕМИ З КОВАЛЕНТНО ЗАКРІПЛЕНИМИ ХЛОРОПРОПІЛЬНИМИ ТА ОЛІГОСАХАРИДНИМИ ГРУПАМИ ДЛЯ СОРБЦІЇ ФЕНОЛУ З ВОДИ	188
ФЕДОРЧУК О. М., ЧАЙКА М. В., ДЕНИСЮК Р. О., ТОМАШИК В. М.	
ВПЛИВ ФІЗИКО-ХІМІЧНИХ ПАРАМЕТРІВ ТРАВІЛЬНИХ КОМПОЗИЦІЙ $K_2Cr_2O_7 - HBr$ – РОЗЧИННИК НА ПРОЦЕС ХІМІЧНОЇ ВЗАЄМОДІЇ З $Zn_xCd_{1-x}Te$	190
ЧАЙКА М.В., ТОМАШИК З.Ф., ДЕНИСЮК Р.О., ТОМАШИК В.М., ПАНАСЮК Д.Ю.	
ЕЛЕКТРОХІМІЧНІ ПРОЦЕСИ ПРИ РОЗЧИНЕННІ МОНОКРИСТАЛІВ $CDTe$ В ТРАВІЛЬНИХ КОМПОЗИЦІЯХ $K_2Cr_2O_7 - HCl$	191
ШАМАЙЛО П.В., КАМІНСЬКИЙ О.М., ТІТОВ Ю.О.	
ДОСЛІДЖЕННЯ ФІЗИКО-ХІМІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ НАНОФЕРИТУ $PbFe_2O_4$	193
ШАПОВАЛОВ С.А. ВИКОРИСТАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ БАРВНИКІВ ТА ЇХ РІЗНОРІДНИХ АСОЦІАТІВ ДЛЯ КІЛЬКІСНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ВМІСТУ ПАР У РОЗЧИНАХ	195
ШАПОВАЛОВ С.А., КРАСНОПЬОРОВА А.П., ЮХНО Г.Д., ЄФІМОВА Н.В.	
КІНЕТИЧНІ АСПЕКТИ ВЗАЄМОДІЙ МЕТАЛІВ І РАДІОНУКЛІДІВ З ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНИМИ ОРГАНІЧНИМИ СПОЛУКАМИ В ЕКСТРАКЦІЙНИХ СИСТЕМАХ	197

ЮРЧЕНКО Ю.В., БАЩЕВСЬКА Г.К., БИКОВ О.І., КОРНІЄНКО О.А., САМЕЛЮК А.В.

ФАЗОВІ РІВНОВАГИ В СИСТЕМІ $ZrO_2-HfO_2-Sm_2O_3$ ПРИ ТЕМПЕРАТУРІ 1500°C¹⁹⁹

ХІМІЧНІ ПРЕПАРАТИ В БІОЛОГІЇ ТА МЕДИЦИНІ 201

KUSYAK N.V., ILCHUK O.R., KUSYAK A.P., PEREHRISTYUK M.M.

DIMENSIONAL CHARACTERISTICS OF MEDICAL AND BIOLOGICAL..... 202

COMPOSITES BASED ON Fe_3O_4 202

TSUBER V.Y.

ROLE OF MACHINE LEARNING IN MODERN CHEMISTRY 203

ВЕКЛІЧ Т.О., ГОЛЬДЕН О.В., КАРДАШ О.О.

СЕЛЕКТИВНИЙ ІНГІБІТОР Ca^{2+} -ПОМПИ ПЛАЗМАТИЧНОЇ МЕМБРАНИ – КАЛІКС[4]АРЕН С-956 – ПІДВИЩУЄ КОНЦЕНТРАЦІЮ Ca^{2+} У МІОЦИТАХ МАТКИ. 205

ВЛАДИМИРОВА Т.Ю., ЛЕСИШИНА Ю.О.

ДОСЛІДЖЕННЯ СТАБІЛЬНОСТІ РОЗЧИНУ ГЛЮКОЗИ ДЛЯ ІНФУЗІЙ..... 209

ДІСТАНОВ В.Б. МИРОНЕНКО Л.С., ПОРОДНОВ А.О., ДЗЬОБАНЬ Т.В.

ПОХІДНІ ФОРМАЗАНІВ В ЯКОСТІ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ РЕЧОВИН..... 210

ЗОСЕНКО О., ПОЗДНЯКОВА А., КУЩ О.

ВИЗНАЧЕННЯ АНТИРАДИКАЛЬНОЇ АКТИВНОСТІ ПРОПОЛІСУ ЗА МЕТОДОМ ДФПГ 212

ЗУБРИЦЬКА Л.О., ЗЬОЛКО Т.В.

СПЕКТР ЗАСТОСУВАННЯ АНТИОКСИДАНТІВ 213

КАЛІНКЕВИЧ О.В., СКЛЯР А.М., КАЛІНКЕВИЧ О.М., ЧІВАНОВ В.Д., ЗІНЧЕНКО Є.І.

ОТРИМАННЯ І ХАРАКТЕРИЗАЦІЯ НОВИХ БІОМАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ ІОДИДУ ХІТОЗАНУ З БІОЛОГІЧНО АКТИВНИМИ БАРВНИКАМИ 215

КУЗІВ Я.Б., ДУБЕЙ І.Я.

СИНТЕЗ І ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ФЛУОРЕСЦЕНТНИХ КОН'ЮГАТІВ ГЛЮКОЗАМІНУ З ВОДОРОЗЧИНИМИ ПОХІДНИМИ 3-ТІАЗОЛІЛКУМАРИНІВ 217

НАЙДЕНОВ В.Э., КАРАНКЕВИЧ Е.Г., КУВАЕВА З.И., ШАХАБ С.Н.

РАСЧЕТ ПОТЕНЦИАЛА БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ N-2-(4-АЦЕТИЛТИАЗОЛО-[5,4-В]-ИНДОЛИЛ)МОНОАМИДА ЯНТАРНОЙ КИСЛОТЫ..... 219

ПОХОДИЛО Н., ТУПИЧАК М., МАНЬКО Н., ФІНЮК Н., ОБУШАК М., СТОЙКА Р.

СИНТЕЗ НОВИХ КОНДЕНСОВАНИХ ПОХІДНИХ 1,2,3-ТРИАЗОЛУ ТА ПЕРСПЕКТИВИ ЇХ ВИКОРИСТАННЯ У ВІДКРИТТІ СПОЛУК ІЗ ПРОТИПУХЛИННОЮ ТА АНТИМІКРОБНОЮ ДІЄЮ 221

СТРИЖАК С.В., КУЛЕНКО О.А.

БІОЛОГІЧНИЙ ВПЛИВ ВІТАМІНУ С НА ОРГАНІЗМ ЛЮДИНИ 223

ЦИГАНКОВА В.А., АНДРУСЕВИЧ Я.В., КОПЧ В.М., ШТОМПЕЛЬ О.І., ВОЛОЩУК І.В., ПІЛЬО С.Г., ВЕЛІГІНА Є.С., КАЧАЄВА М.В., БРОВАРЕЦЬ В.С.

ПОШУК НОВИХ РЕГУЛЯТОРІВ РОСТУ РОСЛИН СОНЯШНИКУ СЕРЕД ПОХІДНИХ
ОКСАЗОЛО[4,5-*D*]ПРИМІДИНУ 225

ШАХАБ С.Н., КАРАНКЕВИЧ Е.Г., КУВАЄВА З.И., ЛОПАТИК Д.В.

СРАВНЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И БИОЛОГИЧЕСКОЙ
АКТИВНОСТИ ПРОИЗВОДНЫХ БРОМТИАЗОЛОИНДОЛА 226

ОРГАНІЧНА ХІМІЯ, ХІМІЯ ВИСОКОМОЛЕКУЛЯРНИХ СПОЛУК ..228

**SHERKASHINA A.N., MALYKHINA A.V., RASSOKHA O.M., LEBEDEV V.V.,
LAVROVA I.O.**

STUDY OF SHRINKING OF POLYMERIC COMPOSITE MATERIALS STRUCTURED IN
THE FIELD OF HDTV 229

DOROKHOV V. I., GROZAV A. N. , CHORNOUS V. A., VOVK M. V.

SYNTHESIS A NEW 5-FORMYLIMIDAZOLE-4-SULFONYL CHLORIDES 230

МΥΚΗΑΙΛΕΝΚΟ O.V., ΚΑΛΕΝΥΚ O.O., ΒΑΒΙΥ V.O., ΗΟΝΧΑΡΕΝΚΟ I.I.

“HOST-GUEST” INTERCALATE OF CARBON NANOTUBE WITH *BIS*(*H*5-
CYCLOPENTADIENYL)COBALT 232

**МΥΚΗΑΙΛΕΝΚΟ O.V., ΡΕΤΡΥΣΕΝΚΟ S.R., ΒΙΤΥШΙΝСКА YA.O., ΛΑΓΕΡΝΑ O.YU.,
ΗΟΝΧΑΡΕΝΚΟ I.I.**

DESIGN OF FULLERENE-LACTATE COMPLEXES 233

POLOZ O. YU.

MODIFICATION OF EPOXY RESINS WITH EPOXY-CONTAINING DILUENTS OF
VARIOUS NATURE AND FUNCTIONALITY 234

PRYSIAZHNUK D.V., KOLODIAZHNYI O.I.

ABSOLUTE CONFIGURATION OF VICINAL 2-BROM-2,3-DIHYDRO-1H-INDEN-1-OLS... 235

PRYSIAZHNUK D.V., KOLODIAZHNYI O.I.

DERACEMIZATION OF 2,3-DIHYDRO-1H-INDENOLS SUBSTITUTED IN AROMATIC
CYCLE USING IMMOBILIZED LIPASES..... 237

PURIKOVA O.H., GORBACH L.A., BROVKO O.O.

CHEMICAL AND MECHANICAL RESISTANCE OF BIOPOLYMERS BASED ON THE
CONVENTIONAL EPOXY RESIN AND CYCLOCARBONATED SOYBEAN OIL..... 238

**SHTAMBURG V.G., SHTAMBURG V.V., KRAVCHENKO S.V., ANISHCHENKO A.A.,
MAZEPA A.V.**

THE DIASTEREOSELECTIVE INTERACTION OF NINHYDRIN AND ARYLGLYOXALS
WITH THE DERIVATIVES OF *N*-HYDROXYUREA..... 242

TOLKUNOV V.S., TOLKUNOV A.S., SMIRNOVA O.V., TOLKUNOV S.V.

CONVENIENT SYNTHESIS OF IMIDAZO[1,5-*A*]PYRIMIDINE DERIVATIVES AND
UNUSUAL C/N TO C/C RECYCLIZATION INTO 3 *H*-IMIDAZO[4,5-*B*]PYRIDINE 243

**БРИКОВА О.М., ТРАВІНСЬКА Т.В., РОБОТА Л.П., САВЕЛЬСВ Ю.В., БЛЯВСЬКА
Л.О., ІУТИНСЬКА Г.О.**

СИНТЕЗ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ ВИКОРИСТАННЯ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ ПОЛІМЕРНИХ КОМПОЗИТІВ ДЛЯ СІЛЬСЬКОГОСПОДАРСЬКОГО ВИРОБНИЦТВА.....	245
БУДШЕВСЬКА О.Г., СОБУЦЬКИЙ О.П., КОСТИК О.А.	
КАТІОННИЙ КРОХМАЛЬ ДЛЯ СТВОРЕННЯ НОВИХ МАТЕРІАЛІВ.....	247
ВАХІТОВА Л.М, БЕССАРАБОВ В.І., ТАРАН Н.А.	
ДЕКОНТАМІНАЦІЙНІ СИСТЕМИ ДЛЯ ЗНИЩЕННЯ ГЛІФОСАТУ	249
ВІЛЕНСЬКИЙ В.О., СТАСЮК А.В., МАЗУРИК А.В., МАНДРІЙЧУК Б.В.	
КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ОЛІГОМЕРНИХ СПОЛУК ТА СИНТЕЗ ОЛІГОУРЕТАНІВ НА ЇХ ОСНОВІ	250
ГЕЛЕВЕРЯ А.А., КУЛИНИЧ В.О., КОВАЛЕНКО С.Н.	
СИНТЕЗ НОВИХ 1,2,3-ТРИАЗОЛОПИРИДИНОВИХ ГІБРИДНИХ МОЛЕКУЛ КАК ПОТЕНЦІАЛЬНИХ ПРОТИВОРАКОВИХ АГЕНТОВ.....	252
ГЛІБОВ Є.К., МОСКВІНА В.С., ШОКОЛ Т.В., ХИЛЯ В.П.	
СИНТЕЗ ПОХІДНИХ ПСОРАЛЕНУ І АНГЕЛІЦИНУ В РЯДУ НЕОФЛАВОНІДІВ	253
ГОНЧАР О.М.	
СТВОРЕННЯ ВОДОДИСПЕРГУЮЧОГО ОРГАНОМОДИФІКОВАНОГО МОНТМОРИЛОНІТУ	255
ГРИГОРКА Г.В., ФІЗЕР М.М., СЛИВКА М.В.	
ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНІ РЕЧОВИНИ КЛАСУ [1,3]ТІАЗОЛО[2,3-С][1,2,4]ТРИАЗОЛУ	257
ДУТКА В.С., МІДЯНА Г.Г., ДУТКА Ю.В.	
ОСОБЛИВОСТІ N-ОКИСНЕННЯ АЗОТОВМІСНИХ СПОЛУК ПЕРОКСИКИСЛОТАМИ	258
ЗІНЧЕНКО Г.М.	
ПОХІДНІ 6-АМІНОПІРИДО[2,3- <i>D</i>]ПІРИМІДИН-7-ОНУ ЯК ПОТЕНЦІЙНІ ІНГІБІТОРИ ПРОТЕЇНКІНАЗИ FGFR1	259
ЗІНЧЕНКО О.В., ТОЛСТОВ ОЛ.	
ОДЕРЖАННЯ ДИСПЕРСНИХ МЕТАЛОКОМПОЗИТІВ ПВХ-Аg МЕТОДОМ ХІМІЧНОГО ОСАДЖЕННЯ.....	262
КАРАНДАШОВ О. Г., ХАЦІНСЬКА А.В., АВРАМЕНКО В.Л., ПІДГОРНА Л.П.	
ВПЛИВ ТЕМПЕРАТУРИ СТРУКТУРУВАННЯ ПОЛІМЕРНОГО КОМПАУНДУ НА СТАБІЛІЗАЦІЮ ФІЗИКО-МЕХАНІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ СКЛОПЛАСТИКОВИХ ВИРОБІВ	263
КАРІ'ЯК В.В., ЛЕСЮК О.І., ОБУШАК М.Д.	
ВЗАЄМОДІЯ N-ЗАМІЩЕНИХ ПОХІДНИХ ІЗАТИНУ З РОДАНІНОМ ТА ВТОРИННИМИ АМІНАМИ	264
КЛІМКО Ю.Є.	
ЕЛЕКТРОХІМІЧНА ЦИКЛІЗАЦІЯ БІЦИКЛО[5.2.1]ДЕКА-2,6-ДИОНУ	265
КЛІМКО Ю.Є.	
ОКСАЗОЛОНОВИЙ МЕТОД СИНТЕЗУ ПОХІДНИХ АДАМАНТИЛ-А-АМІНОКИСЛОТ	265
КЛІМКО Ю.Є.	
СИНТЕЗ АДАМАНТИЛВМІСНИХ ПОХІДНИХ ПРИРОДНИХ АМІНОКИСЛОТ.....	266

КОВТУН А.В., ВАРЕНИЧЕНКО С.А., ФАРАТ О.К., МАРКОВ В.І.	
РЕЦИКЛІЗАЦІЯ СПРОПОХІДНИХ 1,3-БЕНЗО(НАФТО)ДІОКСИН-4(1)-ОНІВ ЯК НОВИЙ МЕТОД СИНТЕЗУ БРОМПОХІДНИХ КСАНТЕНІВ	267
КОНОВАЛЕНКО А.С., ШАБЛИКІН О.В., ШАБЛИКІНА О.В., БРОВАРЕЦЬ В.С.	
ВЗАЄМОДІЯ 3-АЦИЛІЗОКУМАРИНІВ З ПЕРВИННИМИ АМІНАМИ	268
КОРНІЙ Ю.Є., ШАБЛИКІН О.В., БРОВАРЕЦЬ В.С.	
СИНТЕЗ НОВИХ АМІНОКИСЛОТНИХ ІМІНОГІДАНТОЇНОВИХ СУЛЬФОНАМІДІВ	270
КОРНІЙ Ю.Є., КЛІМОВА О.О., ШАБЛИКІН О.В., БРОВАРЕЦЬ В.С., БРАЖКО О.А.	
ОЦІНКА ТОКСИЧНОСТІ АМІДІВ (5-(ДИХЛОРОМЕТИЛЕН)-2-ОКСОІМІДАЗОЛІДИН-4- ІЛІДЕН)СУЛЬФАМІНОВОЇ КИСЛОТИ	272
КАТРУК Д.С., МАСЮК А.С., КИСІЛЬ Х.В., КУЛІШ Б.І., ЛЕВИЦЬКИЙ В.Є.	
ВПЛИВ ПРИРОДИ НАПОВНЮВАЧА НА МОРФОЛОГІЮ І ВЛАСТИВОСТІ ПОЛІАКТИДНИХ МАТЕРІАЛІВ.....	274
КОРОЛЬ Н.І., ГОЛОВКО-КАМОШЕНКОВА О.М., СЛИВКА М.В.	
ЕЛЕКТРОФІЛЬНА ВНУТРІШНЬОМОЛЕКУЛЯРНА ЦИКЛІЗАЦІЯ ПЕНТЕНІЛЬНОГО ТІОПОХІДНОГО 1,2,4-ТРИАЗОЛУ	275
КУКУШКІНА К.В., МОСКВІНА В.С., ШАБЛИКІНА О.В., ІЩЕНКО В.В., ХИЛЯ В.П.	
ЗАСТОСУВАННЯ ЕНАМІНОКЕТОНІВ 2'-КАРБОКСИДЕЗОКСИБЕНЗОЇНІВ В СИНТЕЗІ ІЗОХРОМЕН-1-ОНІВ ТА ІЗОХІНОЛОНІВ	276
КУТ Д.Ж., КУТ М.М., ОНИСЬКО М.Ю., БАЛОГ І.М., ЛЕНДСЛ В.Г.	
ТЕЛУРОІНДУКОВАНА ЕЛЕКТРОФІЛЬНА ВНУТРІШНЬОМОЛЕКУЛЯРНА ЦИКЛІЗАЦІЯ 3-АЛКЕНІЛ-2-ТІО-2,3-ДИГІДРОХІНАЗОЛІН-4(1 <i>H</i>)-ОНІВ ІНДИВІДУАЛЬНИМ ТЕТРАХЛОРИДОМ ТЕЛУРУ	278
МАКОЦЬКА О. Ю., ЮТІЛОВА К. С., ШВЕД О. М.	
ЕФЕКТ ТЕМПЕРАТУРИ І СТРУКТУРИ РЕАГЕНТА НА АЦИДОЛІЗ ЕПІХЛОРОГІДРИНУ ПРИ КАТАЛІЗІ ТЕТРА- <i>H</i> -БУТИЛАМОНІЙ ХЛОРИДОМ	279
МАТЮШОВ В.Ф., ТОЛСТОВ О.І.	
РІДКІ ФОТОПОЛІМЕРНІ СИСТЕМИ ДЛЯ БАГАТОШАРОВОГО УДАРОСТІЙКОГО СКЛА	280
МИХАЛЬЧЕНКО О.А., ДЕМИДЧУК Б.А.	
СИНТЕЗ 2-(4-ТОЛІЛ)-1 <i>H</i> -БЕНЗО[4,5]ІМІДАЗО- [1,2- <i>A</i>][1,3,5]ТРИАЗЕПІН-5(4 <i>H</i>)-ОНУ ...	281
МИШАК В.Д., СЕМИНОГ В.В., СІРИК О.М., МУЖЕВ В.В.	
СИНТЕЗ КОМПАТИБІЛІЗАТОРІВ ДЛЯ СТВОРЕННЯ КОМПОЗИЦІЙНИХ ПОЛІМЕРНИХ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ ВТОРИННОЇ СИРОВИНИ.....	282
ПОДГОРНА О. В., ВІЛЕНСЬКИЙ В. О.	
БІОРОЗКЛАДНІ ПОЛІМЕРНІ МАТЕРІАЛИ НА ОСНОВІ КРОХМАЛЮ	284
РАССОХА О.М., ЧЕРКАШИНА Г.М., ДЕРІУС Д.В.	
ЗАХИСНІ АНТИКОРОЗІЙНІ ПОКРИТТЯ ДЛЯ МАГІСТРАЛЬНИХ ГАЗОПРОВІДІВ ТА ІНШОГО ТЕХНОЛОГІЧНОГО ОБЛАДНАННЯ НА ОСНОВІ МОДИФІКОВАНИХ ФУРФУРИНО-ЕПОКСИДНИХ ПОЛІМЕРНИХ СИСТЕМ.....	286
РАССОХА О.М., ЧЕРКАШИНА Г.М., МАЖУГА О.В.	
ВИКОРИСТАННЯ ФУРАНОВИХ ФУНКЦІОНАЛЬНО МОДИФІКОВАНИХ ВИСОКОМОЛЕКУЛЯРНИХ СПОЛУК ПРИ ОДЕРЖАННІ БЕЗВИПАЛЬНИХ ПЕРИКЛАЗВОВУГЛЕЦЕВИХ ВОГНЕТРИВКИХ ВИРОБІВ	288

РЕДЬКА М.О., БЛАГУН О.П., ГРИГОРЕНКО О.О., ВОЙТЕНКО З.В.	
НОВИЙ РЕАГЕНТ ДЛЯ СИНТЕЗУ ГЕМ-ДИФТОРОСТИРЕНІВ.....	291
САЛІЄВА Л.М., СЛИВКА Н.Ю., ЛУКАЩУК М.М., ВОВК М.В.	
СИНТЕЗ ТА ОЦІНКА ПРОТИМІКРОБНОЇ ДІЇ 6- АРИЛІДЕН-2-МЕТИЛІМІДАЗО[2,1-В]ТІАЗОЛІВ.....	292
СВЕРДЛІКОВСЬКА О.С., ЧЕРВАКОВ О.В., ФУРСА О.О.	
ПОЛІМЕРНІ ІОННІ РІДИНИ ІОНЕНОВОГО ТИПУ НА ОСНОВІ ПОХІДНИХ ТЕТРАГІДРО-1,4-ОКСАЗИНУ ТА 1,2-ЕПОКСИ-4,7-ДІОКСОНОНЕН-8	294
СМЕТАНІН М.В., ТОКАРЄВА С.В., ВАРЕНИЧЕНКО С.А., ФАРАТ О.К., МАРКОВ В.І.	
СИНТЕЗ ТА ПРОГНОЗУВАННЯ <i>IN SILICO</i> БІОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ ПОХІДНИХ ГІДРОАКРИДИНІВ (ХІНОЛІНІВ).....	296
СТАНІЦЬКА М.О., ПОХОДИЛО Н.Т., КЕРУЦКІЄНСЬ Р., БУТЕНКО С.О., КІНЖИБАЛО В., ЛИТВИН Р.З., ГРАЖУЛЄВІЧУС Ю.В., ОБУШАК М.Д.	
СИНТЕЗ ЕСТЕРІВ 1-(4-(КАРБАЗОЛ-9-ІЛ)-ФЕНІЛ)-5-МЕТИЛ/ТРИФТОРОМЕТИЛ-1,2,3-ТРИАЗОЛ-4-КАРБОНОВИХ КИСЛОТ	297
СТАРОСТЕНКО О.М., ФАЙНЛЕЙБ О.М., ГРИГОР'ЄВА О.П., GOUANVE F., ESPUCHE E., GRANDE D.	
СТРУКТУРА І ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НАНОКОМПОЗИТІВ НА ОСНОВІ ПОЛІЦІАНУРАТІВ З АМІНО-ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНИМИ ПОСС	298
СТАРОСТЕНКО О.М., ГРИГОР'ЄВА О.П., ШУЛЬЖЕНКО Д.М., ФАЙНЛЕЙБ О.М.	
КІНЕТИКА ФОРМУВАННЯ ЦІАНОВОГО ЕСТЕРУ БІСФЕНОЛУ Е ЗА ПРИСУТНОСТІ БЕНЗОКСАЗИНУ З БІСФЕНОЛУ А.....	301
ТРИБРАТ О.О., ЄСИПЕНКО О.А., КАЛЬЧЕНКО В.І.	
ВИКОРИСТАННЯ N-(1-ФЕНІЛЕТІЛ)АМІДНОЇ ГРУПИ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ АБСОЛЮТНОЇ КОНФІГУРАЦІЇ ВНУТРІШНЬОХІРАЛЬНИХ КАЛІКСАРЕНІВ ЗА МЕТОДОМ МОШЕРА	304
ТУПИЧАК М.А., ШИЙКА О. Я., ПОХОДИЛО Н.Т., ОБУШАК М.Д.	
2-(3-АРИЛ-1,2,4-ОКСАДІАЗОЛ-5-ІЛ)АЦЕТОНИТРИЛИ В РЕАКЦІЯХ 1,3-ДИПОЛЯРНОГО ЦИКЛОПРИЄДНАННЯ.....	306
ШУЛЯТИЦЬКИЙ І.В., ЛИСТВАН В.В.	
НОВІ ГІДРАЗОНІ І СЕМІКАРБАЗОНІ НА ОСНОВІ АРИЛЬНИХ ПОХІДНИХ ВАНІЛІНУ ЯК ПОТЕНЦІЙНІ БІОЛОГІЧНО АКТИВНІ РЕЧОВИНИ.....	307
ШУМЕЙКО О.Є., БУРАКОВ М.І.	
ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНІ ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНІ РЕЧОВИНИ НА ОСНОВІ ІМІДАЗОЛУ І ТРІАЛКЛАМОНІО - ЕФЕКТИВНІ СИСТЕМИ ДЛЯ РОЗЩЕПЛЕННЯ ТОКСИЧНИХ ЕФІРІВ КИСЛОТ ФОСФОРУ ТА СІРКИ.....	308
ЯРЕМЧУК І.О., ВЕРВЕС Є.В.	
СИНТЕЗ ПОХІДНИХ ПІРОЛО[2,3-D]ПІРИМІДИН-6-КАРБОНОВОЇ КИСЛОТИ.....	309

АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ ХІМІЧНОЇ ОСВІТИ.....311

АВДЄЄВА О.Ю.

ПРОЄКТНА ТЕХНОЛОГІЯ НАВЧАННЯ ХІМІЇ ЯК ВАЖЛИВА СКЛАДОВА НАВЧАЛЬНО-ПІЗНАВАЛЬНОЇ ДІЯЛЬНОСТІ ЗДОБУВАЧІВ ОСВІТИ..... 312

АЛЕКСЄЄВА О.О., ЄВДОЧЕНКО О.С.

СПОСОБИ ДОБУВАННЯ ГАЗІВ. ВИЗНАЧЕННЯ ГУСТИНИ ТА МОЛЯРНОЇ МАСИ ГАЗІВ..... 314

АНІЧКІНА О.В.

ГЕЙМІФІКАЦІЯ: ЩО ЧЕКАЄ ХІМІЧНУ ОСВІТУ ДАЛІ?..... 316

АНТРАПЦЕВА Н.М., БІЛА Г.М

ПИТАННЯ ВИБОРУ СТУДЕНТАМИ ХІМІЧНИХ ДИСЦИПЛІН..... 318

БАРАШИВЕЦЬ І.С., ЄВДОЧЕНКО О.С.

СУБЛІМАЦІЯ ТА ЇЇ ВИКОРИСТАННЯ В ХІМІЧНОМУ ЕКСПЕРИМЕНТІ..... 320

БАРДАДИМ О. В.

ПОРІВНЯЛЬНИЙ АНАЛІЗ ІНТЕРАКТИВНИХ-ОНЛАЙН ПЕРІОДИЧНИХ ТАБЛИЦЬ ХІМІЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ..... 321

БЕЙ І.М., ТОЛСТОВ О.Л., БУТКЕВИЧ А.М., ХЛЮПА І.О., ПЕЩЕРІНА Т.В.

ВСЕУКРАЇНСЬКИЙ ОСВІТНИЙ ПРОЄКТ НЦ «МАНУ» ТА КОРПОРАЦІЇ DOW «ПОЛІМЕРИ ТА ЕКОЛОГІЯ» : ЗРОБИТИ НАУКУ ПРО ПОЛІМЕРИ ДОСТУПНІШОЮ ДЛЯ ШКОЛЯРІВ 323

БОНДАРУК К.А., ГОРБУЛЬ А.М., КАМІНСЬКИЙ О.М.

ДО ПРОБЛЕМИ ФОРМУВАННЯ ПОНЯТЬ ПРО ХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ВОДНЮ (НА ПРИКЛАДІ РЕАКЦІЇ ГОРІННЯ ВОДНЮ НА ПОВІТРІ) У КУРСІ ХІМІЇ 11 КЛАСУ (ПРОФІЛЬНИЙ РІВЕНЬ) ЗАГАЛЬНООСВІТНЬОЇ ШКОЛИ В УМОВАХ ДИСТАНЦІЙНОГО НАВЧАННЯ 325

БОНДАРЧУК Т.О.

ХІМІЧНІ ЗАДАЧІ ЕКОЛОГІЧНОГО ЗМІСТУ ЯК ЕФЕКТИВНИЙ ЕЛЕМЕНТ ЕКОЛОГІЧНОГО ВИХОВАННЯ ТА СПОСІБ ВПРОВАДЖЕННЯ ПОНЯТЬ КОНЦЕПЦІЇ СТАЛОГО РОЗВИТКУ 326

БРІК О.В., АНІЧКІНА О.В.

МЕТОДИКА ТА ЗАСОБИ ДИСТАНЦІЙНОГО ВИВЧЕННЯ ТЕМИ «ХІМІЧНІ РЕАКЦІЇ» КУРСУ ХІМІЇ ЗАКЛАДУ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ..... 328

БУТЕНКО О. М., ПЕТРОВСЬКА В. В. ПРОБЛЕМИ ХІМІЧНОЇ ОСВІТИ В УМОВАХ ПАНДЕМІЇ COVID-19 330

ГОНЧАРУК Л.О., ТІТОВ Ю.О.

МЕТОДИКА ТА ЗАСОБИ ДИСТАНЦІЙНОГО ВИВЧЕННЯ ТЕМИ «НІТРОГЕНОВМІСНІ ОРГАНІЧНІ СПОЛУКИ» (РІВЕНЬ СТАНДАРТУ) ЗАКЛАДУ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ 332

ДЕРКАЧ Г.О.

МІЖДИСЦИПЛІНАРНА ІНТЕГРАЦІЯ ПРИ ВИВЧЕННІ ТОКСИКОЛОГІЧНОЇ ТА СУДОВОЇ ХІМІЇ СТУДЕНТАМИ КАФЕДРИ ХІМІЇ ФАРМАЦЕВТИЧНОГО ФАКУЛЬТЕТУ 334

ЖИЛЬЦОВА С.В.

ВИКЛАДАННЯ ДИСЦИПЛІНИ «ІНФОРМАЦІЙНІ СИСТЕМИ І РЕСУРСИ В ХІМІЇ» В УМОВАХ КАРАНТИННИХ ОБМЕЖЕНЬ..... 334

ЖИТНИК О. П., ЮТІЛОВА К. С., ШВЕД О. М., РОЗАНЦЕВ Г. М.

СТВОРЕННЯ ЕЛЕКТРОННОГО НАВЧАЛЬНОГО КУРСУ «ТЕРМОДИНАМІЧНІ ТА КІНЕТИЧНІ АСПЕКТИ ПЕРЕБІГУ РЕАКЦІЙ. ВПЛИВ ТЕМПЕРАТУРИ» НА ПЛАТФОРМІ MOODLE..... 336

ЗАБОЛОТНА М. В., БАХАЛОВА Є.А., ШВЕД О.М.

АДАПТАЦІЯ КУРСУ «СУЧАСНІ МЕТОДИ СИНТЕЗУ НЕОРГАНІЧНИХ ТА ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК» ДО ВИКЛАДАННЯ НА ПЛАТФОРМІ MOODLE..... 337

ЗАВАДСЬКА С. В.

МЕТОДИКА ТА ЗАСОБИ ДИСТАНЦІЙНОГО ВИВЧЕННЯ ТЕМИ "ТЕОРІЯ БУДОВИ ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК" КУРСУ ХІМІЇ (РІВЕНЬ СТАНДАРТУ) ЗАКЛАДУ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ 338

ІВАНІЧЕВА Р. В., ПРИБОРА Н. А.

АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ ХІМІЧНОЇ ОСВІТИ У ЗАКЛАДАХ З ПОГЛИБЛЕНИМ ВИВЧЕННЯМ ХІМІЇ..... 339

КУСЯК Н.В., КОЛЕСНИКОВА І.Ю.

ОСОБЛИВОСТІ ЕЛЕКТРОННОГО ТЕСТУВАННЯ З ХІМІЇ В УМОВАХ ДИСТАНЦІЙНОГО НАВЧАННЯ..... 340

ЛОМАНЧУК А.Л., АНІЧКІНА О.В.

МЕТОДИКА ТА ЗАСОБИ ДИСТАНЦІЙНОГО ВИВЧЕННЯ ТЕМИ «ПОЧАТКОВІ ПОНЯТТЯ ПРО ОРГАНІЧНІ СПОЛУКИ» КУРСУ ХІМІЇ ЗАКЛАДУ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ..... 341

МЕЛЬНИК Т.М., АНІЧКІНА О.В.

МЕТОДИКА ТА ЗАСОБИ ДИСТАНЦІЙНОГО ВИВЧЕННЯ ТЕМИ « РОЗЧИНИ» КУРСУ ХІМІЇ ЗАКЛАДУ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ 342

МІДАК Л.Я., КУЗИШИН О.В., БУЖДИГАН Х.В., ПАХОМОВ Ю.Д.

ВИКОРИСТАННЯ ТЕХНОЛОГІЇ AUGMENTED REALITY ДЛЯ ПРОВЕДЕННЯ ІНТЕГРОВАНИХ УРОКІВ БІОХІМІЧНОГО СПРЯМУВАННЯ..... 344

НЕУК Ю. П., АНІЧКІНА О. В.

ВАГОВИЙ МЕТОД У ДОСЛІДЖЕННІ ЯКОСТІ ПОВІТРЯ 346

ОЛЬХОВСЬКА Л.Л., КАМІНСЬКИЙ О.М.

ФОРМУВАННЯ ПОНЯТЬ ПРО КОЛОЇДНІ РОЗЧИНИ В КУРСІ ХІМІЇ 11 КЛАСУ ЗАКЛАДУ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ ЗАСОБАМИ ДИСТАНЦІЙНОГО НАВЧАННЯ..... 346

ПЕРЛОВА О.В., АБАЛАКІНА А.О.

ОРГАНІЗАЦІЯ СИСТЕМНОГО ВИВЧЕННЯ ТЕМИ «РОЗЧИНИ» В 9 КЛАСІ ЗАГАЛЬНООСВІТНІХ ШКІЛ..... 348

ПОЛЩУК А.О., КУСЯК Н.В.

ОСОБЛИВОСТІ ОЦІНЮВАННЯ НАВЧАЛЬНИХ ДОСЯГНЕНЬ УЧНІВ ПРИ ВИВЧЕННІ ХІМІЇ В УМОВАХ ПАНДЕМІЧНОЇ КРИЗИ 349

ПОДОРОЖНЯ О.О., РОМАНИШИНА Л.М.	
МЕТОДИКА ТА ЗАСОБИ ДИСТАНЦІЙНОГО ВИВЧЕННЯ ТЕМИ «ОСНОВНІ КЛАСИ НЕОРГАНІЧНИХ СПОЛУК» КУРСУ ХІМІЇ ЗАКЛАДУ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ	350
СВИРИДЮК А.В., ЄВДОЧЕНКО О.С.	
СПОСОБИ ПЕРЕВІРКИ РІДИННИХ ТЕРМОМЕТРІВ	351
СВИРИДЮК А.П., АНІЧКІНА О. В.	
МЕТОДИКА ТА ЗАСОБИ ДИСТАНЦІЙНОГО ВИВЧЕННЯ ТЕМИ «ПЕРІОДИЧНИЙ ЗАКОН ТА ПЕРІОДИЧНА СИСТЕМА ХІМІЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ» КУРСУ ХІМІЇ ЗАКЛАДУ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ.....	353
СВІДЕРСЬКА Т.С.	
МЕТОДИКА ТА ЗАСОБИ ДИСТАНЦІЙНОГО ВИВЧЕННЯ ТЕМИ “КИСЕНЬ” КУРСУ ХІМІЇ ЗАКЛАДУ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ	354
СОЛДАТКІНА Л.М.	
СТРАТЕГІЯ ВПРОВАДЖЕННЯ ЗМІШАНОГО НАВЧАННЯ В ОСВІТНІЙ ПРОЦЕС ХІМІЧНИХ ФАКУЛЬТЕТІВ ЗВО	356
СОФІЮК С.В., ДЕНИСЮК Р.О.	
МЕТОДИЧНІ ОСОБЛИВОСТІ ВИКОРИСТАННЯ ІНОЗЕМНОЇ МОВИ ПІД ЧАС ВИВЧЕННЯ ХІМІЇ В СУЧАСНОМУ ЗАКЛАДІ СЕРЕДНЬОЇ БАЗОВОЇ ОСВІТИ.....	357
ТКАЧ В.В., КУШНІР М.В., МІНАКОВА Т.Г., СОКОЛ Н.В., ІВАНУШКО Я.Г.	
КОМБІНОВАНІ ХІМІКО-МАТЕМАТИЧНІ ЗАДАЧІ В БРАЗИЛЬСЬКОМУ СТИЛІ НА ФУТБОЛЬНУ ТЕМАТИКУ	359
ФІРСОВСЬКА Н.Ю., АНІЧКІНА О. В.	
МЕТОДИКА ТА ЗАСОБИ ДИСТАНЦІЙНОГО НАВЧАННЯ, ВИВЧЕННЯ ТЕМИ «ПОЧАТКОВІ ХІМІЧНІ ПОНЯТТЯ» КУРСУ ХІМІЇ ЗАКЛАДУ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ.....	361
ХОДЮК О. В.	
ХІМІЧНИЙ ПОСУД: КЛАСИФІКАЦІЯ, ВИРОБНИЦТВО: УКРАЇНСЬКІ РЕАЛІЇ	363
ЧЕТВЕРТАК Т.Ю.	
МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ТИТРУВАННЯ РОЗЧИНІВ НА ЗАНЯТТЯХ АНАЛІТИЧНОЇ ХІМІЇ.....	364
ШВЕЦЬ О.Г., ІВЧЕНКО В.Д.	
ФОРМУВАННЯ НАУКОВО-ДОСЛІДНИЦЬКОЇ КОМПЕТЕНТНОСТІ СТУДЕНТІВ ПРИ ВИВЧЕННІ ХІМІЇ.....	366
ШИЛЮК В.В., ДЕНИСЮК Р.О., КАМІНСЬКИЙ О.М.	
ЩОДО ОСОБЛИВОСТЕЙ ВИКЛАДАННЯ ТЕМИ "РОЛЬ ХІМІЇ В ЖИТТІ СУСПІЛЬСТВА" В СУЧАСНОМУ ЗАКЛАДІ СЕРЕДНЬОЇ БАЗОВОЇ ОСВІТИ.....	368

Авторський покажчик

- Amirkhanashvili K.D.* 144
Andriyko L.S. 142
Anishchenko A.A. 242
Asrorov A.A. 142
Avramenko Y.Y. 67
- Babiy V.O.* 232
Babizhetskyy V. 131
Bodachivska L.Yu. 61
Bondarenko M.E. 62, 64
Brovko O.O. 238
Butenko E. O. 132
- Cherkashina A.N.* 229
Chernii V.Ya. 133
Chernii S.V. 133
Chornous V. A. 230
- Dmytriv G.* 134
Doniyarov N.A. 142
Dorokhov V. I. 230
- Espuche E.* 298
- Fesenko O.I.* 136
- Gorbach L.A.* 238
Gorbyk P.P. 67
Gorelov B.M. 66
Gorski A.V. 133
Gouanve F. 298
Grande D. 298
Grozav A. N. 230
Gubareni N.I. 62, 64
- Honcharenko I.I.* 232, 233
- Ilchuk O.R.* 202
- Kalenyk O.O.* 232
Khmaladze L.I. 144
Khyzhun O.Y. 62, 64
Kirillov S.A. 68
Kolodiazhnyi O.I. 235, 237
Konyk M. 135
Kravchenko S.V. 242
Kudelko K.O. 71
Kusyak N.V. 67, 202
Kusyak A.P. 67, 202
- Lagera O.Yu.* 233
Lavrova I.O. 229
Lebedev V.V. 229
- Levytskyi V.* 131
Losytskyi M.Yu. 133
Lystvan K.V. 6
Lystvan V.V. 6
- Malykhina A.V.* 229
Mazepa A.V. 242
Molchanova K.I. 136
Molodinashvili Z.F. 144
Murodov I.N. 142
Mykhailenko O.V. 232, 233
- Ogenko V.M.* 71
- Pavlyuk N.* 134
Pavlyuk V. 134
Pekhnyo V.I. 133
Perehristyuk M.M. 202
Petrusenko S.R. 233
Poloz O. Yu. 234
Potapenko A.V. 68
Potapenko O. 68
Prysiashnuk D.V. 235, 237
Purikova O.H. 238
Pylypenko O. 70
- Ragulya A.V.* 62, 64
Rassokha O.M. 229
Romaka L. 135
Rozhdestvenka L. M. 71
- Savvova O.V.* 136
Shapovalov S. A. 141
Shtamburg V.G. 242
Shtamburg V.V. 242
Shvalagin V.V. 62, 64
Sigareva N.V. 66
Silenko P.M. 62, 64
Smirnova O.V. 243
Solonin Yu.M. 62, 64
Stadnyk Yu. 135
Starukhin A.S. 133
- Tagaev I.A.* 142
Tolkunov A.S. 243
Tolkunov S.V. 243
Tolkunov V.S. 243
Tretyakova I.M. 133
Tsuber V.Y. 203
- Vitushinska Ya.O.* 233
Voronov H.K. 136
Vovk M. V. 230
- Yarova N.Yu.* 62, 64
Zahornyi M.M. 62, 64
Zhorzholiani N.B. 144
Zhou. 68
- Абалакіна А.О.* 348
Абрамов М.В. 82
Авдєєва О.Ю. 312
Авраменко В.Л. 263
Алексєєва О.О. 314
Альохіна Т.М. 7
Андрусевич Я.В. 225
Анічкіна О. В. 316, 328, 341, 342, 346, 353, 361
Антонович В.П. 58
Антрапова Н.М. 9, 145, 146, 148, 318
Ахтирко М.І. 73
- Білова Ю.С.* 74
Балог І.М. 278
Барашивець І.С. 320
Барвінченко В.М. 28
Бардадим О. В. 321
Барцевська Г.К. 199
Бахалова Є.А., 337
Бей І.М. 323
Бессарабов В.І. 249
Белякова Л.О. 110
Биков О.І. 128, 199
Біла Г.М. 9, 145, 318
Білова Ю.С. 102
Більченко М.М. 11
Білявська Л.О. 245
Благун О.П. 291
Бойчук Б.Я. 13
Бондарук К.А. 325
Бондарчук Т.О. 326
Бонюк М. 15
Борисов Ю.С. 150
Борова М.М. 75
Бражко О.А. 272
Брикова О.М. 245
Брік О.В. 328
Броварець В.С. 225, 268, 270, 272
Будішевська О.Г. 247
Буждиган Х.В. 344
Бураков М.І. 308
Бутенко О. М., 330
Бутенко С.О. 297
Бутенко Э.О. 151
Буткевич А.М. 323

Вакулюк П.В.....	78, 91	Демидчук Б.А.....	281	Іутинська Г.О.....	245
Варгальок В.Ф.....	179	Денисюк Р. О.	74, 102, 125, 190, 191, 357, 368	Іщенко В.В.....	276
Варениченко С.А.....	267, 296	Денисюк Р.Ю.....	180	Калафат К.В.....	127
Василенко І.М.....	146	Деріус Д.В.....	286	Каленюк І.С.....	166
Васильєв Г.С.....	24	Деркач Г.О.....	334	Калініченко С.В.....	120
Вахітова Л.М.....	127, 249	Дзьобань Т.В.....	210	Калінкевич О.В.....	215
Векліч Т.О.....	205	Дзязько Ю. С.....	158, 182	Калінкевич О.М.....	215
Величко О.В.....	153	Дитинченко І.М.....	50	Кальченко В.І.....	304
Величко О.О.....	45	Дістанов В.Б.....	210	Камінський О.М.	21, 96, 106, 166, 193, 325, 346, 368
Велігіна Є.С.....	225	Долинюк К. М.....	182	Каракуркчі Г.В.....	109, 113
Вервес Є.В.....	309	Домар Н. А.....	107	Карандашов О. Г.....	263
Віленський В. О.....	250, 284	Домінюк Н.І.....	160	Каранкевич Е.Г.....	219, 226
Владимирова Т.Ю.....	209	Дорошкевич Н.Ф.....	40	Кардаш О.О.....	205
Вовк М.В.....	292	Дубей І.Я.....	217	Карп'як В.В.....	264
Вовк О.М.....	115	Дубровін І.В.....	82, 104	Касьяненко Г.Я.....	11
Войтенко З.В.....	291	Дубровіна Л.В.....	104	Катрук Д.С.....	274
Войтюк О.Д.....	43	Дуванова Е.С.....	184	Качаєва М.В.....	225
Волкова Л. К.....	154, 177	Дударко О.А.....	89, 122	Керуцкієнє Р.....	297
Волощук В.В.....	77	Дутка В.С.....	258	Киосе Т.А.....	168
Волощук І.В.....	225	Дутка Ю.В.....	258	Киосе Т.М.....	168
Воробійова В.І.....	24	душ Рейш Л.В. 49, 50, 51, 52, 54, 55		Кисіль Х.В.....	274
Вретік Л.О.....	38	Дьомін Д.М.....	145	Кичкирук О.Ю.....	15, 39, 174
Гайдай А.Р.....	78	Євдоченко О.С..	314, 320, 351	Кінжибало В.....	297
Гелеверя А.А.,	252	Євсєєва М.В.....	165	Климович О.С.....	16
Геращенко І.І.....	80	Єгорова А.В.....	43	Клімко Ю.Є.....	265, 266
Гладун К. В.....	24	Ємець А.І.....	75	Клімова О.О.....	272
Глібов Є.К.....	253	Єрко Д.В.....	17	Кловак В.О.....	22
Голінько О.М.....	23	Єрмоленко І.Ю.....	113	Ключков Д.Г.....	80
Головко-Камошенкова О.М.	275	Єсипенко О.А.....	304	Кобилінська Н.....	89
Голуб О.А.....	78	Єфімова Н.В.....	197	Коваленко С.Н.....	252
Гольден О.В.....	205	Жилко В.В.....	32	Коваль А.В.....	23
Гончар О.М.....	255	Жилко В.І.....	16	Ковалюк З.Д.....	118
Гончарук Л.О.....	332	Жильцова С.В.....	334	Ковтун А.В.,	267
Горбик П.П.,	82	Жиляк І.Д.....	161	Козакевич Р.Б.....	78, 91
Горбуль А.М.....	325	Житник О. П.,	336	Колесникова І.Ю.....	340
Горинь А.М.....	156, 185	Жох О.О.....	163	Коломієць Є.О.....	158
Горюнова І.І.....	75	Заболотна М. В.....	337	Кондратенко О.У.....	38
Григоренко О.О.....	291	Завадська С. В.....	338	Конишева К.М.....	169, 170
Григор'єва О.П.. 85, 298, 301		Заремба В.І.....	160	Коноваленко А.С.....	268
Григорка Г.В.....	257	Захаров А.В.....	77	Коновалова О. Ю.....	27
Гринь Л.О.....	115	Зінченко Г.М.....	259	Копійка В.В.....	52, 54
Губченко Т. Д.....	107	Зінченко Є.І.....	215	Копілевич В.А.....	161
Гузенко Н.В.....	83	Зінченко О.В.....	262	Копіч В.М.....	225
Гулай О.І.....	16	Зосенко О.....	212	Кордиш О.М.....	165
Гусакова К.Г.....	85	Зубрицька Л.О.....	213	Коркуна О.Я.....	25
Гражулевічус Ю.В.....	297	Зьолко Т.В.....	213	Кормош Ж.О. .. 41, 49, 50, 51, 52, 54, 55	
да Сілва А.О ... 49, 50, 51, 52, 54, 55		Зюбрицька Ю.І.....	165	Корнієнко О.А.....	128, 199
Давискиба В.В.....	161	Іванічева Р. В:	339	Корній Ю.Є.....	270, 272
Данильченко С.М.....	215	Іванушко Я.Г.....	49, 50, 51, 52, 54, 55, 359	Корнякова О. О.....	24
Данюкіна О.М.....	168	Івченко В.Д.....	366	Король Н.І.....	275
де Олівейра С.С.... 49, 50, 51, 52, 54, 55		Ігнатенко М.І.....	19	Корольчук С.І.....	41
Дем'яненко Є.М.....	78			Костик О.А.....	247
				Костів О.І.....	25
				Кравченко А.А.....	83

<i>Красноп'орова А.П.</i>	197	<i>Марчук О.В.</i>	100	<i>Перлова О. В.</i>	182, 348
<i>Кривобок Р.В.</i>	77	<i>Масюк А.С.</i>	274	<i>Петрова А.О.</i>	39
<i>Кроніковський О.І.</i>	23, 26	<i>Матюшов В.Ф.</i>	280	<i>Петровська В. В.</i>	330
<i>Куваєва З.И.</i>	219, 226	<i>Мельник І.В.</i>	122	<i>Пещеріна Т.В.</i>	323
<i>Кузишин О.В.</i>	344	<i>Мельник К.В.</i>	58	<i>Писаренко С.В.</i>	106
<i>Кузів Я.Б.</i>	217	<i>Мельник Т.М.</i>	342	<i>Підгорна Л.П.</i>	263
<i>Кукушкіна К.В.</i>	276	<i>Мельничук А.М.</i>	174	<i>Пільо С.Г.</i>	225
<i>Куленко О.А.</i>	223	<i>Мельничук О.Г.</i>	85	<i>Пімінов О. Ф.</i>	107
<i>Кулинич В.О.</i>	252	<i>Мироненко Л.С.</i>	210	<i>Пірський Ю.К.</i>	171
<i>Куліченко С.А.</i>	22	<i>Мисюк О.</i>	26	<i>Піскач Л.В.</i>	114, 153
<i>Куліш Б.І.</i>	274	<i>Михальченко О.А.</i>	281	<i>Плоховська С.Г.</i>	75
<i>Курмач М.М.</i>	169, 170	<i>Мичківська Ю.С.</i>	102	<i>Подгорна О. В.</i>	284
<i>Кусяк А.П.</i>	91	<i>Мишак В.Д.</i>	282	<i>Подорожня О.О.</i>	350
<i>Кусяк Н.В.</i>	340, 349	<i>Мідак Л.Я.</i>	344	<i>Позднякова А.</i>	212
<i>Кут Д.Ж.</i>	278	<i>Мідяна Г.Г.</i>	258	<i>Полікарпов А.П.</i>	182
<i>Кут М.М.</i>	278	<i>Мінакова Т.Г.</i>	359	<i>Поліщук А.О.</i>	349
<i>Куций А.В.</i>	171	<i>Міценко А.О.</i>	176	<i>Поліщук Л.М.</i>	91
<i>Кучеренко В.О.</i>	45	<i>Москвіна В.С.</i>	253, 276	<i>Пономарьова Л.М.</i>	158
<i>Кушнір М.В.</i>	49, 50, 51, 52, 54, 55, 359	<i>Мудрак В.В.</i>	174	<i>Попруга Ю.И.</i>	168
<i>Кушніт Д. К.</i>	27	<i>Мужев В.В.</i>	282	<i>Породнов А.О.</i>	210
<i>Куц О.</i>	212	<i>Мурланова Т.В.</i>	78	<i>Походило Н.Т.</i>	221, 297, 306
<i>Левіцький В.Є.</i>	274	<i>Мусіна А.О.</i>	73	<i>Прибора Н. А.</i>	339
<i>Лелюшок С.О.</i>	22	<i>Муць І.Р.</i>	160	<i>Проценко О.М.</i>	40
<i>Лендєл В.Г.</i>	278	<i>Найденев В.Э.</i>	219	<i>Пушкарьова Н.О.</i>	75
<i>Леоненко І.</i>	43	<i>Неук Ю. П.</i>	346	<i>Радіо С.В.</i>	173, 176, 184
<i>Леонова Н.Г.</i>	40, 57, 112	<i>Нехань Н.В.</i>	32	<i>Рассоха О.М.</i>	286, 288
<i>Леонова Н.О.</i>	31	<i>Ничипорук Г.П.</i>	160	<i>Редька М.О.</i>	291
<i>Лесишина Ю.О.</i>	209	<i>Ніжанковський С.В.</i>	115	<i>Рисіч А.В.</i>	176, 184
<i>Лесюк О.І.</i>	264	<i>Обломей С.О.</i>	146	<i>Робота Л.П.</i>	245
<i>Листван В.В.</i>	50, 307	<i>Обушак М.Д.</i>	221, 264, 297, 306	<i>Рождественська Л. М.</i> ...	158
<i>Литвин В.А.</i>	94	<i>Огенко В.М.</i>	104	<i>Розанцев Г.М.</i>	165, 173, 184, 336
<i>Литвин Р.З.</i>	297	<i>Олексеюк І.Д.</i>	114	<i>Роїк Н.В.</i>	110
<i>Литвинчук А.П.</i>	96	<i>Олексів Л.В.</i>	34	<i>Рокоманюк М.В.</i>	185
<i>Ліпковська Н.О.</i>	28	<i>Олексій Ю.А.</i>	176	<i>Ролік-Аттія С. М.</i>	107
<i>Лісачук Г.В.</i>	77	<i>Ольховська Л.Л.</i>	346	<i>Ромака В.А.</i>	156
<i>Лічконенко Н.В.</i>	117	<i>Онисько М.Ю.</i>	278	<i>Ромака В.В.</i>	185
<i>Лобанов В.В.</i>	78	<i>Онищук О.О.</i>	166	<i>Ромака Л.П.</i>	156, 185
<i>Лобойченко В.М.</i>	31	<i>Опейда Й. О.</i>	154	<i>Романенко А. О.</i>	115
<i>Лозовицька О.І.</i>	169, 170	<i>Опейда Л. І.</i>	177	<i>Романишина Л.М.</i>	350
<i>Ломанчук А.Л.</i>	341	<i>Орлецький І.Г.</i>	118	<i>Романів І.М.</i>	156
<i>Лопатик Д.В.</i>	226	<i>Орнат М.П.</i>	25	<i>Румянцева Ж.О.</i>	40
<i>Луганська О.В.</i>	49, 50, 51, 52, 54, 55	<i>Осініна О.П.</i>	35	<i>Савельєв Ю.В.</i>	245
<i>Лукашук М.М.</i>	292	<i>Осокін Я.С.</i>	179	<i>Савченко Е.С.</i>	15
<i>Мажуга О.В.</i>	288	<i>Павленко В.О.</i>	180	<i>Савченко І.О.</i>	174
<i>Мазурик А.В.</i>	250	<i>Павлюк В.В.</i>	187	<i>Савчук Т.І.</i>	41
<i>Макідо О.Ю.</i>	98	<i>Палонські У.А.</i>	179	<i>Салієва Л.М.</i>	292
<i>Макоцька О. Ю.</i>	279	<i>Пальчик О.В.</i>	182	<i>Салюк О.С.</i>	112
<i>Мандрійчук Б.В.</i>	250	<i>Панасюк Д.Ю.</i>	36, 191	<i>Самелюк А.В.</i>	199
<i>Манілевич Ф.Д.</i>	171	<i>Панченко Т.В.</i>	38	<i>Сарай В.В.</i>	113
<i>Манько Н.</i>	221	<i>Панчишин Т.М.</i>	171	<i>Сахненко М.Д.</i>	109, 113
<i>Марійчак О.Ю.</i>	173, 176	<i>Пастернак О. М.</i>	177	<i>Свердліковська О.С.</i>	294
<i>Марков В.І.</i>	267, 296	<i>Пахомов Ю.Д.</i>	344	<i>Свиридюк А.В.</i>	351
<i>Маркова Н.Б.</i>	109	<i>Пашкевич В.З.</i>	156	<i>Свиридюк А.П.</i>	353

Свідерська Т.С.	354	Ткачук І.Г.	118	Черкашина Г.М.	286, 288
Селезень А.О.	114	Товстенко-Забелін М.	38	Черненко В.Ю.	106
Семенова М.І.	94	Токарева С.В.	296	Черняк А.А.	125
Семиног В.В.	282	Толстов О.Л.	262, 280, 323	Четвертак Т.Ю.	364
Сидорук Т.І.	165	Томашик В.М.	125, 180, 190, 191	Чефранов Є.В.	77
Сиса Л.В.	13	Томашик З.Ф.	191	Чигиринець О.Е.	106
Сігунов О.О.	73	Томіна А.-М. В.	120	Чіванов В.Д.	215
Сірик Ю.В.	115	Томіна В.В.	122	Чумак В.В.	174
Сірик О.М.	282	Травінська Т.В.	245	Шабликін О.В.	268, 270, 272
Скляр А.М.	215	Трибрат О.О.	304	Шабликіна О.В.	268, 276
Скритинець Ю.В.	43	Трипольський А.І.	163	Шамайло П.В.	193
Сливка М.В.	257, 275	Трофименко Я.В.	215	Шаповалов С.А.	195, 197
Сливка Н.Ю.	292	Трофимчук І. М.	188	Шахаб С.Н.	219, 226
Сметанін М.В.	296	Тумко А.В.	91	Швед О. М.	279, 336, 337
Смітюх О.В.	100	Тупичак М.А.	221, 306	Швець О. Г.	27, 366
Снурнікова О.В.	58	Тур Ю.І.	113	Швець О.В.	169, 170
Собуцький О.П.	247	Тьортих В.А.	78, 91	Шемет В.Я.	16
Сокол Н.В.	359	Фадєєв Є.М.	58	Шийка О. Я.	306
Солдаткіна Л.М.	356	Файнлейб О.М.	85, 298, 301	Шилін Б.С.	148
Софіюк С.В.	357	Фарат О.К.	267, 296	Шилюк В.В.	368
Стадник Ю.В.	156, 185	Федорчук О. М.	190	Шокол Т.В.	253
Стаднічук Н.О.	23, 26	Фізер М.М.	257	Шологон В.І.	127
Станіцька М.О.	297	Фінюк Н.	221	Штомпель О.І.	225
Старостенко О.М.	85, 298, 301	Фірсовська Н.Ю.	361	Шульга Л. І.	107
Стасюк А.В.	250	Фролова А.О.	73	Шульженко Д.М.	301
Степанова І.І.	109	Фролова І.Б.	45	Шулятицький І.В.	307
Степанюк К.О.	80	Фурса О.О.	294	Шумейко О.Є.	308
Стерник Д.	38, 174	Фуртат І.М.	78, 91	Юрченко О.М.	41
Стернік Д.	15	Футрик А.Н.	25	Юрченко Ю.В.	199
Стецьків А.О.	187	Хащинська А.В.	263	Ютілова К. С.	279, 336
Стойка Р.	221	Хильчук Д.І.	21	Юшкевич С.В.	128
Столярчук Н.В.	122	Хиля В.П.	253, 276	Юхно Г.Д.	197
Стрижак П.Є.	163	Хлюпа І.О.	323	Ющенко Т.І.	165
Стрижак С.В.	223	Хованець Г.І.	98	Ягодинець П.І.	49, 50, 51, 52, 54, 55
Суковач Т.М.	94	Ходюк О. В.	363	Яновська Е.С.	15, 38, 174
Тамаркіна Ю.В.	45	Циба І.О.	57	Янцевич К.В.	150
Таран Н.А.	127, 249	Циганкова В.А.	225	Яремчук І.О.	309
Тарасенко Н.В.	47	Цимбалюк К.К.	58	Яценко Т.В.	158
Терновий Ю.Ф.	117	Чайка М.В.	96, 125, 180, 190, 191		
Тимошук О.С.	34	Черваков О.В.	294		
Тітов Ю.О.	21, 166, 193, 332				
Ткачук В.В.	74				
Ткач В.В.	49, 50, 51, 52, 54, 55, 359				

**ПІДТРИМКА
КОНФЕРЕНЦІЇ**



УкрХімАналіз

ХІМІЧНИЙ АНАЛІЗ В УКРАЇНІ

Компанія «УкрХімАналіз» спеціалізується на проведенні хімічного аналізу і незалежних хімічних експертиз

Основні види діяльності компанії «УкрХімАналіз»:

- ✓ Визначення хімічного складу матеріалів
- ✓ Розробка рецептур товарів
- ✓ Дослідження якості промислової сировини
- ✓ Екологічна експертиза житла і офісних приміщень
- ✓ Визначення якості повітря в приміщеннях
- ✓ Аналіз якості питної води
- ✓ Аналіз ґрунту на родючість і забруднювачі
- ✓ Дослідження якості палив, масел та ін. ГСМ
- ✓ Аналіз стічних вод підприємств
- ✓ Визначення важких металів

Серед наших клієнтів відомі українські бренди:

Метінвест, Vents, Sport Life, Iveco, Юрія-Фарм, Макрохім, телеканал СТБ, вікна Паритет, Vaillant, Баухеми, Наша Ряба

Запрошуємо Вас до співпраці!

НАУКОВЕ ВИДАННЯ

V ВСЕУКРАЇНСЬКА НАУКОВА КОНФЕРЕНЦІЯ

«АКТУАЛЬНІ ЗАДАЧІ ХІМІЇ:
ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ПЕРСПЕКТИВИ»

ЗБІРНИК МАТЕРІАЛІВ КОНФЕРЕНЦІЇ
(українською, англійською, російською та білоруською мовами)

Комп'ютерне верстання

В.В.Листван, Н.В.Кусяк

(15 квітня 2021 року)

Надруковано з оригінал-макета авторів

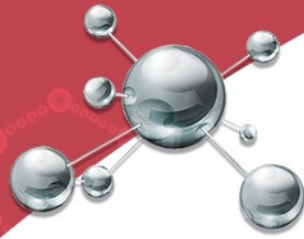
Підписано до друку 30.04.21. Формат 60x84/16. Папір офсетний.
Гарнітура Times New Roman. Друк цифровий.
Ум. друк. арк. 22,55. Наклад 300. Зам. № 870.

Видавець О. О. Євенок
м. Житомир, вул. М. Бердичівська, 17А
тел.: 063 101 22 33

*Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи
до Державного реєстру видавців, виготівників
і розповсюджувачів видавничої продукції України
серія ДК № 3544 від 05.08.2009 р.*

Друк та палітурні роботи ФОП О. О. Євенок
10014, м. Житомир, вул. М. Бердичівська, 17А
тел.: 063 101 22 33, e-mail: printinz@gmail.com

Міністерство
освіти і науки
України



9 789669 952622

Житомир
2021