

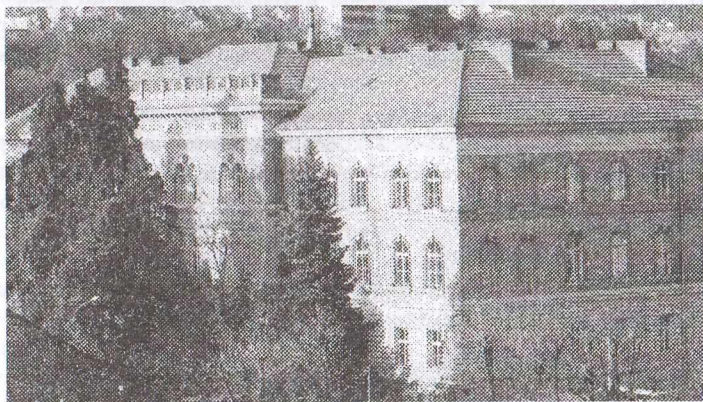


**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
«УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ»
ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ**

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

**75-ї підсумкової наукової конференції професорсько-
викладацького складу хімічного факультету
ДВНЗ «Ужгородський національний університет»
присвяченої 75-річчю заснування
Ужгородського національного університету**

2 лютого 2021 р.



Ужгород 2021

УДК 001(477.87)(043.2)

Т 29

Тези доповідей 75-ї підсумкової наукової конференції професорсько-викладацького складу хімічного факультету ДВНЗ «Ужгородський національний університет» присвяченої 75-річчю заснування Ужгородського національного університету (2 лютого 2021 р.). Ужгород: Вид-во УжНУ «Говерла», 2021. 87 с.

*Рекомендовано до друку Вченою радою
ДВНЗ «Ужгородський національний університет»
(протокол №2 від 25 лютого 2021 р.)*

*Рекомендовано до друку Редакційно-видавничою радою
ДВНЗ «Ужгородський національний університет»
(протокол №1 від 23 лютого 2021 р.)*

Збірник містить програму і тези доповідей результатів наукових досліджень професорсько-викладацького складу хімічного факультету ДВНЗ «Ужгородський національний університет», які були представлені 2 лютого 2021 року на 75-й підсумковій науковій конференції професорсько-викладацького складу хімічного факультету ДВНЗ «Ужгородський національний університет» присвяченої 75-річчю заснування Ужгородського національного університету.

Наукові дослідження проведені відповідно до наукових тем кафедр хімічного факультету «Неорганічної хімії», «Аналітичної хімії», «Органічної хімії», «Фізичної та колоїдної хімії», «Екології та охорони навколишнього середовища».

Матеріали підготовлено до друку редакційною колегією збірника наукових праць «Науковий вісник Ужгородського університету. Серія: Хімія».

Відповідальний за випуск: д.х.н., проф. Барчій І.Є.

ISBN 978-617-7825-35-6

© ДВНЗ «УжНУ», 2021

ПРОГРАМА

**75-ї підсумкової наукової конференції
професорсько-викладацького складу
ДВНЗ «Ужгородський національний університет»
присвяченої 75-річчю заснування
Ужгородського національного університету**

ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

2 лютого 2021 року

*Керівник секції – проф. Барчій І.Є.
Секретар секції – доц. Стерчо І.П.*

Пленарне засідання, 10⁰⁰.

Форма проведення – дистанційна (Google Meet)

- 1. Сабов М.Ю., Погодін А.І., Філеп М.Й.** Застосування та одержання віскерів кремнію.
- 2. Фізер М.М., Сливка М.В., Лендел В.Г.** Протон-індукована циклізація металільних тіоетерів симетричних триазолів, як синтетичний шлях до [1,3]тіазоло[3,2-b][1,2,4]тріазолієвих солей.
- 3. Кремса С.В., Мільович С.С., Гомонай В.І., Стерчо І.П.** Термічні дослідження Сокирицького клиноптилоліту та його модифікованих форм.
- 4. Мелегач А.І., Делеган-Кокайко С.В.** Концепція розвитку ДВНЗ «УжНУ»: екологічна складова, міждисциплінарність та міжнародна співпраця.
- 5. Студеняк Я.І.** Молекулярні зонди і хемосенсиори – сучасний стан та нові виклики.
- 6. Малаховська Т.О., Погодін А.І., Філеп М.Й., Козутич А.А.** Термоелектричні матеріали на основі модифікованих талій(І)- та купрум(І)-вмісних халькогенідів.
- 7. Трапезнікова Л.В., Сенік Л.М., Ламбрух Л.М., Маркович В.П.** SWOT-аналіз якості підземних питних вод смт. Середне з екологічних позицій та з точки зору придатності води для господарсько-питного використання.

ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНЕ ТА ТЕОРЕТИЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ІЧ-СПЕКТРІВ 3-АЛКЕНІЛЬНИХ 2-ТІОКСО-2,3-ДИГІДРОХІНАЗОЛІН-4(1H)-ОНІВ

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

Кафедра органічної хімії

e-mail: kutmykola@ukr.net

Одним із завдань сучасної коливної спектроскопії є дослідження будови і фізико-хімічних властивостей складних молекул на основі розвитку теоретичних уявлень про взаємозв'язок між спектром і структурою. У даний час молекулярна спектроскопія має цілий ряд методів, які дозволяють проводити подібні дослідження складних молекул, наприклад, сучасні квантово-хімічні методи. Увага до спектрів резонансного характеру пов'язана з тим, що саме вони найбільш чутливі до змін структури, і сама наявність або відсутність коливних ліній такого спектра при заданій частоті збудження вже свідчить про особливості електронної структури молекули. Дослідження ІЧ-спектрів дозволяє не тільки інтерпретувати спостережувані лінії спектрів і пояснити основні закономірності розподілу інтенсивності, але і в ряді випадків, зробити висновки про найбільш імовірну структуру молекули, присутність різних таутомерних форм або характер впливу окремих структурних елементів на вид спектра.

Метою даного дослідження є квантово-хімічне дослідження структури 3-аліл-2-тіоксо-2,3-дигідрохіназолін-4-ону, а саме розрахунків частот та інтенсивностей коливальних спектрів.

Реєстрацію експериментального ІЧ-спектру модельного хіназоліну проводили в таблетці КВг на приладі Jasco FTIR 4700. Квантово-хімічні розрахунки тіону виконували в програмному пакеті Orca версії 4.0.

Теоретичні розрахунки частот та інтенсивностей коливального спектру 3-аліл-2-тіоксо-2,3-дигідрохіназолін-4-ону проводили з використанням теорії DFT та функціоналами BP-86 та PBE з базисним набором 6-311G (d,p). Для аналізу та візуалізації результатів проведених *ab initio* розрахунків використовувалась програма ChemCraft. Отримані експериментальні та теоретичні дані коливальних властивостей структури 3-аліл-2-тіоксо-2,3-дигідрохіназолін-4-ону наведені в таблиці 1.

Таблиця 1. Дані експериментального та теоретичного дослідження ІЧ-спектру 3-аліл-2-тіоксо-2,3-дигідрохіназолін-4-ону

Вид коливання і зв'язку	Експериментальне значення, см ⁻¹	Розраховані значення, см ⁻¹	
		BP-86/6-311 G(d,p)	PBE/6-311 G(d,p)
ν (N-H)	3256	3509	3519
ν (C-H)	2937-3144	3001-3147	3007-3157
ν (C=O)	1649	1691	1699
ν (C=C)	1620	1656	1661
ν (C=S)	1525	1500	1506

На Рис.1-2 наведені експериментальний та теоретично розрахований ІЧ-спектри досліджуваного 3-аліл-2-тіоксо-2,3-дигідрохіназолін-4-ону відповідно. Для побудови розрахованого ІЧ-спектру використано програму Origin 8.5.

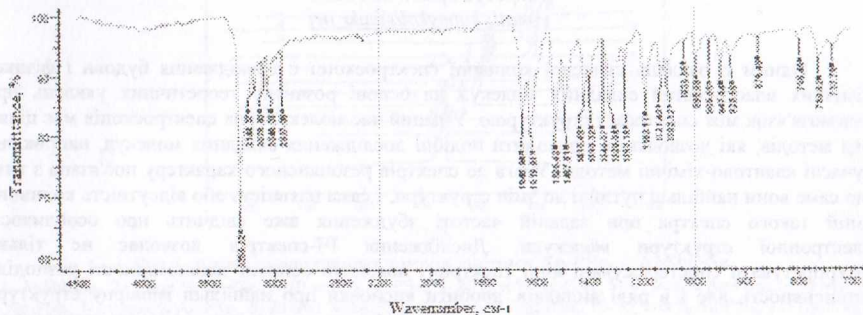


Рис. 1. Експериментальний ІЧ-спектр 3-аліл-2-тіоксо-2,3-дигідрохіназолін-4-ону

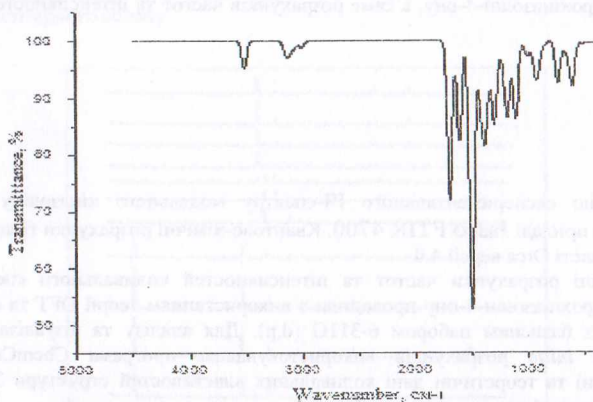


Рис. 2. Теоретичний ІЧ-спектр 3-аліл-2-тіоксо-2,3-дигідрохіназолін-4-ону

Таким чином, в результаті даного дослідження проведено квантово-хімічні розрахунки частот та інтенсивностей коливального ІЧ-спектру молекули 3-аліл-2-тіоксо-2,3-дигідрохіназолін-4-ону. Проведено аналіз отриманих експериментальних та теоретичних даних ІЧ-спектру досліджуваного хіназоліну, що дозволяє стверджувати про високу точність розрахункових даних.

ЗМІСТ

ПРОГРАМА 75-ї підсумкової наукової конференції професорсько-викладацького складу ДВНЗ «Ужгородський національний університет»	3
Фізер М.М., Сливка М.В., Лендел В.Г. Протон-індукована циклізація металільних тіоестерів симетричних триазолів, як синтетичний шлях до [1,3]тіазоло[3,2- <i>b</i>][1,2,4]триазолісвих солей.	7
Кремса С.В., Мільович С.С., Гомонай В.І., Стерчо І.П. Термічні дослідження Сокириницького кліноптилоліту та його модифікованих форм.	9
Мелегачич А.І., Делеган-Кокайко С.В. Концепція розвитку ДВНЗ «УжНУ»: екологічна складова, міждисциплінарність та міжнародна співпраця.	12
Студеняк Я.І. Молекулярні зонди і хемосенсиори – сучасний стан та нові виклики.	14
Малаховська Т.О., Погодін А.І., Філеп М.Й., Козутич А.А. Термоелектричні матеріали на основі модифікованих талій(І)- та купрум(І)-вмісних халькогенідів.	16
Трапезнікова Л.В., Сенік Л.М., Ламбрух Л.М., Маркович В.П. SWOT-аналіз якості підземних питних вод смт. Середне з екологічних позицій та з точки зору придатності води для господарсько-питного використання.	18
Кохан О.П., Погодін А.І., Філеп М.Й., Васько Ю.Ю., Войчук Ю.В. Одержання і властивості складних сульфідів і галогенсульфідів натрію.	20
Барчій І.Є., Федорчук А.О., Пр'ясецькі М., Кирлик Ю.І. Ab initio квантово-хімічні розрахунки зонної структури сполуки $TlInP_2Se_6$.	22
Переш С.Ю., Малаховська Т.О., Козьма А.А., Сабов М.Ю., Барчій І.Є., Зубака О.В. Про закономірності зміни та прогноз деяких властивостей сполук типу $Tl_4B^IVC^{VI}_3$ і $Tl_9B^IVC^{VI}_6$ (B^{IV} - Si, Ge, Sn, Pb; B^V - P, As, Sb, Bi).	26
Семрад О.О., Сідей В.І., Переш С.Ю. Метавалентні хімічні сполуки типу $A^IVB^VC^{VI}_2$ (A^I - Li, Na, K, Rb, Cs; B^V - As, Sb, Bi; C^{VI} - Se, Te).	28
Мункачі О.Й., Філеп М.Й., Шандра А.М., Сабов М.Ю. Фазові рівноваги у системі $Cu_2Se - Sb_2Se_3 - Se$.	31
Сабов В.І., Погодін А.І., Філеп М.Й., Хила А.М., Поторій М.В., Сабов М.Ю. Фазові рівноваги у системі $Ag_7PSe_6 - AgSbP_2Se_6$.	33
Кут Д.Ж., Кут М.М., Онисько М.Ю., Балог І.М., Лендел В.Г. Експериментальне та теоретичне дослідження ІЧ-спектрів 3-алкенільних 2-тіоксо-2,3-дигідрохіназолін-4(1H)-онів.	35
Повдайчик М.В., Кут М.М., Онисько М.Ю., Лендел В.Г. Синтез та електрофільна гетероциклізація N-алкенільних(алкінільних) амідів(тіоамідів) фторокарбонічних кислот.	37
Сливка М.В., Фізер М.М., Король Н.І., Фаринюк Ю.І., Головка-Камошенкова О.М., Лендел В.Г. Створення матеріалів з антимікробними властивостями на основі симетричних триазолів.	39
Івасюк Н.І., Кривов'яз А.О., Лендел В.Г. Отримання функціональних похідних каптаксу.	41
Голуб Н.П., Голуб С.О., Козьма А.А., Гартман Е. Ю., Гаштур В.І., Гомонай В.І., Баренблат І.О. Ефективні способи одержання та вдосконалення фізико-хімічних і каталітичних властивостей гетерогенних каталізаторів.	43
Голуб Н.П., Голуб С.О., Козьма А.А., Райчинець Л.В., Гасинець І.І., Гомонай В.І. Сучасний стан та перспективи вирішення важливих проблем на основі використання регіональної сировини.	46

Козьма А.А., Голуб Н.П., Голуб Є.О., Давида Д.В., Русанюк Н.В., Барна В.В. Визначення теплот утворення ортофосфатів двовалентних металів методами порівняльного аналізу.	50
Козьма А.А., Голуб Н.П., Голуб Є.О., Бажів І.І., Микулін Т.Р. Енергетичні параметри деяких кристалічних пірофосфатів з двозарядними катіонами.	53
Дзямко В.М. Парціальне окиснення C ₃ -C ₄ - вуглеводнів на фосфаті стануму.	55
Дзямко В.М., Єршов Б.М. Каталітичні властивості морденіту в процесі окиснення метану в формальдегід.	57
Яценік А.Р., Стерчо І.П., Барчій Е.Ю., Янкович Г.Ю., Мільович С.С. Методика впровадження дистанційного та змішаного навчання при вивченні хімії в середній школі.	60
Чубірка Н.П., Студеняк Я.І. Оптичні молекулярні зонди чутливі до SO ₂ і сульфідів.	64
Фершал М.В., Чонтош Т.О. 8-гідроксіхінолін-азо-фенілборонат як перспективний молекулярно-розмірний сенсор. (стенд)	66
Базель Я.Р., Чубірка Є.М. Хроматографія в поєднанні з методом SHS, як тренд сучасної аналітичної хімії.	69
Сухарева О.Ю., Сухарев С.М. Геохімічні особливості розподілу деяких важких металів у ґрунтах Закарпатської області.	71
Русин В. М., Капшин С.О. Можливості визначення та ефективність використання тетрадецилсульфату натрію у фармпрепаратах.	73
Вороняч О.Г., Студеняк Я.І., Демко Ю. Використання основних барвників для визначення деяких 3-х зарядних іонів.	75
Глух О.С., Симканіч Л.І. Використання інструментів ГІС-аналізу для дослідження міграції важких металів у системі «Ґрунт-Рослина-Повітря».	76
Роман Л.Ю., Чундак С.Ю. Моніторинг якості води річки Іршавка за деякими гідрохімічними показниками.	78
Сухарев С.М., Куштан С.М., Сухарева Т.С. Скринінг вмісту фторидів у поверхневих водах Закарпатської області.	80
Галла-Бобик С.В. Вміст важких металів у ґрунті при вирощуванні винограду.	82