

**Міністерство освіти і науки України  
ДНУ «Інститут модернізації змісту освіти»  
ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»  
Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара  
Гірничо-металургійний інститут Таджикистану  
Киргизький національний університет імені Ж. Баласагіна  
Південно-Казахстанський державний університет імені М. Ауезова**



## **ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ**

**XI Міжнародної науково-практичної  
інтернет-конференції здобувачів вищої освіти та  
молодих учених**

**«ХІМІЯ І СУЧАСНІ ТЕХНОЛОГІЇ»**

**ТОМ II**

*06-07 грудня 2023 р.  
м. Дніпро, Україна*

**УДК 54(06)  
X 46**

*Друкується за рішенням Вченої Ради ДВНЗ УДХТУ  
(протокол № 14 від 30.11.2023 р.)*

**ISBN 978-617-8234-14-0**

XI Міжнародна науково-практична інтернет-конференція здобувачів вищої освіти та молодих учених «Хімія і сучасні технології» / тези доповідей, 06-07 грудня. – У 6-и томах. – Т. II. – Дніпро: ДВНЗ УДХТУ. – 2023. – 151 с.

Режим доступу: <https://udhtu.edu.ua/viddil-ndrs/studentskinaukovizahodu>

В збірнику надані тези доповідей XI Міжнародної науково-практичної інтернет-конференції здобувачів вищої освіти та молодих учених «Хімія і сучасні технології», присвяченої вирішенню сучасних фундаментальних, теоретичних і практичних проблем в області органічної, фармацевтичної хімії, технології органічних, паливно-мастильних, полімерних речовин, поліграфічних матеріалів та харчових продуктів.

Збірник розрахований на використання робітниками хімічної промисловості, науковими співробітниками, аспірантами та студентами спеціальностей хімічного профілю.

**УДК 54(06)**

**ISBN 978-617-8234-14-0**

© ДВНЗ УДХТУ

## ПРОГРАМНИЙ НАУКОВИЙ КОМІТЕТ КОНФЕРЕНЦІЇ

### **Голова комітету:**

*Сухий К.М.*, д.т.н., професор, в.о. ректора Українського державного університету науки і технологій

### **Члени комітету:**

*Зайчук О.В.*, д.т.н., професор, голова комісії з реорганізації ДВНЗ УДХТУ, перший проректор Державного вищого навчального закладу «Український державний хіміко-технологічний університет» (Дніпро, Україна)

*Рижова О.П.*, д.т.н., професор, заступник голови з реорганізації ДВНЗ УДХТУ, проректор з науково-педагогічної роботи Державного вищого навчального закладу «Український державний хіміко-технологічний університет» (Дніпро, Україна)

*Харченко О.В.*, д.х.н., професор, помічник ректора з наукової роботи Державного вищого навчального закладу «Український державний хіміко-технологічний університет» (Дніпро, Україна)

*Азізов Р.О.*, д.т.н., професор, Таджицький технічний університет ім. академіка М.С. Осімі (Таджикистан)

*Разинов З.А.*, д.т.н., професор кафедри екології Гірничо-металургійного інституту (Бустон, Таджикистан)

*Саримзакова Р.К.*, д.х.н., професор, завідувач кафедри органічної хімії та освітніх технологій Киргизького національного університету ім. Ж. Баласагіна (Киргизстан)

*Жекеев М.К.*, д.т.н., професор кафедри хімічної технології неорганічних речовин Південно-Казахстанського державного університету ім. М. Ауезова, завідувач лабораторії «Проблеми екології» НДІ «Екологія та біотехнологія» (Шимкент, Казахстан)

*Ратнавіра Харша*, Dr.Ing., професор Норвезького університету природничих наук (Осло, Норвегія), Віце-президент Європейської Водної Асоціації, засновник та голова компанії DOSCON AS

*Варгалюк В.Ф.*, д.х.н., заслужений діяч науки і техніки України, академік Академії вищої освіти України, професор кафедри фізичної, органічної та неорганічної хімії Дніпровського національного університету імені Олеся Гончара (Дніпро, Україна)

*Коптєва С.Д.*, к.х.н., доцент, декан хімічного факультету Дніпровського національного університету імені Олеся Гончара (Дніпро, Україна)

### **Вчений секретар наукового комітету:**

*Скиба М.І.*, д.т.н., професор кафедри технології неорганічних речовин та екології Державного вищого навчального закладу «Український державний хіміко-технологічний університет» (Дніпро, Україна)

## THE SCIENTIFIC COMMITTEE OF THE CONFERENCE

### ***Committee Chairman:***

*K.M. Sukhyi*, Doctor of Technical Sciences, Professor, acting Rector of the Ukrainian State University of Science and Technology

### ***Committee members:***

*O.V. Zaichuk*, Doctor of Technical Sciences, Professor, Chairman of the Commission for the Reorganization of SHEI USUCT, First Vice-Rector of the State Higher Educational Institution "Ukrainian State University of Chemical Technology" (Dnipro, Ukraine)

*O.P. Ryzhova*, Doctor of Technical Sciences, Professor, Deputy Chairman for the Reorganization of SHEI USUCT, Vice-rector for scientific and pedagogical work of the State Higher Educational Institution "Ukrainian State University of Chemical Technology" (Dnipro, Ukraine)

*O.V. Kharchenko*, Doctor of Chemistry, Professor, Assistant to the Rector for Scientific Work of the State Higher Educational Institution "Ukrainian State University of Chemical Technology" (Dnipro, Ukraine)

*R.O. Azizov*, Doctor of Technical Sciences, Professor of Tajik Technical University named after academician M.S. Osimi (Tajikistan)

*Z.A. Razikov*, Doctor of Technical Sciences, Professor of the Mining and Metallurgical Institute of Tajikistan (Buston, Tajikistan)

*R.K. Sarymzakova*, Doctor of Chemistry, Professor, Head of the Department of Organic Chemistry and Educational Technologies of Kyrgyz National University after J. Balasagina (Kyrgyzstan)

*M.K. Zhekeiev*, Doctor of Technical Sciences, Professor of South Kazakhstan State University named after M. Auezov, head of the laboratory "Problems of Ecology" of the Research Institute of Ecology and Biotechnology (Shymkent, Kazakhstan)

*H. Ratnavira*, Dr.Ing., Professor, Norwegian University of Natural Sciences (Oslo, Norway), Vice-President of the European Water Association, founder and chairman of DOSCON AS

*V.F. Varhaliuk*, Doctor of Chemistry, Honored Worker of Science and Technology of Ukraine, Academician of the Academy of Higher Education of Ukraine, Professor of the Department of Physical, Organic and Inorganic Chemistry of Oles Honchar Dnipro National University (Dnipro, Ukraine)

*S.D. Koptieva*, Ph.D., Associate Professor Dean of the Faculty of Chemistry of Oles Honchar Dnipro National University (Dnipro, Ukraine)

### ***Scientific Secretary of the Scientific Committee:***

*M.I. Skyba*, Doctor of Technical Sciences, Professor, of the Department of Technology of Inorganic Substances and Ecology of the State Higher Educational Institution "Ukrainian State University of Chemical Technology" (Dnipro, Ukraine)

## ЗМІСТ

### ОРГАНІЧНА ХІМІЯ, ТЕХНОЛОГІЇ ОРГАНІЧНИХ РЕЧОВИН І ФАРМАЦЕВТИЧНИХ ПРЕПАРАТІВ

#### ORGANIC CHEMISTRY, TECHNOLOGY OF ORGANIC SUBSTANCES AND PHARMACEUTICALS

PROPARGYLATION OF PHENOLES AND AZA-HETEROCYCLES <i>Bestritska V.O., Ostapchuk Ye.M., Korol N.I., Slivka Mar.V., Onysko M.Yu., Mariychuk R.T. Slivka M.V.</i> .....	15
SPECTRAL CHARACTERISTICS AND MOLECULAR STRUCTURE OF <i>N</i> -(1-(5-AMINO-1 <i>H</i> -1,2,4-TRIAZOL-1-YL)-2,2,2- TRICHLOROETHYL)CARBOXAMIDES <i>Bezuhla A.V., Pavlova V.V., Zadorozhnii P.V., Kiselev V.V., Kharchenko A.V.</i> ...	16
SYNTHESIS OF A NEW WATER-SOLUBLE XANTHENE-LIKE FLUOROPHORE <i>Birukov I.P., Varenichenko S.A., Farat O.K.</i> .....	17
SYNTHESIS OF PYRIDINES, PYRIMIDINES AND TRIAZOLES: CLOSING THE GAP BETWEEN CLICKING AND SYNTHESIZING <i>Geleverya A.O., Kovaříček P., Kovalenko S.M.</i> .....	18
PREDICTION OF BIOLOGICAL ACTIVITY OF POLY SUBSTITUTED INDOLE DERIVATIVES <i>Gorbenko E.V., Smetanin M.V., Varenichenko S.A., Farat O.K.</i> .....	19
SYNTHESIS OF <i>N</i> -(1-((1 <i>H</i> -PERIMIDIN-2-YL)AMINO)-2,2,2- TRICHLOROETHYL)CARBOXAMIDES <i>Horodyanko V.S., Lomynoha Y.R., Zadorozhnii P.V., Kiselev V.V., Kharchenko A.V.</i> .....	20
ELECTRONIC STRUCTURE OF MESOIONIC COMPOUNDS <i>Kyrpa M.O., Ivanov V.V.</i> .....	21
SYNTHESIS OF <i>N</i> -CARBOXYALKYL-1,8-NAPHTHALIMIDES WITH ELECTRON DONATING SUBSTITUENTS IN POSITIONS 4 AND 5 <i>Milinchuk K.S., Kirienko A.V., Valentirova E.Yu., Fuchedzhi A.D.</i> .....	23
PREDICTION OF BIOLOGICAL ACTIVITY OF CHROMENIMINE DERIVATIVES <i>Neklesa Ya.S., Varenichenko S.A., Farat O.K.</i> .....	24
JUSTIFICATION OF THE RELEVANCE OF RESEARCH AND DEVELOPMENT OF PHYTOPREPARATIONS BASED ON MEDICINAL PLANT RAW MATERIALS <i>Prytula D.A., Levytska I.R., Lomynoha O.O.</i> .....	25

PYRROLYL- $\beta$ -CHLOROVINYLAALDEHYDE AND BENZYL ISOCYANIDE AS BUILDING BLOCKS IN THE SYNTHESIS OF PEPTIDOMIMETICS <i>Savluk T.O., Distanov V.B., Tsygankov A.V., Chebanov V.A.</i> .....	26
PREDICTION OF BIOLOGICAL ACTIVITY O-HYDROXYPHENYL DERIVATIVES OF PYRAZOLES <i>Skrynnik K.I., Varenichenko S.A., Farat O.K.</i> .....	29
APPLICATION OF MICROWAVE ACTIVATION IN THE SYNTHESIS OF DIINDOLYLMETHANE DERIVATIVES <i>Vereshchak V.O., Ananieva V.V., Tsygankov A.V., Lipson V.V.</i> .....	30
DEVELOPMENT OF NEW ANTICONVULSANT DRUGS BY CHEMICAL MODIFICATION OF CARBAMAZEPINE <i>Yurko S.O., Lomynoha Y.R., Zadorozhnii P.V., Kiselev V.V., Kharchenko A.V.</i>	31
ЗАСТОСУВАННЯ ФАРМАКОФОРНОГО СКРИНІНГУ, МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОКІНГУ ТА QSAR-МЕТОДІВ ДЛЯ ПОШУКУ АНТИКОРОНАВІРУСНИХ ПРЕПАРАТІВ <i>Анохін Д.О., Калугін О.М., Коваленко С.М., Кіріченко О.В., Захаров А.Б., Іванов В.В.</i> .....	32
РОЗРОБКА СКЛАДУ НАЗАЛЬНОГО СПРЕЮ ДЛЯ ЛІКУВАННЯ РИНИТУ ІНФЕКЦІЙНОЇ ЕТІОЛОГІЇ <i>Біляєва Д.К., Манський О.А., Криклива І.О., Січкара А.А.</i> .....	34
ПЕРОРАЛЬНИЙ ПРЕПАРАТ ДЛЯ КОРЕКЦІЇ ГОРМОНАЛЬНОГО СТАРІННЯ ШКІРИ <i>Бурч А.О., Іванова І.Є., Крищик О.В.</i> .....	35
РЕГІОСЕЛЕКТИВНІСТЬ ГАЛОГЕНОГЕТЕРОЦИКЛІЗАЦІЇ АЛКЕНІЛТІОБЕНЗОТІАЗОЛУ <i>Галега О.В., Повідайчик М.В., Онисько М.Ю.</i> .....	37
СИНТЕЗ НОВИХ ПОХІДНИХ 1,2,3-ТРИАЗОЛ-4-ІЛ-1,4-ДИГІДРОПРИДИНУ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ЇХ ВПЛИВУ НА КАНАЛИ КАЛЬЦІЮ L-ТИПУ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОКІНГУ <i>Гелеверя А.О., Журавель І.О., Коваленко С.М., Кириченко О.В., Білов І.Є.</i> .....	38
ОСОБЛИВОСТІ ФОРМУВАННЯ КОМБІНАТОРНОЇ БІБЛІОТЕКИ СІРКОВІСНИХ ГЕТЕРОЦИКЛІЧНИХ ГІБРИДІВ НА ОСНОВІ 6-(ХЛОРО(R <sup>2</sup> ))МЕТИЛ)-3-R <sup>1</sup> -2H-[1,2,4]ТРИАЗИНО[2,3-с]ХІНАЗО-ЛІН-2-ОНІВ <i>Грицак О.А.</i> .....	40
ПЕРСПЕКТИВИ ТА ПРОБЛЕМИ СИНТЕТИЧНОГО ЛЕГУВАННЯ ДІАМАНДОЇДІВ ЧЕРЕЗ СКЕЛЕТНЕ РЕДАГУВАННЯ <i>Гурська Р.М.</i> .....	41

АЦЕТАЛІЗАЦІЯ ГЛІЦЕРИНУ ЦИКЛОГЕКСАНОМ У ПРИСУТНОСТІ КИСЛОТНО-МОДИФІКОВАНИХ ПРИРОДНИХ АЛЮМОСИЛІКАТІВ <i>Давтян А.С.</i> .....	43
ЕФЕКТИВНИЙ СПОСІБ УТВОРЕННЯ 2-СТИРИЛПІРИМІДИН- 4(3Н)-ОНІВ <i>Давтян А.С.</i> .....	44
СИНТЕЗ ГАЛОГЕНОМЕТИЛФУНКЦІОНАЛІЗОВАНИХ ІМІДАЗОБЕНЗАЗЕПІНІВ <i>Данилюк І.Ю., Корякіна К.В., Толмачова В.С., Ковтун О.М., Вовк М.В...</i>	45
АНТИГРИБКОВА ДІЯ КОМПЛЕКСІВ ПЕРЕХІДНИХ МЕТАЛІВ НА ПОЛІСТИРОЛ <i>Дімова І.І., Шевченко О.В.</i> .....	46
ВЗАЄМОДІЯ N-(ТРЕТ-БУТИЛСУЛЬФІНІЛ)ПОЛІФТОРО- АЛКІЛІМІНІВ З ДІАЗОМЕТАНОМ <i>Захарко Р.М., Беззубенко Л.В., Рассукана Ю.В.</i> .....	47
СИНТЕЗ ПІРАЗОЛОВМІСНИХ ПОХІДНИХ 1,4-НАФТОХІНОНУ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ЇХ БІОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ <i>Карпюк І.І., Марінцова Н.Г., Журахівська Л.Р., Поліш Н.В.</i> .....	48
СПРЯМОВАНИЙ ПОШУК ПРОТИПУХЛИННИХ АГЕНТІВ СЕРЕД ЗАМІЩЕНИХ ПОХІДНИХ ПТЕРИДИНУ <i>Кирилова Д.В.</i> .....	50
СИНТЕЗ 2-ТА 4-ФТОРОЗАМІЩЕНИХ НАФТАЛІМІДІВ <i>Кірієнко А.В., Валентірова Є.Ю, Фучеджи А.Д., Мілінчук К.С.</i> .....	51
QSAR МОДЕЛІ ДЛЯ ПРОГНОЗУВАННЯ ДОКІНГ ФУНКЦІЙ ВЗАЄМОДІЇ ФЛАВОНОЇДІВ З МІШЕННЯМИ SARS-COV I SARS- COV-2 <i>Кічьова М.Є., Златов Є.В.</i> .....	52
ДОСЛІДЖЕННЯ ВМІСТУ ПАРАЦЕТАМОЛУ У РІЧКОВІЙ ВОДІ ТА СОРБЦІЇ НА ПОВЕРХНІ КАЛІЙ ТИТАНАТУ <i>Кожухова М.М., Денисюк Р.О., Писаренко С.В., Камінський О.М.</i> .....	54
СИНТЕЗ ПОХІДНИХ 9-АМІНОТРИПТАНТРИНУ – ПОТЕНЦІЙНИХ ІНТЕРКАЛЯТОРІВ ДНК <i>Колесников В.І., Карпенко О.С., Ведута В.В.</i> .....	56
ОДЕРЖАННЯ ПЕРОКСИДНИХ АКРИЛАТНИХ МОНОМЕРІВ НА ОСНОВІ 1,3-ДІОКСАНІВ <i>Кузнецова К.І, Флейчук Р.І, Гевусь О.І.</i> .....	58

ЕЛЕКТРОФІЛЬНА ГЕТЕРОЦИКЛІЗАЦІЯ 2-ТІОКСО-N(3)- АЛКЕНІЛЬНИХ ПОХІДНИХ ХІНАЗОЛІНУ <i>Кут Д.Ж., Кут М.М., Онисько М.Ю.</i> .....	59
ФАКТОРИ ВПЛИВУ ЗАМІСНИКІВ БІЛЯ АТОМІВ N і C В ІМІНАХ НА БАР'ЄРИ ІНВЕРСІЇ АТОМА АЗОТУ <i>Лебідь О.С., Ліб О.С., Куцик-Савченко Н.В. Харченко О.В., Просяник О.В....</i>	60
КОНФІГУРАЦІЯ ІМІНІВ ТА ПІРАМІДАЛЬНІСТЬ АТОМУ АЗОТУ В ПОХІДНИХ АМОНІАКУ <i>Ліб О.С., Лебідь О.С., Куцик-Савченко Н.В. Харченко О.В., Просяник О.В..</i>	62
ЗАСТОСУВАННЯ РЕАКЦІЇ ПААЛЯ-КНОРРА ДЛЯ СИНТЕЗУ 3-(1-R-5-ФЕНІЛ-1-N-ПРОЛ-2-ІЛ)ПРОПАНОВИХ КИСЛОТ <i>Матійчук В.В., Сітар А.А., Литвин Р.З., Горак Ю.І., Обушак М.Д.....</i>	63
СИНТЕЗ НОВИХ S-( $\omega$ -ФТОРАЛКІЛОВИХ) ЕСТЕРІВ ТІОСУЛЬФОКИСЛОТ ТА ЇХ ПРОТИМІКРОБНА АКТИВНІСТЬ <i>Милянч А.В., Паламар О.В., Конечна Р.Т., Конечний Ю.Т., Кархут А.І., Лубенець В.І., Половкович С.В.</i> .....	64
КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ СИНТЕЗУ ФЕРОЦЕНКАРБОНОВОЇ КИСЛОТИ <i>Нестеров А.М., Поджарський М.А.....</i>	65
РОЗРОБКА СКЛАДУ ТА ТЕХНОЛОГІЇ М'ЯКИХ ЛІКАРСЬКИХ ФОРМ ПРОТИВІРУСНОЇ ДІЇ <i>Нирка А.Б., Ніколайчук Н.О., Плугіна Т.В.</i> .....	67
ОБГРУНТУВАННЯ СКЛАДУ ТА РОЗРОБКА ТЕХНОЛОГІЇ ВИРОБНИЦТВА ПРОТИВІРУСНОГО ПРЕПАРАТУ З УПОВІЛЬНЕНИМ ВИВІЛЬНЕННЯМ <i>Олянецька А.С, Крицик О.В.</i> .....	69
ГАЛОГЕНОГЕТЕРОЦИКЛІЗАЦІЇ 1-ПЕНТІНІЛПІРАЗОЛ-4- КАРБОНОВОЇ КИСЛОТИ <i>Повідайчик М.В., Онисько М.Ю.</i> .....	71
СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ 1,2-ОКСАТІОЛАН-4-ОН 2,2- ДІОКСИДІВ <i>Полудов А.О., Гавришко Д.Ю., Добриденєв О.В.....</i>	72
СИНТЕЗ НОВИХ ПОХІДНИХ ІНДЕНОХІНОКСАЛІН-6- КАРБОНОВОЇ КИСЛОТИ З АМІНАМИ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ІХ АФІНІТЕТУ ДО ДНК <i>Сазонов К. Д., Ішков Ю.В.</i> .....	74
РЕОЛОГІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ РОЗЧИНІВ ПЕКТИНУ <i>Сайтарли С.В., Пушкарьов Ю.М., Дмитренко І.В.</i> .....	76



ОБҐРУНТУВАННЯ СКЛАДУ ТА РОЗРОБКА ТЕХНОЛОГІЇ ВИРОБНИЦТВА ПРЕПАРАТУ ДЛЯ ЛІУВАННЯ ТА ПРОФІЛАКТИКИ ШЕМІЧНОЇ ХВОРОБИ МОЗКУ <i>Сергієнко К.О., Крищик О.В.</i> .....	78
ЗАСТОСУВАННЯ 2-МЕТИЛ-3-(5-АРИЛ-2-ФУРИЛ)АКРОЛЕЇНІВ У ТАНДЕМНИХ ПЕРЕТВОРЕННЯХ <i>Сітар А.А., Матійчук В.В., Чура О.Р., Литвин Р.З., Кінжибало В.В., Горак Ю.І., Обушак М.Д.</i> .....	80
ПРИНЦИПИ «ЗЕЛЕНОЇ ХІМІЇ» ПІД ЧАС РОЗРОБКИ ПРОМИСЛОВОЇ ТЕХНОЛОГІЇ СИНТЕЗУ НАФАЗОЛІНУ НІТРАТУ <i>Соломінчук Т.М., Рудюк В.В., Сидоренко Л.В., Георгіяну В.А.</i> .....	82
МЕТОД ФУНКЦІОНАЛІЗАЦІЇ ЕПОКСИДІВ ЗА ДОПОМОГОЮ РЕАКЦІЇ ОЛЕФІНУВАННЯ ХОРНЕРА-ВОДСВОРДА-ЕММОНСА <i>Хорзєєв В.В., Коряко С.С., Малащук А.С.</i> .....	83
СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ ПОЛІМЕРИЗАЦІЙНОЗДАТНИХ МОНОМЕРІВ НА ОСНОВІ РОСЛИННИХ ОЛІЙ <i>Чеботар А.С., Гаргай Х.І., Дончак В.А.</i> .....	85
N-(трет-БУТИЛСУЛЬФІНІЛ)ПОЛІФТОРОАЛКІЛІМІНИ В АСИМЕТРИЧНОМУ СИНТЕЗІ <i>Чередніченко А.С., Рассукана Ю.В.</i> .....	87
СИНТЕЗ ПАРА-/МЕТА-ЗАМІЩЕНОЇ АЗОМЕТИНВМІСНОЇ СПОЛУКИ – 3-(ГЕКСИЛОКСИ)-N-(4- (ГЕКСИЛОКСИ)БЕНЗИЛІДЕН)АНІЛІНУ <i>Шведчикова К.В.</i> .....	88
ДОСЛІДЖЕННЯ ПІДКОНТРОЛЬНИХ СИЛЬНОДІЮЧИХ ТА ОТРУЙНИХ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ МЕТОДОМ ГАЗОВОЇ ХРОМАТОГРАФІЇ <i>Щербак К.Є., Гуржій О.Б.</i> .....	89
ЗАСТОСУВАННЯ 2-МЕТИЛ-3-(5-АРИЛ-2-ФУРИЛ)АКРОЛЕЇНІВ У РЕАКЦІЇ РАДЗІШЕВСЬКОГО <i>Юрчук Д.В., Євтушок І.О., Литвин Р.З., Горак Ю.І., Обушак М.Д.</i> .....	91
QSPR АНАЛІЗ КРИТИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК <i>Ярема І.М., Стародумова Ю.І., Кічьова М.Є., Муратов Н.Н.</i> .....	92
СПОСОБИ ПІДВИЩЕННЯ ІНТЕРЕСУ УЧНІВ ДО ВИВЧЕННЯ ХІМІЇ <i>Криворучко А.Р., Кривов'яз А.О.</i> .....	93

**ХІМІЯ І ТЕХНОЛОГІЇ ПАЛИВНО-МАСТИЛЬНИХ, ПОЛІМЕРНИХ,  
ПОЛІГРАФІЧНИХ МАТЕРІАЛІВ ТА ХАРЧОВИХ ПРОДУКТІВ**

**CHEMISTRY AND TECHNOLOGY  
OF FUELS, LUBRICANTS, POLYMERS, PRINTING  
MATERIALS, AND FOOD PRODUCTS**

FEATURE OF THE INFLUENCE OF PHYSICAL FIELDS ON THE STRUCTURE AND PHYSICAL PROPERTIES OF EPOXY MATERIALS <i>Bardadym Yu.</i> .....	97
COMPOSITION AND PROPERTIES OF OIL DEPOSITS OF NORTHERN TAJKISTAN <i>Pochoev A.A., Azizov R.O., Razykov Z.A.</i> .....	98
ПАТ «УКРТАТНАФТА» – НАУКОВО-ТЕХНІЧНИЙ РОЗВИТОК ПІДПРИЄМСТВА <i>Богун В.В., Тертишина О.В.</i> .....	104
ПРОГНОЗУВАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ ЕЛАСТОМЕРНИХ КОМПОЗИЦІЙ, ЯК ГЕОМЕТРИЧНИХ ФАЗОВИХ ПЕРЕХОДІВ <i>Гаврилюк Ю.В., Сухий К.М., Євдокименко Н.М.</i> .....	107
ВИЛУЧЕННЯ БІЛКОВИХ ПРОДУКТІВ З ВІДХОДІВ ОЛІЙНОГО ВИРОБНИЦТВА <i>Голуб Л. С., Водолазька А.В.</i> .....	109
ОПТИМІЗАЦІЯ РЕЦЕПТУРИ ІНТЕР'ЄРНОЇ ФАРБИ <i>Голуб Л. С., Кравчук А.В.</i> .....	110
ТЕХНОЛОГІЧНІ ОСОБЛИВОСТІ РЕЦЕПТУР БЕЗГЛЮТЕНОВИХ КОНДИТЕРСЬКИХ ВИРОБІВ <i>Гусар А.О., Горач О.О.</i> .....	111
ЗАСТОСУВАННЯ ПРОЛІЗУ ДЛЯ ПЕРЕРОБКИ ПОБУТОВИХ ПОЛІМЕРНИХ ВІДХОДІВ <i>Дудік Д.В., Андріянова М.В., Головенко В.О.</i> .....	113
МЕТОД ОТРИМАННЯ КОМПОЗИТА НА ОСНОВІ ФТОРПОЛІМЕРА З СРІБЛОМ <i>Кабат О.С., Сула М.П.</i> .....	114
ОСОБЛИВОСТІ ВИКОРИСТАННЯ ХАРЧОВИХ ВОЛОКОН В ХАРЧОВІЙ ПРОМИСЛОВОСТІ <i>Коновалова І.С., Горач О.О.</i> .....	115

ВПЛИВ ЗОЛЬНОГО ПИЛУ НА ВЛАСТИВОСТІ ДЕРЕВИННО-ПОЛІМЕРНОГО КОМПОЗИТУ <i>Криволапов Д.С., Романченко І.С., Баитаник П.І., Третьяков А.О., Сухий К.М.</i> .....	117
ГЕОМЕТРИЧНІ ФАЗОВІ ПЕРЕХОДИ В СУМІШІ ПОЛІМЕРІВ <i>Орешин П. В., Гаврилюк Ю. В., Юрков К. Ю., Євдокименко Н. М., Сухий К.М.</i> .....	119
СУЧАСНІ ПІДХОДИ ДО ВИРОБНИЦТВА І ВИКОРИСТАННЯ ПЕТ ТАРИ ДЛЯ ХАРЧОВОЇ ПРОДУКЦІЇ <i>Павлюк С.К, Суха І.В., Філінська А.О.</i> .....	121
ВИКОРИСТАННЯ АМІДІВ ЖИРНИХ КИСЛОТ РОСЛИННОГО ПОХОДЖЕННЯ У ЯКОСТІ ІНГРЕДІЄНТІВ ЕЛАСТОМЕРНИХ КОМПОЗИЦІЙ <i>Панфілова О.А., Півень М.В., Соколова Л.О., Овчаров В.І., Суха І.В., Черваков О.В.</i> .....	123
ВПЛИВ ХІМІЧНОЇ СТРУКТУРИ ФТОРПОЛІМЕРІВ НА ТЕМПЕРАТУРУ РОЗМ'ЯКШЕННЯ ПО ВІКА <i>Пікула І.І., Кабат О.С.</i> .....	125
ПИТАННЯ ЩОДО РОЗРОБКИ ПОЛІМЕРНИХ КОМПОЗИЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ ДЛЯ ОБЛАДНАННЯ МЕТАЛУРГІЙНИХ ПІДПРИЄМСТВ <i>Поліщук Б.В., Ситар В.І., Матросов О.С.</i> .....	127
ВПЛИВ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ РЕЧОВИН ПОРОШКУ М'ЯТИ НА ВЛАСТИВОСТІ ПШЕНИЧНОГО ХЛІБА <i>Полодюк Р.І. Горач О.О.</i> .....	128
ПОЛІМЕРНІ ПЛАСТИЗОЛІ, ЩО МОДИФІКОВАНІ ПОЛІМЕРНИМИ ІОННИМИ РІДИНАМИ <i>Свердліковська О.С., Потапчук М.О.</i> .....	130
ВПЛИВ РІЗНИХ ФАКТОРІВ НА МОЛЕКУЛЯРНУ МАСУ ПОЛІМЕРНИХ ІОННИХ РІДИН <i>Свердліковська О.С., Вовчук Б., Потапчук М.О.</i> .....	132
СИНТЕЗ ДИМЕРНИХ ІОННИХ РІДИН ІОНЕНОВОГО ТИПУ <i>Свердліковська О.С., Черваков О.В., Буркевич Б.В., Панасенко Є.А.</i> .....	133

ВИЗНАЧЕННЯ МЕЖІ СУМІЩЕННЯ АРОМАТИЧНИХ ПОЛІАМІДІВ З ЛІНІЙНИМИ ОЛІГООРГАНОСИЛОКСАНАМИ <i>Ситар В. І., Кабат О.С., Кудрявцев Ю.О., Назаренко А. М.</i> .....	134
ЗАСТОСУВАННЯ ПРОЛІЗУ ДЛЯ ПЕРЕРОБКИ БІОМАСИ <i>Скрипкіна М.Д., Коваль Д. С., Андріянова М.В., Головенко В.О.</i> .....	135
БІОДЕГРАДАБЕЛЬНИЙ ПОЛІМЕР НА ОСНОВІ ПОЛІВІНІЛОВОГО СПИРТУ ТА КРОХМАЛЮ <i>Стельмащук В.М., Кабат О.С.</i> .....	136
КОМПЛЕКСНА ТЕХНОЛОГІЯ ПЕРЕРОБКИ РІДКИХ ВІДХОДІВ СПИРТОВОГО ВИРОБНИЦТВА <i>Стоялівська Д. В., Буденкова Н.М., Корчик Н.М.</i> .....	138
РОЗРОБКА ВИХРОВОГО АБСОРБЕРА ОЧИЩЕННЯ КОКСОВОГО ГАЗУ <i>Тимохін Є.С., Маковецький Д.О., Белянська О.Р.</i> .....	140
ВИЗНАЧЕННЯ ОПТИМАЛЬНИХ ТЕМПЕРАТУРНО-ЧАСОВИХ РЕЖИМІВ ОТВЕРДЖЕННЯ ТА СКЛАДУ МУЛЬТИДИСПЕРСНОГО СИЛІЦІЙ КАРБІДУ ДЛЯ ЗНОСОСТІЙКИХ ЕПОКСИДНИХ КОМПОЗИЦІЙ <i>Фандєєв О.В., Полоз О.Ю., Ебіч Ю.Р.</i> .....	142
ДОСЛІДЖЕННЯ ЗМІНИ КОНЦЕНТРАЦІЇ РОДАНІДІВ У АБСОРБЦІЙНОМУ ЦИКЛІ РОЗЧИНУ МЕА УСТАНОВКИ ОЧИЩЕННЯ КОКСОВОГО ГАЗУ <i>Фортунов В.О., Буркова О.В., Белянська О.Р.</i> .....	144
ПІДВИЩЕННЯ ПОТУЖНОСТІ ПІДПРИЄМСТВА ШЛЯХОМ ОПТИМІЗАЦІЇ РОБОТИ ЕКСТРУДЕРА <i>Хохлова Т.В., Третьяков А.О., Федан В.В.</i> .....	146
ВПЛИВ ПЕРЕБІГУ ТВЕРДОФАЗНОЇ ПОЛІКОНДЕНСАЦІЇ ВТОРИННОГО ПОЛІЕТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТУ НА ЗМІНУ ЙОГО РЕОЛОГІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ <i>Черваков Д.О., Федан В.В.</i> .....	148
ВПЛИВ СУМІШЕВОГО ДИЗЕЛЬНОГО ПАЛИВА НА МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ЕЛАСТОМЕРІВ <i>Шевченко О.Б., Попитайленко Д.В.</i> .....	150

**ОРГАНІЧНА ХІМІЯ,  
ТЕХНОЛОГІЇ ОРГАНІЧНИХ РЕЧОВИН І  
ФАРМАЦЕВТИЧНИХ ПРЕПАРАТІВ**

**ORGANIC CHEMISTRY,  
TECHNOLOGY OF ORGANIC SUBSTANCES  
AND PHARMACEUTICALS**



## PROPARGYLATION OF PHENOLS AND AZA-HETEROCYCLES

<sup>1</sup>Bestritska V.O., <sup>2</sup>Ostapchuk Ye.M., <sup>1</sup>Korol N.I., <sup>1</sup>Slivka Mar.V.,

<sup>1</sup>Onysko M.Yu., <sup>3</sup>Mariychuk R.T. <sup>1,3</sup>Slivka M.V.

e-mail: bestritska.victoriya@student.uzhnu.edu.ua

<sup>1</sup>Uzhhorod National University,

Ukraine, Uzhhorod

<sup>2</sup>Kyiv National University,

Ukraine, Kyiv

<sup>3</sup>FHPS University of Presov,

Slovak Republic, Preshiv

Elaboration of simple, non-toxic, not time consuming and highly selective methods for obtaining of O,N,S-alkylation products is an actual task for synthetic chemistry, because it is well known that the introduction of alkyl moiety can lead to valuable and interesting biological activities.

Theoretical approaches of regioselectivity of alkylation for different heterocycles were previously reported by us [1, 2]. This investigation aimed to elaboration of experimental technology for obtaining of propargylation product of different nature substrates. As starting substrates we have used polysubstituted phenols, indoles, and mercaptotriazoles. The compounds **1-3** were dissolved in DMF in the presence of 50% excess potassium carbonate; the obtained solution was mixed with propargyl bromide and then stirred for 16 hours at room temperature.

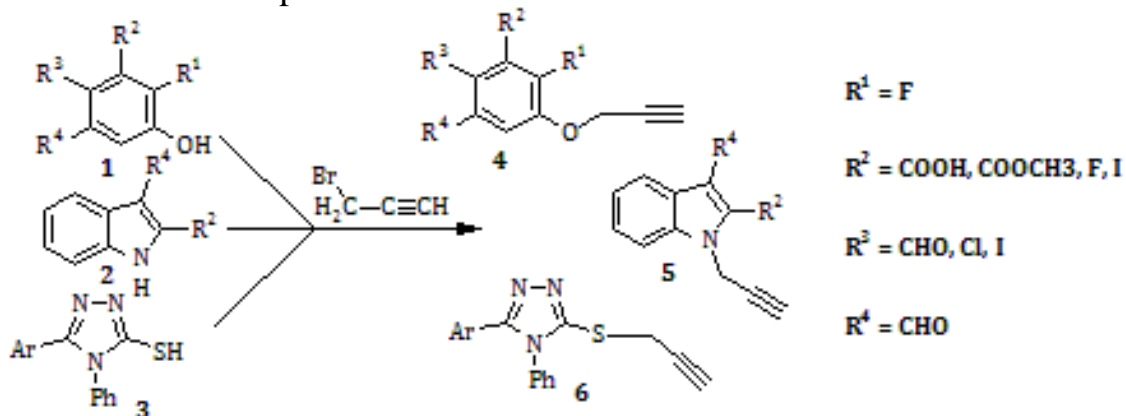


Fig. 1. Propargylation of phenols and aza-heterocycles

The yields of obtained target compounds are 72-91%. The elaborated technique is effective for O,S,N-propargylation and can be used as universal.

The authors are grateful to SAIA (ID 45748) and Enamine for research support.

### Literature:

1. Fizer, M., Slivka, M., Baumer, V., Slivka, Mar., Fizer, O. Alkylation of 2-oxo(thioxo)-thieno[2,3-d]pyrimidine-4-ones: Experimental and theoretical study. // Journal of Molecular Structure. – 2019. – V. 1198. – P. 126858.

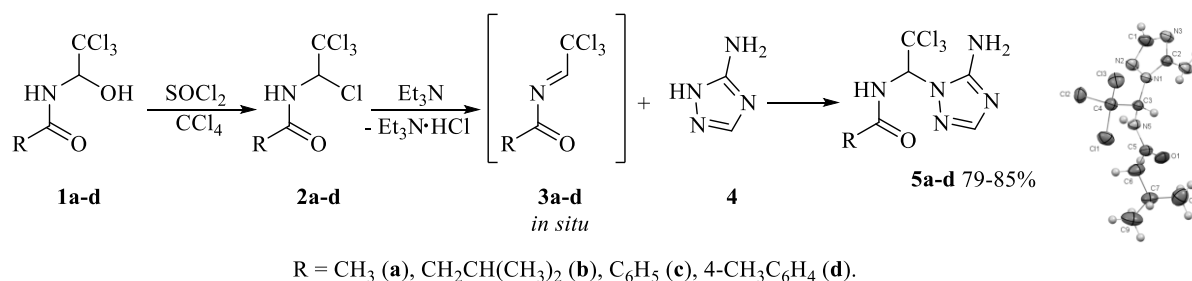
2. Fizer, M., Slivka, M., Korol, N., Fizer, O. Identifying and explaining the regioselectivity of alkylation of 1,2,4-triazole-3-thiones using NMR, GIAO and DFT methods. // Journal of Molecular Structure. – 2021. – V. 1223. – P. 128973.

**SPECTRAL CHARACTERISTICS AND MOLECULAR STRUCTURE OF *N*-(1-(5-AMINO-1*H*-1,2,4-TRIAZOL-1-YL)-2,2,2-TRICHLOROETHYL)CARBOXAMIDES**

Bezuhla A.V., Pavlova V.V., Zadorozhnii P.V., Kiselev V.V., Kharchenko A.V.  
e-mail: torfp@i.ua

Ukrainian State University of Chemical Technology,  
Ukraine, Dnipro

In this work we report on the synthesis of *N*-(1-(5-amino-1*H*-1,2,4-triazol-1-yl)-2,2,2-trichloroethyl)carboxamides (**5a-d**) by amidoalkylation of 3-amino-1,2,4-triazole (**4**). The reaction was carried out in 1,4-dioxane medium using a mixture of triethylamine and *N*-(1,2,2,2-tetrachloroethyl)carboxamides (**2**) for amidoalkylation of 3-amino-1,2,4-triazole (**4**). Synthesis began with the chlorination of *N*-(2,2,2-trichloro-1-hydroxyethyl)carboxamides (**1**) [1] by thionyl chloride in a carbon tetrachloride (Scheme 1). This resulted in *N*-(1,2,2,2-tetrachloroethyl)carboxamides (**2**). The interaction of chlorine derivatives (**2**) with triethylamine led to the formation of *N*-acylamine intermediate (**3**) [2]. They are highly reactive compounds and easily react with 3-amino-1,2,4-triazole (**4**) with formation of *N*-(1-(5-amino-1*H*-1,2,4-triazol-1-yl)-2,2,2-trichloroethyl)carboxamides (**5a-d**). The structures of obtained compounds were confirmed by <sup>1</sup>H NMR, <sup>13</sup>C NMR and X-ray spectroscopy.



Scheme 1. Synthesis of *N*-(1-(5-amino-1*H*-1,2,4-triazol-1-yl)-2,2,2-trichloroethyl)carboxamides (**5a-d**).

References:

1. Pokotylo IO, Zadorozhnii PV, Kiselev VV, Kharchenko AV (2018) Solvent-free synthesis and spectral characteristics of *N*-(2,2,2-trichloro-1-hydroxyethyl)carboxamides. Chem Data Coll 15–16: 62–66.
2. Zadorozhnii PV, Pokotylo IO, Kiselev VV, Kharchenko AV (2023) Synthesis of (*Z*)-*N*,3-dicyclohexyl-6-substituted-4-(trichloromethyl)-3,4-dihydro-2*H*-1,3,5-oxadiazin-2-imines via [4+2] hetero Diels-Alder reaction: Their spectral characteristics and molecular structure. Chem Data Coll 48: 101093.



## SYNTHESIS OF A NEW WATER-SOLUBLE XANTHENE-LIKE FLUOROPHORE

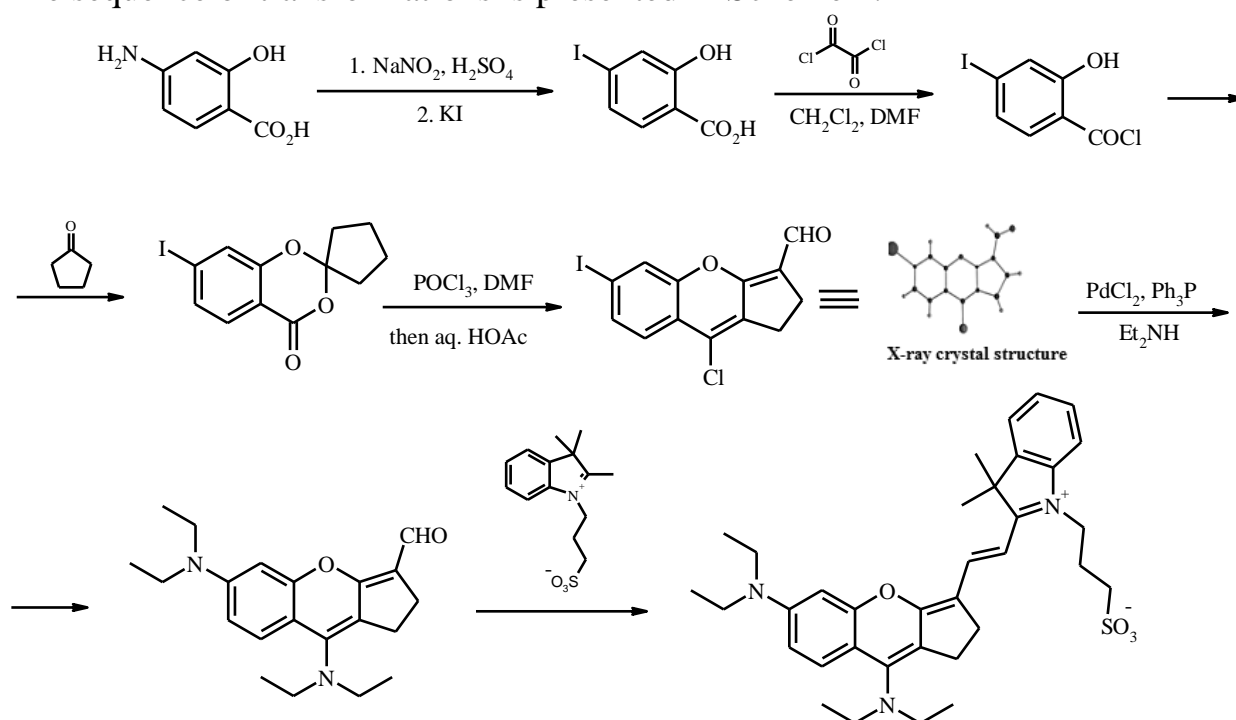
Birukov I.P., Varenichenko S.A., Farat O.K.

e-mail: svetlanavarenichenko@gmail.com

Ukrainian State University of Chemical Technology,  
Ukraine, Dnipro

Near-infrared (NIR) emitting xanthene fluorophores are widely used as novel markers for diagnosing various diseases. The wide range of practical applications encourages the search for new methods for the synthesis of fluorophores. Previously, there was no information on the synthesis of xanthene dyes with an electron-donating group at position 9. The presence of such a substituent in this position bathochromically shifts the absorption maximum to the green region of the spectrum and, as a consequence, shifts the fluorescence to the NIR region.

Using the reaction of 1,3-dioxin-4-ones that we discovered, it is possible to synthesize previously unknown functionalized xanthene derivatives. Using this reaction as a basis, we have developed a new method for the synthesis of a water-soluble xanthene-like fluorophore with near-infrared emission. Commercially available 5-aminosalicylic acid was used as the starting precursor. The sequence of transformations is presented in Scheme 1.



Scheme 1

The synthesized fluorophore absorbs in the green region of the electromagnetic spectrum and has a maximum emission in the near-infrared region.

## **SYNTHESIS OF PYRIDINES, PYRIMIDINES AND TRIAZOLES: CLOSING THE GAP BETWEEN CLICKING AND SYNTHESIZING**

Geleverya A.O.<sup>1,2</sup>, Kovaříček P.<sup>1</sup>, Kovalenko S.M.<sup>2</sup>,

e-mail: Anna.Heleveria@vscht.cz

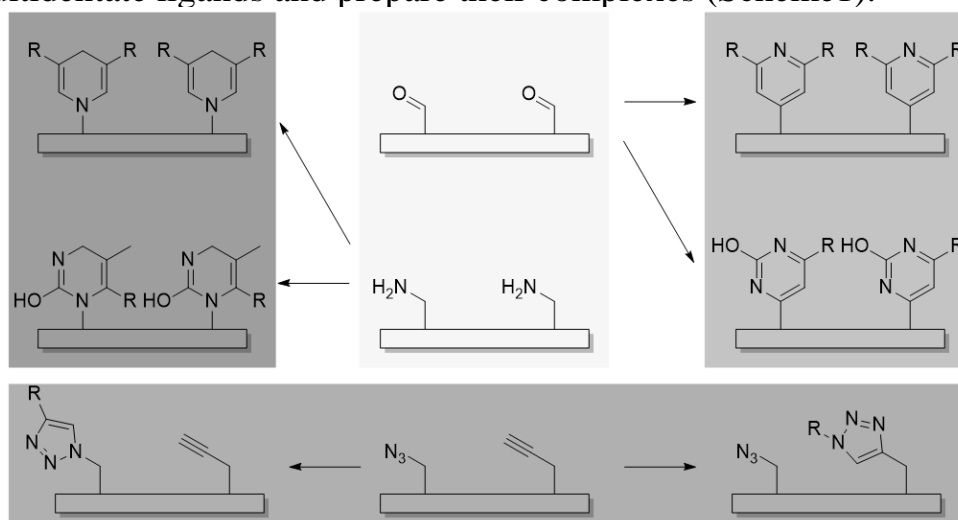
<sup>1</sup> *Dpt. of Organic Chemistry, UCT Prague,  
Czechia, Prague*

<sup>2</sup> *Dpt. of Organic Chemistry, V.N. Karazin Kharkiv National University,  
Ukraine, Kharkiv*

Multicomponent reactions (MCRs) employed in diversity-oriented syntheses provide valuable molecular frameworks with a minimal number of synthetic steps. MCRs are performed in a one-pot manner, involving a minimum of three reagents to produce a single product. Multicomponent strategy offers step efficiency, atom economy and high exploratory power which saves chemicals and time in comparison to stepwise protocols.

Terpyridine, which is an N-heteroaromatic tridentate ligand, has a strong chelating tendency that enables the formation of strong complexes with metal ions. It is widely used in various fields such as photovoltaic devices, DNA binding agents, sensors, photosensitizers, medicinal chemistry, and the construction of metal-organic frameworks (MOFs).

Inspired by the literature reports, we are developing a methodology for converting bulk MCRs in flasks (Hantzsch, Biginelli and CuAAC) into external functionalization protocols. We are trying to use MCRs to functionalize surfaces with multidentate ligands and prepare their complexes (Scheme 1).



**Scheme 1: Synthetic approaches for surface grafting with selected N-heterocyclic compounds**

*The work was supported by the Czech Science Foundation Grant No. 22-11299M 'Reaction networks at phase interfaces for dynamic self-assembly'. The team was also supported by the Experientia Foundation 2021 start-up grant. This project has received funding through the MSCA4Ukraine project, which is funded by the European Union. This work was also supported by the grant of Specific university research N° A2\_FCHT\_2023\_103.*



**SYNTHESIS OF *N*-(1-((1*H*-PERIMIDIN-2-YL)AMINO)-2,2,2-TRICHLOROETHYL)CARBOXAMIDES**

Horodyanko V.S., Lomynoha Y.R., Zadorozhnii P.V.,

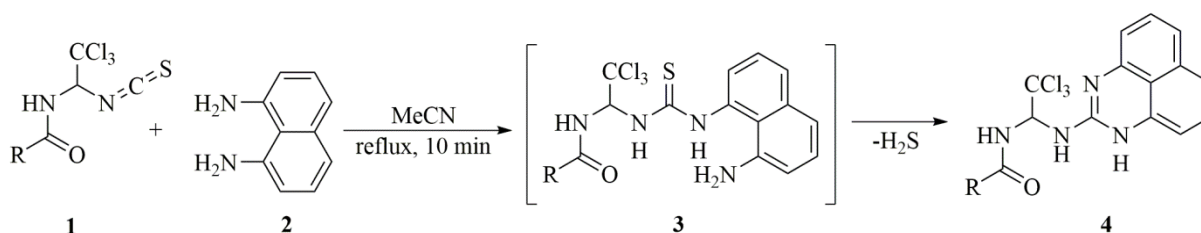
Kiselev V.V., Kharchenko A.V.

e-mail: torfp@i.ua

*Ukrainian State University of Chemical Technology,*

*Ukraine, Dnipro*

Perimidine derivatives are of great interest in pharmacy and medicine as potential biologically active substances [1]. Among the representatives of this class of compounds, substances with high antitumor, antibacterial, anti-inflammatory, and many other types of biological activity are known. In this regard, the development of new as well as expansion of the scope of previously known methods for the synthesis of perimidine derivatives is a very important and urgent task. In this work, we report the synthesis of a series of new amidoalkylated at the amino group derivatives of 1*H*-perimidin-2-amine. The method for the synthesis of these compounds is based on the reaction of naphthalene-1,8-diamine (2) with *N*-(2,2,2-trichloro-1-isothiocyanatoethyl)carboxamides (1) [2] (Scheme 1).



Scheme 1. Synthesis of *N*-(1-((1*H*-perimidin-2-yl)amino)-2,2,2-trichloroethyl)carboxamide derivatives (4).

The reaction was carried out at reflux in anhydrous acetonitrile for 10 min. We hypothesized that *N*-(1-(3-(8-aminonaphthalen-1-yl)thioureido)-2,2,2-trichloroethyl)carboxamides (3) were formed as intermediates in these transformations. It was the elimination of hydrogen sulfide from the latter led to the formation of perimidine derivatives [3]. The final products were isolated in 67-79% yield and their structure was confirmed by <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C NMR spectroscopy data.

References:

1. Thoraya, F.A.; Sami, A.H.A.; Zeinab, M.A.; Magda, A.A.; Magdi, Z.E.A. *Curr. Org. Chem.* 2020, 24, 1669–1716.
2. Zadorozhnii, P.V.; Pokotylo, I.O.; Kiselev, V.V.; Kharchenko, A.V.; Okhtina, O.V. *Heterocycl. Commun.* 2019, 25, 130–137.
3. Sachs, F. *Justus Liebigs Ann. Chem.* 1909, 365, 53–134.

## ELECTRONIC STRUCTURE OF MESOIONIC COMPOUNDS

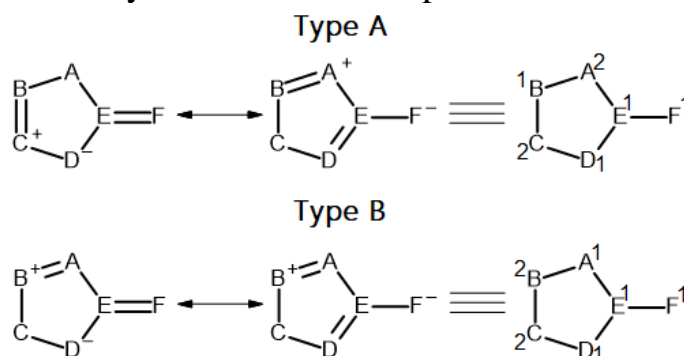
Курпа М.О., Ivanov V.V.

e-mail: mariaxkirpa@gmail.com

V.N. Karazin Kharkiv National University,  
Ukraine, Kharkiv

Mesoionic compounds are dipolar molecules in which both positive and negative charges are delocalized. Due to the delocalization of charges, the structures of mesoionic compounds cannot be presented in the form of classical covalent structures. To preserve the usefulness of the term "mesoionic", it is customary to limit its use to two types of five-membered heterocyclic mesomeric betaines – type A and type B [1]. These are cyclic molecules having two or more heteroatoms in a five-membered ring and exocyclic heteroatoms. In compounds of both types, the rings have a conjugated system of 8  $\pi$ -electrons, the difference between the classes is the origin of these  $\pi$ -electrons (fig. 1).

Molecules of mesoionic compounds are strongly stabilized due to delocalization of  $\pi$ -electrons and large dipole moments. Given the structural features and interesting physical, chemical, and biological characteristics, mesoionic compounds attract a lot of attention from researchers, particularly in photonics, nonlinear optical research, and medicinal chemistry, where a wide range of biological activity of mesoionic compounds has been discovered.



**Fig. 1** Resonance structures and the origin of  $\pi$ -electrons in studied mesoionic molecules. In Type A: A = O, NMe, S; B = C, CMe, CNMe<sub>2</sub>; C = NMe, O; D = C, CMe, CPh; E = C; F = O, S, NMe. In type B: A, D = C, CMe, N; B, C = NMe, S, O; E = C; F = O, S

In this work, we present a study of the electronic structure of 10 mesoionic compounds within the QTAIM (quantum theory of atoms in molecules) with the aim of finding indices characterizing molecular structures based on topological parameters. All calculations were performed using B3LYP density functional with the 6-31++G(d,p) basis set by employing the Gaussian 09 software.

The characteristics of bonds, such as electron density  $\rho$ , Laplacian of electron density  $\nabla^2\rho$  and ellipticity  $\varepsilon$  at critical points are compared to reference

molecules, which are furan, pyrrole, thiophene, pyrazole, isoxazole, isothiazole and tetrazol. Also we provide an analysis of geometrical parameters in studied molecules.

In order to understand the difference between the compounds of both classes, we introduce a number of indices which describe distribution of the topological parameters in the molecule, such as the standard deviation (SD), the Shannon index and Kullback-Leibler index (KL), 24 indices totally. For the four studied bond characteristics, the indices have been calculated both for the ring separately and for the entire  $\pi$ -electron system, including the exocyclic atom. Although type B compounds are by default more symmetrical, the obtained indices are quite comparable for compounds of both types, except for those characterizing the ellipticity distribution (table 1).

**Table 1.** Standard deviation and Kullback-Leibler index for ellipticity.

	Type A	Type B
SD for $\varepsilon$	0.112-0.176	0.007-0.101
KL for $\varepsilon$	0.080-0.285, 0.415	0.000-0.094, 0.486, 0.600

Despite the different origins of electrons in type A and type B rings, it cannot be said that electron delocalization in the conjugated system is solely determined by formal classification. In two types of studied structures, we observe both more ideal structures that are somewhat similar to each other, and extreme structures exhibiting unique properties. As a conclusion, the criterion for classifying a compound into type A or type B remains open, with type B compounds potentially exhibiting greater aromaticity.

#### References:

1. Heterocyclic Mesomeric Betaines and Mesoionic Compounds, Ramsden, C. A., Ed. *Advances in Heterocyclic Chemistry*: 2022; Vol. 137, pp 71-189.

## SYNTHESIS OF N-CARBOXYALKYL-1,8-NAPHTHALIMIDES WITH ELECTRON DONATING SUBSTITUENTS IN POSITIONS 4 AND 5

Milinchuk K.S., Kirienko A.V., Valentirova E.Yu., Fuchedzhi A.D.

e-mail: fedko@onu.edu.ua

I.I. Mechnikov Odessa National University,  
Ukraine, Odesa

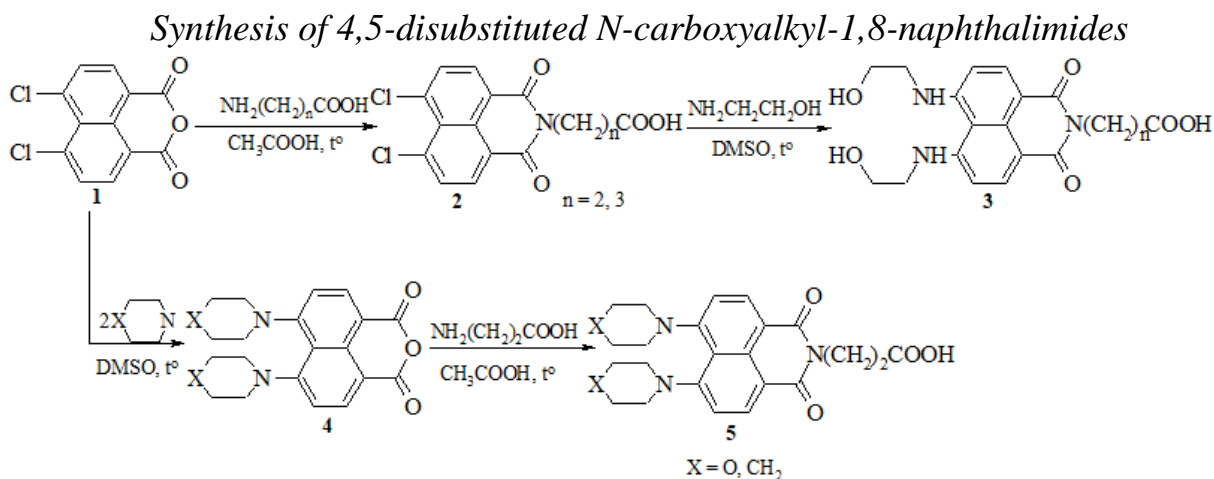
1,8-Naphthalimide derivatives containing electron donating substituent in position 4 of naphthalene ring are useful as fluorophores.

Introduction of the second electron donating substituent in position 5 can improve the effective fluorescence properties.

N-2-Carboxyethyl- and N-3-carboxypropyl-1,8-naphthalimides with residues of ethanolamine in position 4 and 5 (**3**) were synthesized by imidation of 4,5-dichloro-1,8-naphthalic anhydride (**1**) with  $\beta$ -alanine or  $\gamma$ -aminobutyric acid in acetic acid and by further interaction of imides (**2**) with ethanolamine in DMSO (scheme 1).

N-2-Carboxyethyl-1,8-naphthalimides with residues of piperidine and morpholine in positions 4 and 5 (**5**) were obtained by interaction of 4,5-dichloro-1,8-naphthalic anhydride (**1**) with corresponding secondary amines in DMSO followed by imidation of anhydrides (**4**) with  $\beta$ -alanine (scheme 1).

Scheme 1



The target products (**3**, **5**) are crystalline substances with luminescence in yellow-green region of the spectrum.

4,5-Dipiperidino-, 4,5-dimorpholino- and 4,5-di(2-hydroxyethylamino)-N-carboxyalkylnaphthalimides are potential fluorescent probes for various biological objects capable of covalent binding to amino groups due to the presence of carboxyl group in their structure.







**JUSTIFICATION OF THE RELEVANCE OF RESEARCH AND DEVELOPMENT OF PHYTOPREPARATIONS BASED ON MEDICINAL PLANT RAW MATERIALS**

Prytula D.A., Levytska I.R., Lomynoha O.O.

e-mail: ligaofpharm@gmail.com

*Ukrainian State University of Chemical Technology,  
Dnipro, Ukraine*

Phytopreparations, phytotherapeutic preparations — any extracts or active substances obtained from medicinal plant raw materials, or their combination in certain medicinal forms. The pharmacological effect of herbal preparations is determined by biologically active substances found in plants: glycosides, flavonoids, essential oils, alkaloids, vitamins, etc. These biologically active substances are in a certain ratio and optimally affect the human body [1].

Phytopreparations, unlike synthetic medicines, have a mild and moderate effect on the body, have a gradual but stable therapeutic effect. Phytopreparations do not cause addiction, have higher bioavailability due to the affinity of plant substances to the human body. Preparations of different plants are well combined with each other, often enhancing the effect of each other (the phenomenon of synergism) [2].

The latest trends in pharmaceutical research in Ukraine indicate an increase in interest in medicinal plants and herbal preparations. The review of the pharmaceutical market of Ukraine indicates an annual increase in the number of registered medicinal products of plant origin by 5–7%. Accordingly, the need of pharmaceutical enterprises for medicinal herbs increases by 20–25% annually [3].

The development of the phytopharmaceutical market is mostly due to the attraction and research of new types of medicinal plants. The vast majority of phytopreparations on the pharmaceutical market of Ukraine are made from wild or cultivated medicinal plant raw materials, which makes them economically more affordable. Thus, the issue of finding, researching and developing new medicines based on medicinal plant raw materials is an urgent and promising direction in pharmacy.

References:

1. Vaula, O.P. Забезпечення якості лікарських засобів рослинного походження: стан та перспективи [Текст] / Vaula, O.P., Derkach, T.M. // Фармацевтичний часопис. – 2017. - №2. – р. 79–86.
2. Пенькова О.Г. Маркетинговий аналіз фармацевтичного ринку України [Текст] / Пенькова, О.Г., Корман, І.І., О.В. Семенда // Investytsiyi: praktyka ta dosvid: - 2022. – №1. – р.16–23.
3. Державний реєстр лікарських засобів України [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <http://www.drlz.kiev.ua>. – Заголовок з екрана.

## PYRROLYL- $\beta$ -CHLOROVINYLAALDEHYDE AND BENZYL ISOCYANIDE AS BUILDING BLOCKS IN THE SYNTHESIS OF PEPTIDOMIMETICS

Savluk T.O.<sup>1</sup>, Distanov V.B.<sup>1</sup>, Tsygankov A.V.<sup>1,2</sup>, Chebanov V.A.<sup>2,3</sup>

e-mail: tanyasvlk0@gmail.com

<sup>1</sup> NTU "Kharkiv Polytechnic Institute",

Ukraine, Kharkiv

<sup>2</sup> Division of Functional Materials Chemistry, State Scientific Institution

"Institute for Single Crystals" of NAS of Ukraine,

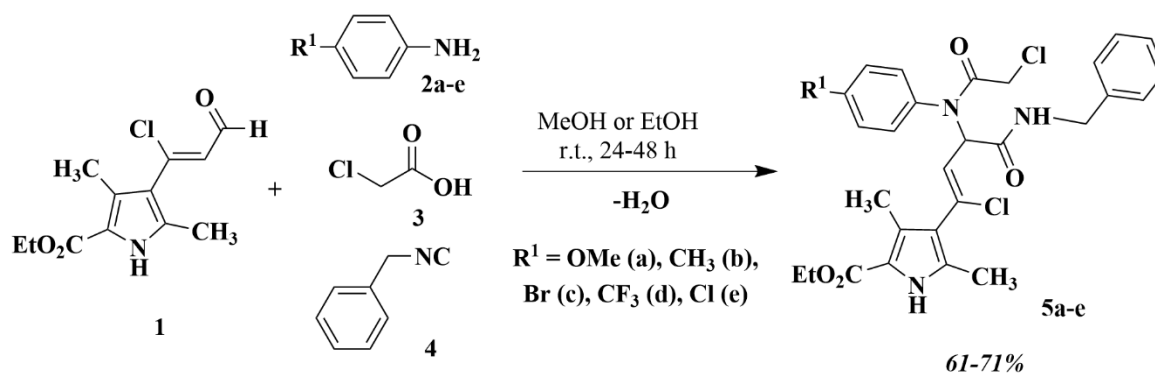
Ukraine, Kharkiv

<sup>3</sup> V. N. Karazin Kharkiv National University,

Ukraine, Kharkiv

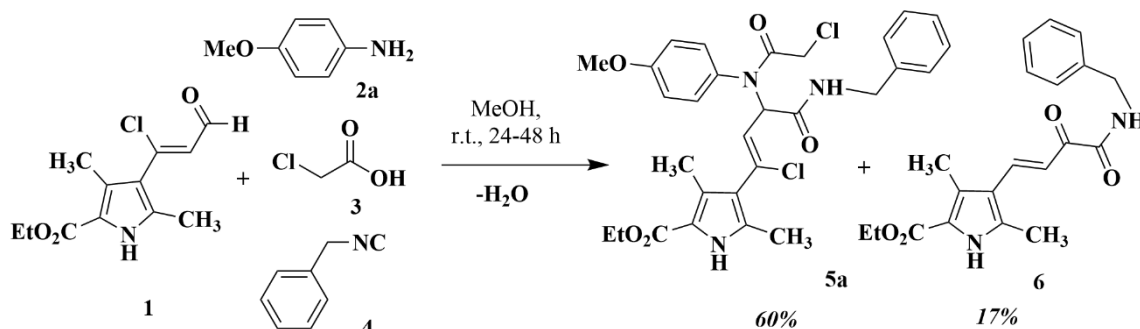
Today, the multicomponent Ugi isocyanide reaction is widely used to build a bisamide framework [1], which is the first step towards the creation of peptidomimetics [2].

Continuing research into the possibilities of using pyrrolyl- $\beta$ -chlorovinylaldehyde **1** [3] as the smallest possible building block for the synthesis of Ugi bisamides, we investigated the appropriate reaction of this aldehyde with benzyl isocyanide, chloroacetic acid and aromatic amines (scheme 1).

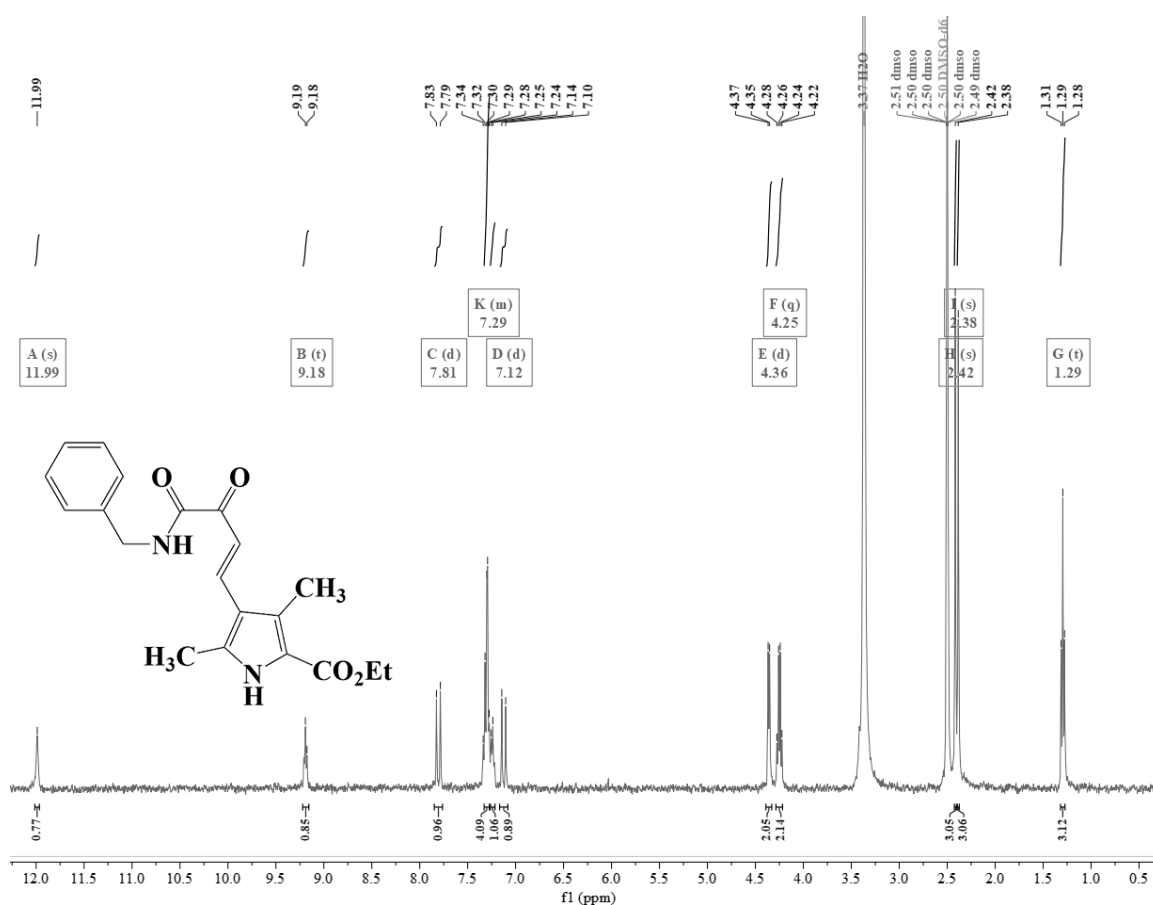


Scheme 1. Synthesis of Ugi bisamides **5a-e**

It was found that the Ugi reaction with aldehyde **1** and benzyl isocyanide **4**, unlike other isocyanides [3], takes slightly less time and takes 24 hours. In the case of using anisidine **2a**, the product that precipitated first in methanol was 2-oxo-4-(1H-pyrrol-3-yl)but-3-enoic acid amide **6** (scheme 2).



**Scheme 2.** Feature of the Ugi-4CR with the participation of *para*-anisidine **2a**



**Figure 1.** <sup>1</sup>H NMR spectrum of amide **6**

Substance **6**, the structure of which was established using the NMR (Fig. 1) and LC-MS methods, is a yellow-green powder with a melting point of 195°C, poorly soluble in methanol and ethanol.

The authors thank the National Academy of Sciences of Ukraine for financial support in the frame of the project “Directed synthesis, chemical transformations and properties of new nitrogen-containing heterocyclic compounds” (0122U001857).

References:

1. Murlykina M.V., Kolomiets O.V., Chebanov V.A., et al. Doebner-type pyrazolopyridine carboxylic acids in an Ugi four-component reaction. *Beilstein J. Org. Chem.* 2019. Vol. 15. P. 1281–1288.

2. Kolomiets O.V., Tsygankov A.V., Kornet M.N., Brazhko A.A., Musatov V.I., Chebanov V.A. Synthesis of imidazo[1,2-a]pyridine-containing peptidomimetics by tandem of Groebke-Blackburn-Bienaymé and Ugi reactions. *Beilstein J. Org. Chem.* 2023. Vol. 19. P. 727–735.

3. Ananieva V.V., Vereshchak V.O., Larina A.I., Tsygankov A.V., Chebanov V.A. Post-cyclization of ugi bisamides based on pyrrolyl- $\beta$ -chlorovinylaldehyde. *Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds: abstracts of the XXIII International Symposium participants, Lodz, Poland, October 28, 2022 / University of Lodz, 2022.* P-068.

## PREDICTION OF BIOLOGICAL ACTIVITY O-HYDROXYPHENYL DERIVATIVES OF PYRAZOLES

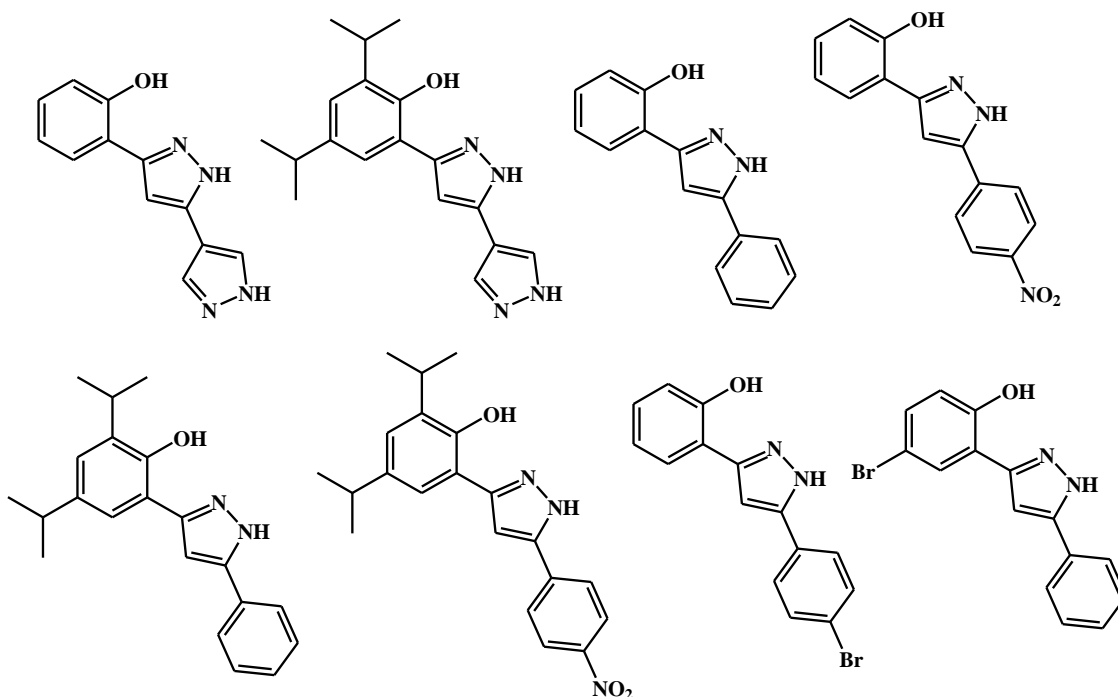
Skrynnik K.I., Varenichenko S.A., Farat O.K.

e-mail: katty.skrynnik2211@gmail.com

Ukrainian State University of Chemical Technology,  
Ukraine, Dnipro

Over the past few years, there has been a significant expansion in research on the chemistry of pyrazoles due to numerous applications of these heterocycles in various fields such as medicine, agrochemistry, organic synthesis, catalysis, etc. The prevalence of pyrazole cores in biologically active molecules has stimulated the need for an elegant and efficient route to derivatize pyrazoles.

Previously, the Department of PhtaTOR developed an effective synthesis of o-hydroxyphenyl derivatives of pyrazoles.



Using the ADMET 2.0 web resource, physicochemical and pharmacological properties, were checked for compliance with current requirements. All structures meet the requirements of the Lipinski Rules.

The synthesized substances demonstrated good intestinal absorption, penetration of the blood-brain barrier, half-life and moderate toxicity, mutagenicity and carcinogenicity. The data obtained allow us to recommend the obtained compounds as low-molecular building blocks for further biochemical studies.

## APPLICATION OF MICROWAVE ACTIVATION IN THE SYNTHESIS OF DIINDOLYLMETHANE DERIVATIVES\*

Vereshchak V.O.<sup>1,2</sup>, Ananieva V.V.<sup>3</sup>, Tsygankov A.V.<sup>1,2</sup>, Lipson V.V.<sup>1,4</sup>  
e-mail: vladver02@gmail.com

<sup>1</sup>Division of Functional Materials Chemistry, State Scientific Institution  
“Institute for Single Crystals” of NAS of Ukraine,  
Ukraine, Kharkiv

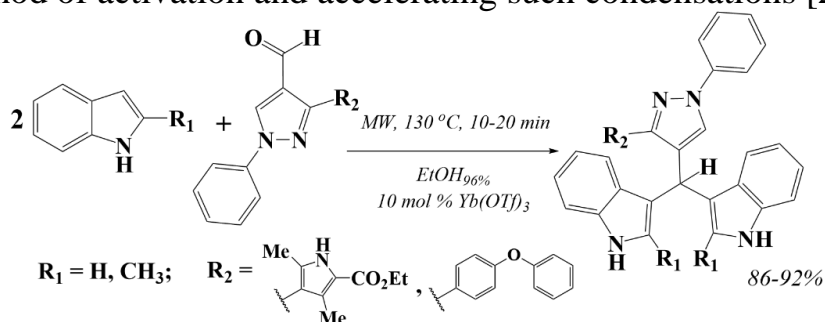
<sup>2</sup>NTU “Kharkiv Polytechnic Institute”,  
Ukraine, Kharkiv

<sup>3</sup>Kharkiv National Automobile and Highway Technical School,  
Ukraine, Kharkiv

<sup>4</sup>V.N. Karazin Kharkiv National University,  
Ukraine, Kharkiv

Diindolylmethane (DIM) and its derivatives constitute an important biological active class of indole alkaloids. Therefore, several methods have been reported for their synthesis [1].

One of the widespread ways to synthesize DIM and its derivatives is a condensation reaction between an indole with aldehydes employing Brönsted-Lowry or Lewis acids. Microwave irradiation is a potentially powerful and modern method of activation and accelerating such condensations [2].



Scheme 1. Synthesis of DIMs

Continuing research on the implementing of microwave activation for the synthesis of diindolylmethane derivatives, we developed a method for the synthesis of DIMs based on indole and its 2-methyl derivative and functionalized pyrazolecarbaldehydes.

### References:

1. Mahardhika A.B. et al. Design, synthesis, and structure–activity relationships of diindolylmethane derivatives as cannabinoid CB2 receptor agonists. *Archiv der Pharmazie*. 2023. Vol. 356, no. 3. P. 1–24.
2. Penieres-Carrillo J.G. et al. Synthesis of novel benzimidazole-diindolylmethane hybrid compounds within the green chemistry context. *Arkivoc*. 2017. Vol. 2017, no. 4. P. 210–221.

### \*Acknowledgement

The study was supported by the grant of National Research Foundation of Ukraine 2022.01/0087 «The synthesis, research and standardization of diindolylmethane and its analogues and their supramolecular complexes for further use in the development of the innovative antimicrobial drugs and/or disinfectants» (0123U103756).

**DEVELOPMENT OF NEW ANTICONVULSANT DRUGS BY  
CHEMICAL MODIFICATION OF CARBAMAZEPINE**

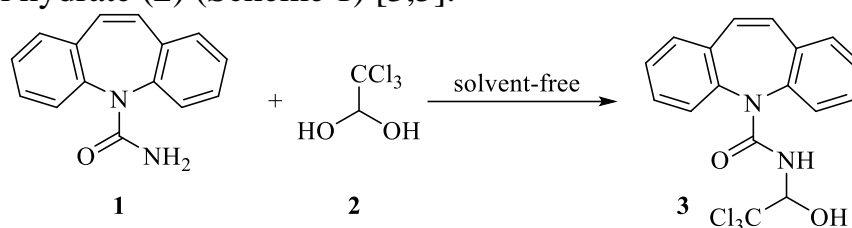
Yurko S.O., Lomynoha Y.R., Zadorozhnii P.V., Kiselev V.V., Kharchenko A.V.

e-mail: torfp@i.ua

*Ukrainian State University of Chemical Technology,  
Dnipro, Ukraine*

Epilepsy is a serious disease of the central nervous system associated with abnormal electrical activity in the brain. Its main symptom is repeated unprovoked convulsions [1]. Today, many drugs are known to treat epilepsy, but they have a number of side effects, which significantly complicates the treatment process. Approximately 30% of patients have epilepsy that is drug-resistant [2]. In this regard, work on searching for new and modifying existing antiepileptic drugs is very important and relevant.

Here we report the modification of carbamazepine (**1**) by condensation with chloral hydrate (**2**) (Scheme 1) [3,5].



Scheme 1. Synthesis of *N*-(2,2,2-trichloro-1-hydroxyethyl)-5*H*-dibenzo[*b,f*]azepine-5-carboxamide (**3**)

The reaction was carried out without a solvent by fusing the starting reagents [5]. The structure of the obtained compound **3** was confirmed by <sup>1</sup>H NMR and <sup>13</sup>C NMR spectroscopy data.

References:

1. Rowles J, Olsen M. Perspectives on the development of antioxidant antiepileptogenic agents. *Mini Rev. Med. Chem.*, 2012, 12, 1015-1027.
2. Pitkanen A. Therapeutic approaches to epileptogenesis hope on the horizon, *Epilepsia*, 2010, 51, 2-17.
3. Zadorozhnii PV, Popykhach NP, Kiselev VV, Pokotylo IO, Okhtina OV, Kharchenko AV. In Silico Prediction of Anticonvulsant Activity of *N*-(2, 2, 2-Trichloro-1-hydroxyethyl) alkenyl- and -alkylarylcarboxamides. *Res. J. Pharm. Technol.*, 2018, 11, 711-716.
4. Zadorozhnii PV, Kiselev VV, Pokotylo IO, Okhtina OV, Kharchenko AV. In silico prediction of anticonvulsant activity of *N*-(2,2,2-trichloro-1-hydroxyethyl)alkylcarboxamides. *J. Chem. Pharm. Sci.* 2017, 10, 1099-1105.
5. Pokotylo IO, Zadorozhnii PV, Kiselev VV, Kharchenko AV. Solvent-free synthesis and spectral characteristics of *N*-(2,2,2-trichloro-1-hydroxyethyl)carboxamides. *Chem. Data Coll.* 2018, 15-16, 62-66.



**ЗАСТОСУВАННЯ ФАРМАКОФОРНОГО СКРИНІНГУ,  
МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОКІНГУ ТА QSAR-МЕТОДІВ ДЛЯ ПОШУКУ  
АНТИКОРОНАВІРУСНИХ ПРЕПАРАТІВ**

Анохін Д.О., Калугін О.М., Коваленко С.М., Кіріченко О.В.,

Захаров А.Б., Іванов В.В.

e-mail: dmitriy25102002@gmail.com

*Харківський Національний Університет ім. В.Н. Каразіна,*

*Україна, Харків*

Проблема пошуку ефективних ліків від COVID-19 і досі є актуальною. Комп'ютерні методи, такі як фармакофорний скринінг та докінг займають важливе місце у цьому напрямку.

Процедура фармакофорного скринінгу полягає у порівнянні активних центрів певної молекули, що зв'язуються з протеїном – фармакофорів з фармакофорами референсної молекули з доведеною активністю.

Фармакофорний скринінг є відносно швидкою процедурою і може бути застосованим для великих вибірок, що містять мільйони молекул. Молекулярний докінг – це комп'ютерне моделювання взаємодії ліганда з білком.

У порівнянні зі скринінгом, докінг великих вибірок є часо- та ресурсозатратним. Проте об'єктивною мірою активності молекули є енергія спорідненості до білка, що обчислюється за результатами докінгу.

У даній роботі в якості мішені розглядалася головна протеаза коронавірусу SARS-CoV-2 M<sup>pro</sup>.

Інгібування цієї протеази унеможливорює реплікацію РНК вірусу, тому блокування саме цієї мішені є ефективним. У якості референсних лігандів ми вибрали інгібітори N3 та PF-07321332 (PDB-коди структур комплексів 6lu7 та 7vh8, відповідно).

Для нашої роботи ми використовували вибірку з 424 похідних 2-(5-арилсульфоніл-4-оксо-3,4-дигідро-2-піримідинсульфо)ацетаміду.

Був проведений фармакофорний скринінг та докінг цієї вибірки з використанням програмного пакету LigandScout [1].

При зіставленні результатів, одержаних цими методами, значних кореляції між оцінкою фармакофорного скринінгу (Pharmacophore Fit-Score, PFS) та енергії спорідненості (Affinity) не було виявлено (рис. 1).



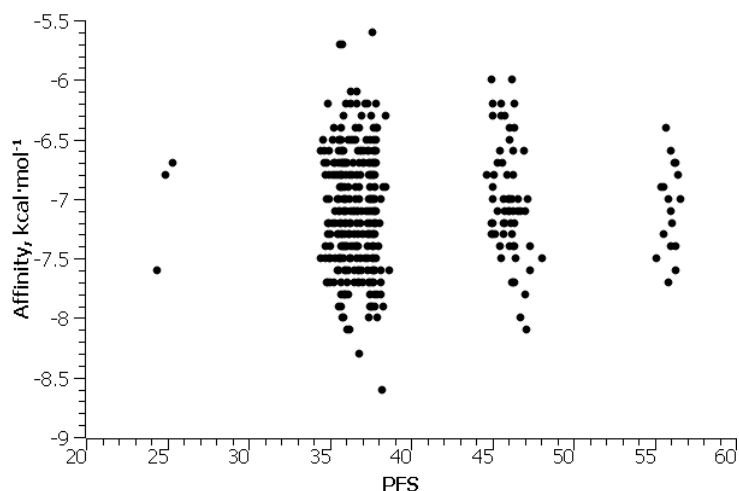


Рис. 1. Графік залежності енергії спорідненості від Pharmasophore Fit-Score

Як альтернативу ресурсозатратному докінгу ми пропонуємо використовувати логістичну регресійну модель. Дана модель дозволяє класифікувати молекули на активні та неактивні.

$$Y_i = 1 / (1 + \exp(-z_i)), \quad z_i = \beta_0 + \sum_j \beta_j X_{ij} \quad (1)$$

Молекула вважається активною ( $Y_i=1$ ), якщо її значення енергії спорідненості дорівнює або перевищує енергії зв'язування референсного ліганду. У іншому випадку  $Y_i=0$ . Регресорами  $X_{ij}$  є молекулярні дескриптори, які розраховуються, виходячи із молекулярної структури ліганду. Для розрахунку дескрипторів ми користувалися програмою PaDEL-Descriptor [2].

Для комплексів головної протеази 6lu7 та 7vh8 було правильно класифіковано 79 % та 94 % молекул, відповідно. Ці результати можна вважати задовільними для застосування даного підходу для пошуку ефективних препаратів проти COVID-19.

Література:

1. G. Wolber, A. A. Dornhofer, T. Langer. J Comp.-Aided Mol. Design. 2006, 20, pp 773–788.
2. Yap, C.W. (2011), PaDEL-descriptor: An open source software to calculate molecular descriptors and fingerprints. J. Comput. Chem., 32: 1466-1474.

## **РОЗРОБКА СКЛАДУ НАЗАЛЬНОГО СПРЕЮ ДЛЯ ЛІКУВАННЯ РИНИТУ ІНФЕКЦІЙНОЇ ЕТІОЛОГІЇ**

Біляєва Д.К., Манський О.А., Криклива І.О., Січкара А.А.

e-mail: manscy@ukr.net

*Національний фармацевтичний університет,  
Україна, Харків*

Вступ. Запальні захворювання носа (риніти), а також навколоносових, або придаткових, пазух носа (синусити) є найпоширенішими ЛОР-патологіями. Найхарактерніший симптом риніту в дорослих і дітей - наявність із носових ходів серозних, слизових, слизово-гнійних, гнійних, часом - з домішкою крові виділень. І, якщо не приділяти належної уваги лікуванню риніту, відчуття закладеності ніса може перерости до смертельної небезпеки - відсутності можливості дихання та розповсюдженості інфекції організмом. Інфекційний риніт бактеріального походження виникає в разі потрапляння на слизову носа бактерій (стафіло-, стрепто-, пневмококів). Ефективним, в даному випадку, буде лікування з використанням антимікробних засобів. З метою зменшення ризику появи антибіотикорезистентних штамів доцільним є використання компонентів антимікробної дії природного походження. Таким чином, актуальність розробки препарату антимікробної дії на основі природної сировини для лікування запальних захворювань носа є актуальною.

Мета дослідження. Розробка складу і технології препарату антимікробної дії для лікування інфекційного риніту у формі назального спрею.

Матеріали та методи. Дослідження проводились згідно стандартних методик ДФУ та характеризуються достовірністю та відтвореністю отриманих результатів. В якості діючої речовини нами було обрано рідкий екстракт аронії чорноплодної, який був розроблений та одержаний в НТУ «ХПІ» доц. Домарьовим А.П.

Результати дослідження. Як розчинник використовували воду очищену. Рациональне значення водневого показника підтримували шляхом введення до складу спрею регулятора рН. У здорових дорослих людей рН назального секрету слизової оболонки носа перебуває в межах від 5,5 до 6,5. З метою усунення утворення осаду до складу спрею вводили співрозчинник – ПЕО 400. З метою запобігання мікробної контамінації до складу назального спрею необхідно вводити консерванти. В силу широкого спектра антибактеріальної активності та низької токсичної дії на організм людини, бензалконію хлорид (БХ) часто використовують у складі різних ЛФ. Тому нами, як консервант, було обрано, бензалконію хлорид.

Висновки. Обґрунтовано склад лікарського засобу антимікробної дії для лікування інфекційного риніту бактеріального походження.

## ПЕРОРАЛЬНИЙ ПРЕПАРАТ ДЛЯ КОРЕКЦІЇ ГОРМОНАЛЬНОГО СТАРІННЯ ШКІРИ

Бурч А.О., Іванова І.Є., Крищик О.В.

e-mail: ohanakr15@gmail.com

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро

Старіння шкіри – це процес, у якому якість шкіри погіршується з віком через синергічний ефект хронологічного старіння, фотостаріння, гормонального дефіциту та факторів навколишнього середовища. При старінні шкіри відбувається зменшення кількості фібробластів, які синтезують колаген [1]. Існує два основні процеси, які викликають старіння шкіри: внутрішній і зовнішній. Зовнішнє старіння спричинене такими факторами навколишнього середовища, як перебування на сонці, забруднене повітря, куріння та неправильне харчування. Внутрішнє старіння відображає генетичний фон і залежить від часу. Зовнішній вік шкіри характеризується фотопшкодженням у вигляді зморшок, пігментованих уражень, неоднорідної гіпопігментації та актинічного кератозу.

У наш час дерматологи мають у своєму розпорядженні численні способи запобігання старінню, а також інші профілактичні засоби, такі як косметологічні засоби, місцеві та системні терапевтичні засоби та інвазивні процедури [2]. До топічних препаратів проти старіння належать: ретиноїди,  $\alpha$ -гідроксикислоти,  $\beta$ -гідроксикислоти, аскорбінова кислота, коензим Q10,  $\beta$ -глюкани, керамід. До системних засобів проти старіння відносяться: препарати колагену, астаксантин, гіалуронова кислота, полі-L-молочна кислота, рослинні екстракти.

За останні 10 років сполуки рослинного походження, такі як ресвератрол, куркумін, кверцетин, силімарин і бакухіол, а також кілька рослинних композицій, що містять олію шипшини (*Rosa moschata*), екстракт чорниці (*Vaccinium myrtillus*), солодки (*Glycyrrhiza glabra*) екстракт кореня або олія насіння граната (*Punica granatum*) оцінені клінічними випробуваннями, являють собою найкращі та найбільш перспективні варіанти для розробки нових продуктів проти старіння, включаючи ферулову кислоту та галову кислоту, *Thymus vulgaris*, *Panax ginseng*, *Triticum aestivum* і *Andrographis paniculata*.

Метою дослідження є розробка комплексного перорального препарату для корекції гормонального старіння шкіри та технології його виробництва.

Запропонований препарат у формі капсул у якості діючих речовин містить екстракт кореня діоскореї, вітамін С, вітамін Е (токоферолу ацетат), гіалуронову кислоту [3].

Коріння *Dioscorea piperonica* Makino діоскореї містить цілий комплекс біологічно активних речовин, найбільш вивченими з них є стероїдні сапоніни та головний з них – діосгенін, який є натуральним попередником дегідроепіандростерону (ДГЕА). ДГЕА – це один з основних стероїдних гормонів, який біохімічно перетворюється на гормони естроген, тестостерон, прогестерон і кортикостерон, продукція якого з віком постійно знижується. Фібробласти та м'язові волокна шкіри чутливі до циркулюючих естрогенів та прогестерону, що спричиняє зниження синтезу колагено-еластинових волокон. Також відомо, що діоскорея є природним стимулятором вироблення соматотропного гормону, який збільшує синтез білків у підшкірному шарі, відновлює пружність, характерну для молоді шкіри, покращує її колір.

Вітамін С – антиоксидант/акцептор вільних радикалів, що безпосередньо задіяний у синтезі колагену та його структурі і, таким чином, потенціює утворення гіалуронової кислоти. Важливим аспектом фізіологічної ролі аскорбінової кислоти є її здатність відновлювати окислені форми біологічно активних волокон, головним чином глутатіону і вітаміну Е.

Вітамін Е – антиоксидант, що перешкоджає зниженню вмісту колагену, втраті вологості та еластичності шкіри, захищає її від шкідливого впливу сонячних променів.

Гіалуронова кислота перешкоджає розпаду еластину та колагену, утримує воду в міжклітинному просторі, підвищуючи тим самим опір тканин стиску та надаючи шкірі пружність, сприяє виробленню фібробластів сполучної тканини. У якості допоміжних речовин обрані аеросил, кальцію стеарат.

Розроблено технологічний регламент виробництва комплексного перорального препарату для корекції гормонального старіння шкіри у капсулах та обрано необхідне технологічне обладнання.

#### Література:

1. Manupriya C., Azmi K., Madhu G. Chaudhary Skin Ageing: Pathophysiology and Current Market Treatment Approaches // *Current Aging Science*. – 2020. - № 13. – P. 22-30.

2. Skin anti-ageing strategies / R. Ganceviciene, A. Liakou, A. Theodoridis et al. // *Dermatoendocrinol.* – 2012. – №4(3). – P. 308-19.

3. Pat. EP 1942920 B1, Int Cl.:A23L 33/105 (2016.01) Extract of the family dioscoreaceae and composition for preventing or treating peripheral neuropathy comprising the same [Text] / KIM, Sun-Yeou; KANG, Tong-Ho; PARK, Ji-Ho (KR). - Representative: Turner, Craig Robert et al A.A. Thornton & Co. – Priority: 28.10.2005 KR 20050102450. – Date of publication and mention of the grant of the patent: 26.04.2017 Bulletin 2017/17. – 22 p.

## РЕГІОСЕЛЕКТИВНІСТЬ ГАЛОГЕНОГЕТЕРОЦИКЛІЗАЦІЇ АЛКЕНІЛТІОБЕНЗОТІАЗОЛУ

Галега О.В., Повідайчик М.В., Онисько М.Ю.

e-mail: haleha.olha@student.uzhnu.edu.ua

ДВНЗ «Ужгородський національний університет»,

Україна, Ужгород

Відомо, що напрямок електрофільної гетероциклізації термінальних та інтернальних алільних тіоетерів бензотіазолу залежить від наявності та природи замісника біля термінального атома карбону аліла і може приводити до синтезу тіазоло- чи тіазино-бензотіазолінієвих солей або їх суміші. Напрямок галогеноциклізації алільного(металільного) тіоетеру чутливий до полярності розчинника, зміна якої впливає на регіохімію процесу [1]. Натомість, при галоциклізації цинамільного тіоетеру утворюються виключно галогеніди тіазинобензотіазолію [2]. Тому дослідження напрямку гетероциклізації алкенильних тіоетерів в залежності від положення кратного зв'язку чи зміни виду замісників є актуальним.

Метою даної роботи є дослідження напрямку галогеноциклізації пренільного **2** та бутенільного **3** тіоетерів бензотіазолу, які синтезовані за методикою [2]. Електрофільну гетероциклізацію тіоетерів **2,3** проводили дією галогенів (бром, йод) у хлороформі та броміду йоду в оцтовій кислоті.

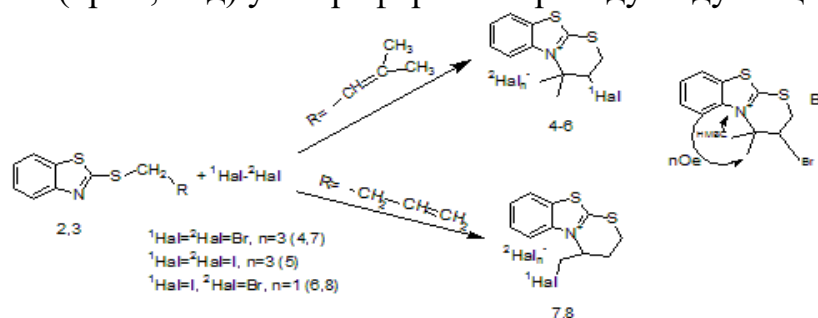


Рис.1 Схема синтезу та доказу будови солей тіазинобензотіазолію 4-8

Аналіз літературних даних свідчить, що напрямок галоциклізації пренільних тіоетерів чи етерів залежить від природи базового гетероциклу і приводить до ателювання тіазольного чи тіазинового циклу. Нами встановлено, що галогенування 2-пренілтїобензотіазолу **2** регіоселективно приводить до утворення моно чи тригалогенідів тіазинобензотіазолію **4-6**, що однозначно підтверджено кореляційною ЯМР спектроскопією. Солі тіазинобензотіазолію **7,8** також утворюються і при галоциклізації бутенільного тіоетеру бензотіазолу **3**.

### Література:

1. Korotkikh, N.I.; Aslanov, A.F.; Shvaika, O.P. Chem Heterocycl Compd, 1990, 26(6), 716-717.
2. O.V. Haleha, M.V. Povidaichyk, O.V. Svalyavin, E.M. Ostapchuk, M.Yu. Onysko. Vopr. him. him. tehnol., 2023, 2, 61-66.

СИНТЕЗ НОВИХ ПОХІДНИХ 1,2,3-ТРИАЗОЛ-4-ІЛ-1,4-ДИГІДРОПІРИДИНУ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ЇХ ВПЛИВУ НА КАНАЛИ КАЛЬЦІЮ L-ТИПУ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОКІНГУ

Гелеверя А.О.<sup>\*</sup>, Журавель І.О.<sup>\*\*</sup>, Коваленко С.М.<sup>\*\*\*</sup>, Кириченко О.В.<sup>\*\*\*</sup>,  
Билів І.Є.<sup>\*\*</sup>

e-mail: Anna.Heleveria@vscht.cz

<sup>\*</sup>Університет хімії та технології,  
Чеська Республіка, Прага

<sup>\*\*</sup>Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна,  
Україна, Харків

<sup>\*\*\*</sup>Національний фармацевтичний університет,  
Україна, Харків

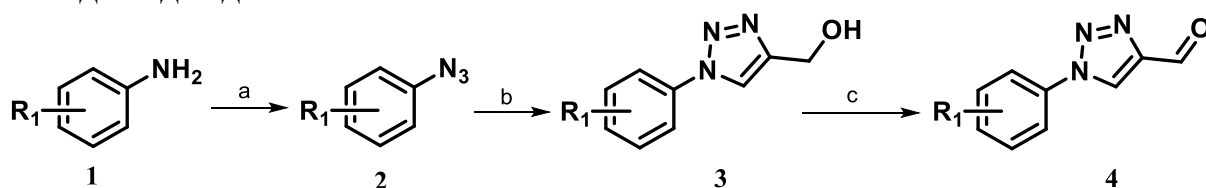
**Вступ.** Лікарські засоби (ЛЗ) групи 1,4-дигідропіридинів (ДНР), що пригнічують активність кальцієвих каналів, посідають важливе місце в терапії гіпертонічної хвороби, що пов'язано з їх високою вибірковістю по відношенню саме до судин. Препарати цієї групи мають широке застосування та значний попит. Але відомі на сьогодні блокатори кальцієвих каналів не позбавлені недоліків, мають побічну дію, що робить доцільним пошук та розробку нових більш ефективних та безпечних ЛЗ цієї групи.

**Мета.** Здійснити синтез та провести молекулярний докінг нових аналогів ніфедипіну, що поєднують фрагменти 1,4-дигідропіридину та 1,2,3-триазолу з метою пошуку перспективних фармацевтичних агентів гіпотензивної дії з покращеними показниками біостабільності, біодоступності, ефективності та селективності до рецепторів.

**Матеріали та методи.** Для синтезу нових сполук використовували стандартні синтетичні методи; будову речовин підтверджено даними <sup>1</sup>H ЯМР-, <sup>13</sup>C ЯМР-спектроскопії та мас-спектрометрії. Дослідження *in silico* були здійснені за допомогою програми AutoDock Vina та LigandScout.

**Результати та їх обговорення.** Нами здійснено синтез ряду нових похідних 2,6-диметил-1,4-дигідропіридин-3,5-дикарбоксилатів із 1-арилзаміщеним 1,2,3-триазольним фрагментом в положенні 4.

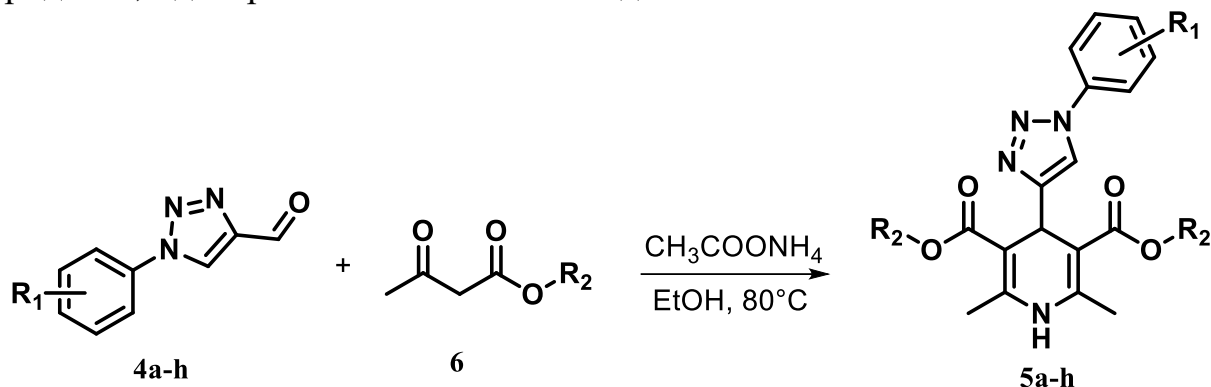
Побудову 1,2,3-триазольного циклу здійснювали клік-реакцією пропаргілового спирту з арилазидами **2** за Хьюзгеном (CuAAC) з подальшим окисненням спиртів **3** під дією хлорохромата піридинію (PCC). Вихід альдегідів **4** становив 68 – 79%.





**Схема 1.** Синтез 1*H*-1,2,3-триазол-4-карбальдегідів. Реагенти і умови: а) NaNO<sub>2</sub>, HCl, 0°C; NaN<sub>3</sub>, 2–4 h, rt; б) пропаргіловий спирт, CuSO<sub>4</sub>, аскорбат натрію, THF:H<sub>2</sub>O (1:1), rt; с) PCC, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 2 h, rt.

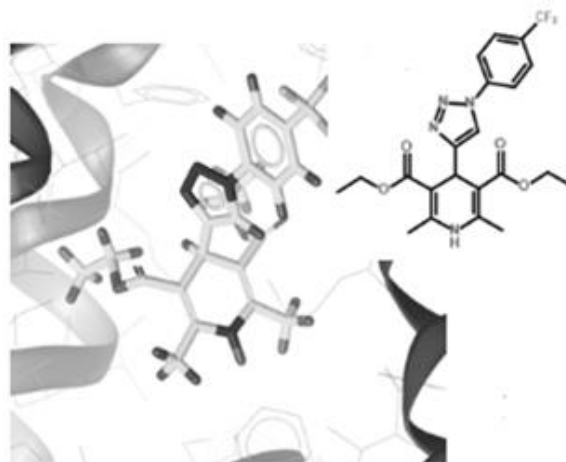
Далі конденсацією двох еквівалентів 1,3-дикарбонільної сполуки **6**, одного еквівалента альдегіда **4a-h** і ацетата амонію **6** за реакцією Ганча отримували кінцеві 2,6-диметил-4-(1*H*-1,2,3-триазол-4-іл)-1,4-дигідропіридин-3,5-дикарбоксилати **5a-h** з виходами 80–96%:



**Схема 2.** Синтез похідних 2,6-диметил-4-(1*H*-1,2,3-триазол-4-іл)-1,4-дигідропіридин-3,5-дикарбоксилатів **5a-h**.

Проведено молекулярний докінг синтезованих сполук для гнучкої моделі цих лігандів та фіксованої моделі білку дигідропіридинового рецептора кальцієвих каналів *L*-типу rCav1.1.

Результати комп'ютерного моделювання показали, що досліджувані речовини займають те саме положення в активному сайті ферменту, що й препарат порівняння ніфедипін. Наприклад, 3,5-діетил-2,6-диметил-4-(1-(4-(трилуорометил)феніл)-1*H*-1,2,3-триазол-4-іл)-1,4-дигідропіридину-3,5-дикарбоксилат за шкалою афінності зв'язування LigandScout має спорідненість до рецептора rCav1.1 на рівні -24,8 порівняно з -24,9 для ніфедипіну (на малюнку представлена візуалізація молекулярної стиковки сполуки відносно рецептора rCav1.1 (PDB 6JP5)).



**Висновки.** Здійснено синтез нових сполук ряду 1,2,3-триазол-4-іл-2,6-диметил-1,4-дигідропіридин-3,5-дикарбоксилатів. Проведені розрахунки енергій зв'язування та скорингових функцій вказують на потенційну здатність синтезованих речовин блокувати кальцієві канали *L*-типу та на доцільність дослідження зазначеної дії з використанням біологічних моделей. Загалом результати молекулярного докінгу свідчать, що введення 1,2,3-триазолового фрагмента в позицію 4 1,4-дигідропіридинового ядра є перспективним синтетичним підходом для розробки нових блокаторів DHP типу.

## ОСОБЛИВОСТІ ФОРМУВАННЯ КОМБІНАТОРНОЇ БІБЛІОТЕКИ СІРКОВМІСНИХ ГЕТЕРОЦИКЛІЧНИХ ГІБРИДІВ НА ОСНОВІ 6-(ХЛОРО( $R^2$ ))МЕТИЛ)-3- $R^1$ -2H-[1,2,4]ТРИАЗИНО[2,3-*c*]ХІНАЗОЛІН-2-ОНІВ

Грицак О.А.

e-mail: 2212dek2015@gmail.com

*Запорізький державний медико-фармацевтичний університет,  
Україна, Запоріжжя*

Гетероциклічні гібриди неодноразово були описані як перспективні біологічно активні речовини з різнобічним впливом на живі організми. Враховуючи зазначене, а також велике різноманіття відомих гетероциклічних систем та підходів до їх поєднання за допомогою «лінкерних» груп названий клас сполук постійно знаходиться у центрі уваги дослідників у галузі створення нових лікарських препаратів.

Серед перспективних для створення молекулярних гібридів можна відзначити [1,2,4]триазино[2,3-*c*]хіназолінову гетероциклічну систему, похідні яких були неодноразово описані як сполуки з високою біологічною активністю. Більш того описані гетероциклічні гібриди, що містять [1,2,4]триазино[2,3-*c*]хіназоліновий та піразоліновий фрагменти, що поєднані тіоацетамідним «лінкером» та проявляють виражену антимікробну дію.

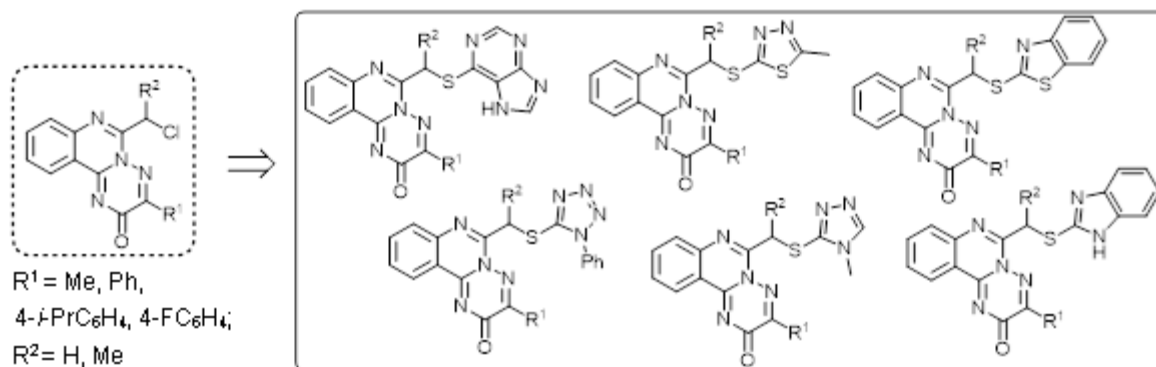


Схема 1. Концепція формування комбінаторної бібліотеки

Враховуючи зазначене нами був проведений дизайн та синтез комбінаторної бібліотеки ряду гетероциклічних гібридів в структурі яких [1,2,4]триазино[2,3-*c*]хіназоліновий цикл поєднано з рядом азатетрациклічних фрагментів через тіометиленову групу (Схема 1). Названі речовини були одержані взаємодією 6-(хлоро( $R^2$ ))метил)-3- $R^1$ -2H-[1,2,4]триазино[2,3-*c*]хіназолін-2-онів з тіолвмісними азатетрациклами.

Одержані речовини планується дослідити на наявність протимікробної та протигрибкової активності.



## ПЕРСПЕКТИВИ ТА ПРОБЛЕМИ СИНТЕТИЧНОГО ЛЕГУВАННЯ ДІАМАНДОЇДІВ ЧЕРЕЗ СКЕЛЕТНЕ РЕДАГУВАННЯ

Гурська Р.М

e-mail: edunuchka@gmail.com

НТУУ «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»,  
Україна, Київ

Діамандоїди сьогодні дуже цікавий та прогресивний напрямок органічної хімії. Діамандоїди – це вуглеводні, в яких атом Карбону утворює просторову тетраедричну решітку як в алмазі. Вони є природними клітинними вуглеводнями і нагадують наноалмазні частинки з водневими кільцями, які є ключовими компонентами сучасних вуглецевих наук. [1]

Ці алмазно-кристалічні клітини злиті між собою і закінчуються воднем. Адамантан є найменшим членом, який складається з однієї алмазної клітини, тетрамантан – вищий діамантоїд, який складається з чотирьох клітин. Ці сполуки викликають великий інтерес через їх потенціал у поєднанні властивостей діаманту та наноматеріалів. Поєднання міцності, твердості, напівпровідності, емісії електронного поля та унікальних оптичних властивостей робить діамантоїдні матеріали особливо перспективними для виявлення незвичайних властивостей на межі хімії та фізики та для проєктування нових матеріалів. [2]

Від початку відкриття цих сполук по сьогодні постає проблема вибіркової функціоналізації діамантоїдів. Особливо багатообіцяючим науковим шляхом є можливість вибіркової заміни діамантоїдних зв'язків С-Н великою різноманітністю замісників. Більше того, можливим є заміна метиленової групи С-Н гетероатомними функціональними групами S, O, NH тощо. Це є раціональним синтетичним підходом до легування діамантових матеріалів. Досліджується спосіб введення електроннодонорних легуючих добавок у структури адамантану, діамантану та тріамантану через послідовність реакцій відкриття та закриття клітини. Це формальне редагування скелета шляхом перетворення метилену на гетероатомний фрагмент дозволяє створювати спеціально леговані діамантові матеріали з передбачуваними властивостями. [3]

Легований алмаз демонструє унікальні властивості, як зміщення флуоресценції та глибоке забарвлення. Хоча було розроблено декілька шляхів синтезу гетеродіамантоїдів, існуючі методи, за деякими виключеннями не можуть бути поширені на отримання вищих гетеродіамантоїдів. Хоча тіадамантан було давно ідентифіковано та виділено із сирової нафти, тіадамантан та тіатриамантан були відкриті лише протягом останнього десятиліття, але жодних структурних доказів або механізму не було надано. Хоча присутність електронегативних атомів дезактивує адамантанові клітини до функціоналізації С-Н, цей ефект

значною мірою послаблюється у вищих діамандоїдах. Хоча хімія діамандоїдів в основному пов'язана з карбокатионними або радикальними перетвореннями, наявність електронегативних атомів робить гетеродіамандоїди придатними для карбаніонних реакцій. [4]

Зараз досліджується потенціал застосування цього класу молекул в медицині та хімії наноматеріалів. Вони застосовуються у різних пристроях електроніки, електронно-променевих пристроях, польових транзисторах і оптичних комп'ютерах. Додавання нанодіамандоїдів до полімерів, гум, пластичних мас збільшує міцність і термін зношення. В медицині використовуються для виготовлення медичних інструментів та медичних нанороботів. [5]

#### Література:

1. Т.І. Хорошилова. Нанохімія / Т.І. Хорошилова, В.О. Хромишев. – Мелітополь: Мелітопольський державний педагогічний університет імені Богдана Хмельницького, 2014. – 206 с.
2. W. L. Yang. Monochromatic Electron Photoemission from Diamondoid Monolayers / W. L. Yang, J. D. Fabbri, T. M. Willey. // SCIENCE. – 2007. – С. 1460–1462.
3. Andrey A. Fokin. Synthetic Doping of Diamondoids through Skeletal Editing / Andrey A. Fokin, Olga K. Reshetylova, Vladyslav V. Bakhonsky. // Organic Letters. – 2022. – С. 4845–4849.
4. Andrey A. Fokina. Band gap tuning in nanodiamonds: first principle computational studies [Електронний ресурс] / Andrey A. Fokina, Peter R. Schreiner // Molecular Physics. – 2009. – Режим доступу до ресурсу: <http://dx.doi.org/10.1080/00268970802649625>.
5. Микола Головенко. Наномедицина: досягнення та перспективи розвитку новітніх технологій в діагностиці та лікуванні [Електронний ресурс] / Микола Головенко. – 2016. – Режим доступу до ресурсу: <https://labprice.ua/statti/nanomeditsina-dosyagnennya-ta-perspektivi-rozvitku-novitnih-tehnologiy-v-diagnostitsi-ta-likuvanni/>.

**АЦЕТАЛІЗАЦІЯ ГЛІЦЕРИНУ ЦИКЛОГЕКСАНОМ У  
ПРИСУТНОСТІ КИСЛОТНО-МОДИФІКОВАНИХ  
ПРИРОДНИХ АЛЮМОСИЛІКАТІВ**

Давтян А.С.

e-mail: araksya2103@gmail.com

*Фізико-хімічний інститут ім. О.В. Богатського НАН України,  
Україна, Одеса*

Зіставлені каталітичні властивості модифікованих аренсульфоною (AS) та нітратною (Н) кислотами зразків бентоніту (AS-Bent, Н-Bent), кліноптилоліту (AS-CLI, Н-CLI) та трепелу (AS-Tr, Н-Tr) в реакції гліцерину (GL) з циклогексаноном (CHone).

Основним продуктом, з селективністю 99%, є п'ятичленний циклічний кеталь (1,4-діоксаспіро[4,5]декан-2-метанол). Виявлено, що у присутності AS-CLI, незалежно від концентрації каталізатору ( $M_{kt}$ ) початкова швидкість убутку GL ( $W^0$ ) не змінюється, тоді як конверсія GL ( $Z_{GL}$ ) зростає і досягає 60%. Натомість у присутності AS-Tr та AS-Bent  $W^0$  зростає із збільшенням  $M_{kt}$ , при цьому  $Z_{GL}$  не змінюється для обох каталізаторів. Зразок на основі трепелу проявляє більшу активність ніж бентоніт та кліноптилоліт. AS-Bent вже на другому циклі роботи втрачає активність, а AS-Tr – на третьому.

Реакція задовільно описується моделлю Міхаеліса-Ментен, константи Міхаеліса та максимальні швидкості, для трьох каталізаторів практично схожі. Виявлено, що концентраційний порядок реакції ( $n$ ) по GL у присутності AS-Bent та AS-Tr дорівнює трьом, а у присутності AS-CLI  $n = 2$ . В залежності від цього, для досліджених каталізаторів по різному реалізується механізм реакції. За каталітичною активністю каталізатори можна розмістити у наступний ряд: AS-Tr > AS-Bent > AS-CLI.

Виявлено, що серед Н-зразків, на відміну від модифікованих аренсульфоною кислотою, більшу активність проявляє бентоніт, тоді як трепел більш активний серед AS-зразків. Н-Bent практично не втрачає активність протягом 5 циклів роботи, натомість Н-Tr та Н-CLI втрачають активність на другому циклі. Н-Bent виявився більш стійким до втрати каталітичної активності в порівнянні з AS-Bent, оскільки останній на другому циклі неактивний.

Кінетика реакції у присутності Н-зразків також задовільно описується моделлю Міхаеліса-Ментен. Для Н-Bent  $n = 1,5$ , для Н-CLI  $n = 2$  та Н-Tr  $n = 2,5$ . Величини константи Міхаеліса та максимальні швидкості реакції у присутності Н-Bent вищі, навіть не дивлячись на те, що реакцію проводили при 40°C, тоді як у присутності Н-CLI та Н-Tr при 60°C. За каталітичною активністю досліджені каталізатори можна розмістити у ряд: Н-Bent > Н-CLI  $\geq$  Н-Tr.

## ЕФЕКТИВНИЙ СПОСІБ УТВОРЕННЯ 2-СТИРИЛПІРИМІДИН-4(3H)-ОНІВ

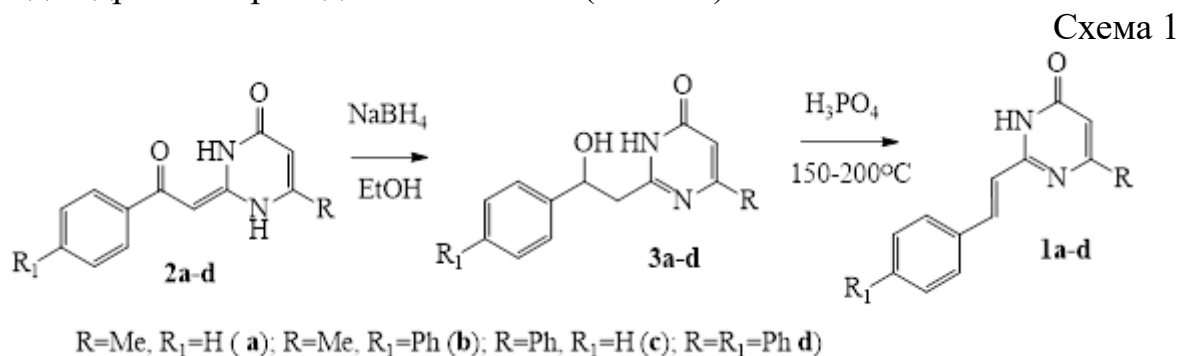
Давтян А.С.

e-mail: araksya2103@gmail.com

Фізико-хімічний інститут ім. О.В. Богатського Національної академії наук,  
Україна, Одеса

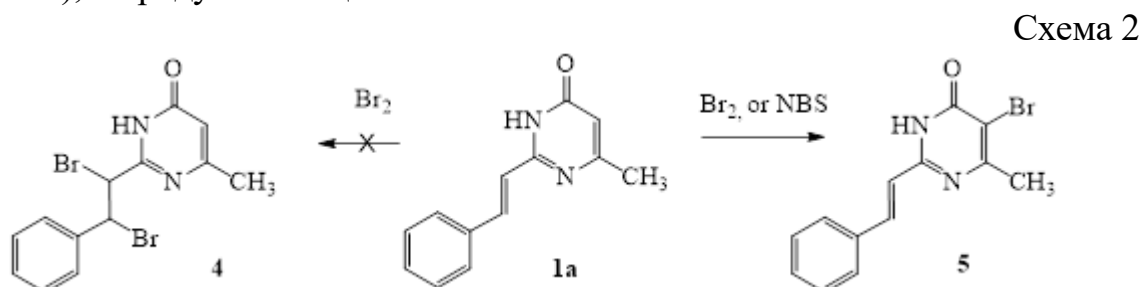
Гетероциклічні аналоги стильбенів становлять структурну основу ряду флуоресцентних матеріалів з вираженими фотофізичними і електронооптичними властивостями.

Представлена робота присвячена розробці препаративного методу синтезу 2-стирилпіримідин-4(3H)онів **1a-d** шляхом послідовного відновлення та дегідратації доступних похідних 2-(2-оксо-2-арилетиліден)-2,3-дигідро-1H-піримідин-4-онів **2a-d** (схема 1).



Запропоновані методики синтезу і виділення дозволили отримати цільові продукти з високими виходами та достатнім ступенем чистоти без додаткового очищення проміжних спиртів **3a-d** та з мінімальним використанням органічних розчинників. По даним ЯМР <sup>1</sup>H сполуки **1a-d** мають форму транс ізомерів.

Встановлено також, що при взаємодії (*E*)-6-метил-2-стирилпіримідин-4(3H)-ону **1a** з еквімолярною кількістю бромиду, утворюється не очікуваний продукт приєднання по подвійному зв'язку **4** (схема 2), а продукт заміщення **5**.



Подібний перебіг реакції можна пояснити утворенням на першій стадії реакції активного інтермедіату, а саме N-бромпіримідин-4-ону. Опосередковано, на користь цього припущення свідчить факт утворення сполуки **5** при бромованні **1a** N-бромсукцинімідом.

## СИНТЕЗ ГАЛОГЕНОМЕТИЛФУНКЦІОНАЛІЗОВАНИХ ІМІДАЗОБЕНЗАЗЕПІНІВ

Данилюк І.Ю.,<sup>1</sup> Корякіна К.В.,<sup>2</sup> Толмачова В.С.,<sup>2</sup> Ковтун О.М.,<sup>2</sup> Вовк М.В.<sup>1</sup>  
e-mail: ivannayu@ukr.net

<sup>1</sup>Інститут органічної хімії НАН України,  
Україна, Київ

<sup>2</sup>Український державний університет імені Михайла Драгоманова,  
Україна, Київ

Потужним медико-біологічним потенціалом відзначаються структури, у яких бензазепіновий каркас анельований з імідазольним ядром. Зокрема, в ряду похідних імідазобензазепінів знайдені речовини, які виявляють антибактеріальну та антигіпертензивну активність а також є ефективними антагоністами гістамінових та серотонінових рецепторів. Більше того, представники цієї групи сполук виявляють флуоресцентні властивості, а також показали ефективність при лікуванні захворювань, пов'язаних з мутацією ізоцитратдегідрогеназ.

Серед методів синтезу імідазобензазепінових структур найпоширенішими є різноманітні внутрішньомолекулярні циклізації функціоналізованих похідних бензазепінів, які часто вимагають використання важкодоступних реагентів, не завжди відрізняються високою селективністю та виходами, а також у багатьох випадках характеризуються відсутністю функціональних груп у цільових продуктах. Саме тому розроблення нових методів одержання імідазобензазепінових скафолдів із інкорпорованими в їх структуру функціональними фрагментами, в тому числі і фармакофорними, є актуальною синтетичною проблемою.

Нами запропоновано два підходи до синтезу галогенометилфункціоналізованих імідазобензазепінів. Перший передбачає внутрішньомолекулярну галогенциклізацію *N*-аліламінів **1** під дією *N*-йодо(бромо)сукциніміду в ацетонітрилі із отриманням нових бромо(йодо)метил імідазобензазепінів **2**. Другий підхід базується на хемоселективній фоторедокс-каталізованій фтороалкілюючій циклізації сполук **1** в присутності флуоресцеїну як органокаталізатора, з утворенням імідазобензазепінів з різноманітними фторованими фрагментами **3** (Схема).

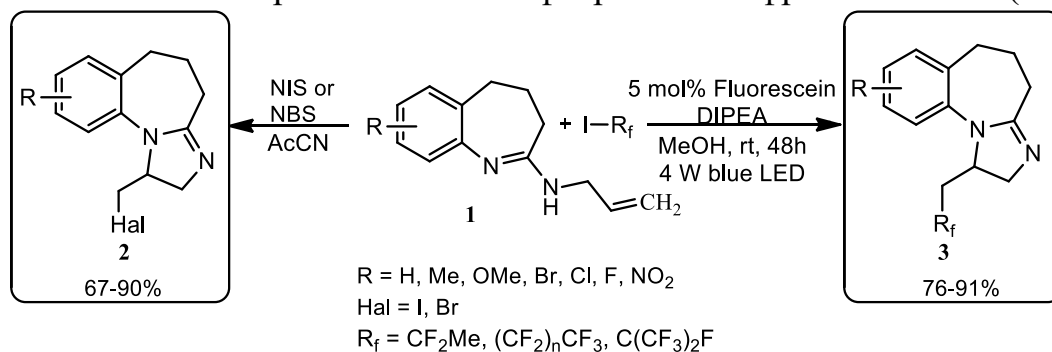


Схема. Підходи до конструювання імідазобензазепінів

## АНТИГРИБКОВА ДІЯ КОМПЛЕКСІВ ПЕРЕХІДНИХ МЕТАЛІВ НА ПОЛІСТИРОЛ

Дімова І.І., Шевченко О.В.

e-mail: ovchev@ukr.net

Одеський національний університет імені І. І. Мечникова,  
Україна, Одеса

Полістирол (PS) застосовують у медицині для виробництва імплантатів, одноразових виробів (рукавички, флакони), фармацевтичних контейнерів, лабораторного посуду (чашки Петрі, лотки для стерилізації та піпетки). Застосування потребує його попередньої стерилізації, яку здійснюють шляхом гама-опромінення або із використанням газоподібного етиленоксиду,



що є достатньо енерговитратним та трудомістким процесом.

В даній роботі пропонується альтернативний спосіб отримання PS, що має антигрибкові властивості по відношенню до дріжджеподібного грибка *Candida albicans*. Роль фунгіцидних агентів відіграють металокомплексні сполуки, які останнім часом широко застосовують у медицині для протидії патогенним

бактеріям та грибкам [1]. Синтез металовмісного PS здійснюють у два етапи. На першому – вводять  $\beta$ -дикетоні групи, шляхом кополімеризації стиролу з невеликою кількістю 5-метил-5-гексен-2,4-діону компенсаційним способом [2]. На другому етапі проводять реакцію комплексоутворення, додаючи до розчину полімеру солі перехідних металів. PS у вигляді полімерних плівок, що мають однаковий вміст металів (близько 1%) дослідили на наявність антимікробної дії по відношенню до грибка *Candida albicans*. За контрольний зразок була взята чиста скляна пластина; також оцінювали вплив вихідної полімерної матриці (ПМ), що не містить металофрагментів.

Дослідження виявили (див. рис.), значну антимікробну дію PS при включенні  $\beta$ -дикетону до його складу (зразок ПМ). Хелатування перехідними металами приводить до підсилення фунгіцидної дії, яка змінюється в ряду:  $Zn \geq Co > Ag > Mn > Cu > ПМ$ .

### Література:

1. F.M. Nareetsile, J.T. Matshwele and S. Odisitse, *J. Med. Chem. Sci.* 5, No 6. 1109-1131 (2022), <https://doi.org/10.26655/JMCHEMSCI.2022.6.24>

2. O.V. Shevchenko, K.V. Burenkova and N.F. Fedko, *Voprosy Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii*, No 3, 116-125 (2023), <https://doi.org/10.32434/0321-4095-2023-148-3-116-125>



## ВЗАЄМОДІЯ N-(ТРЕТ-БУТИЛСУЛЬФІНІЛ)ПОЛІФТОРОАЛКІЛІМІНІВ З ДІАЗОМЕТАНОМ

Захарко Р.М., Безгубенко Л.В., Рассукана Ю.В.

e-mail: zakharkoroman98@gmail.com

Інститут органічної хімії НАН України,  
Україна, Київ

Взаємодія імінів з діазометаном є синтетично зручним підходом до біологічно важливих гетероциклічних сполук, таких як триазоліни та азиридины, в тому числі їх поліфторалкільних аналогів [1,2]. Встановлено, що взаємодія N-(трет-бутилсульфініл)іміну фторалю **1a** відбувається за схемою [3+2]-циклоприєднання, однак, формально супроводжується метилюванням стереоцентру з утворенням триазоліну **2a**. Структура триазоліну **2a** була доведена РСА, який показує, що при використанні іміну **1a** з *S*-конфігурацією атома сірки новоутворений стереоцентр має *R*-конфігурацію. Детальне дослідження перетворення показало, що на першому етапі поліфтороалкіліміни (*S*)-**1** реагують з діазометаном з утворенням продуктів [3+2] – циклоприєднання – триазолінів **3**, які є термічно нестійкими і поступово, елімінуючи молекулу азоту, перетворюються у відповідні кетіміни (*S*)-**4**. Наступна взаємодія кетімінів (*S*)-**4** з діазометаном відбувається стереоселективно з утворенням оптично чистих триазолінів (*R,S\_s*)-**2**. При дії каталітичної кількості трифторооцтової кислоти триазоліни (*R,S\_s*)-**2** були перетворені у відповідні оптично чисті азиридины (*R,S\_s*)-**5** (Рис. 1).

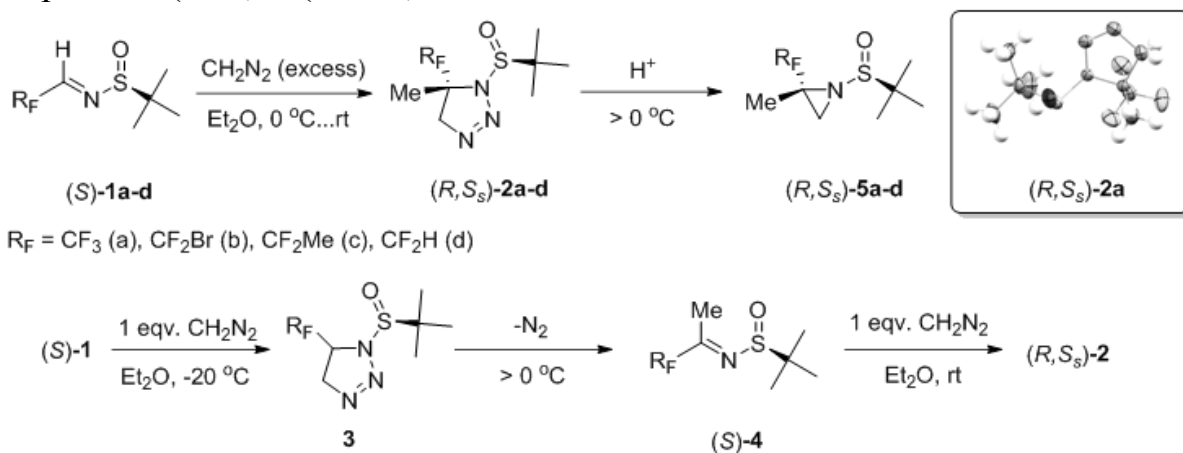


Рисунок 1

Література:

1. Rassukana Y.V., Bezgubenko, Onys'ko P.P., Synytsya A.D. // Journal of Fluorine Chemistry. – 2013. – Vol. 148. – P. 14-18.

2. Rassukana Yu.V., Bezgubenko L.V., Stanko O.V., Rusanov Ed.B., Kulik I.B., Onys'ko P.P. // Tetrahedron: Assymetry. – 2017. – Vol. 55. – P. 555-560.

## СИНТЕЗ ПІРАЗОЛОВМІСНИХ ПОХІДНИХ 1,4-НАФТОХІНОНУ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ЇХ БІОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ

Карпюк І.І., Марінцова Н.Г., Журахівська Л.Р., Поліш Н.В.

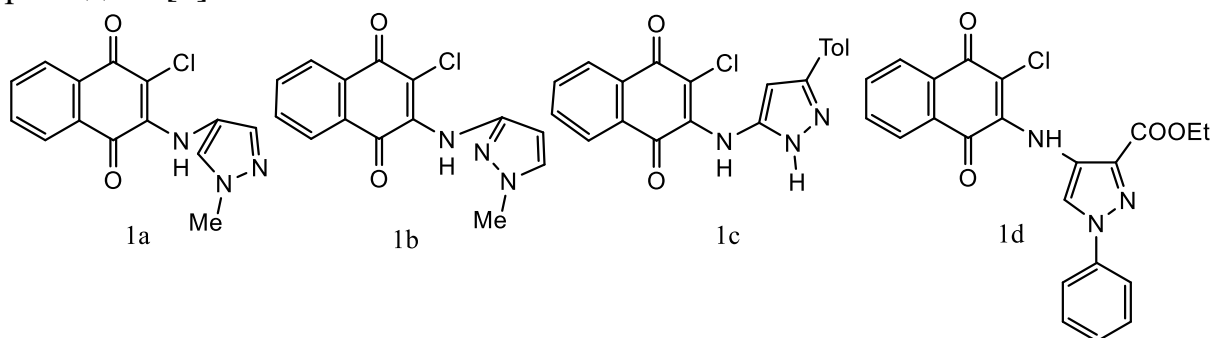
e-mail: ihor.i.karpiuk@lprnu.ua

Національний університет «Львівська політехніка»,  
Україна, Львів

Сполуки піразолу є основою багатьох лікарських препаратів, зокрема, нестероїдних протизапальних засобів, таких як, Бутадіон, Лозанолак та Целекоксиб, які є високоефективними інгібіторами синтезу циклооксигенази – попередника простагландинів [1-5]. Зважаючи на їх протизапальну, антибактеріальну та антивірусну активність піразоли є цінними для боротьби з інфекційними захворюваннями.

Відоме використання похідних піразолу в агрохімії як дієвих фунгіцидів: Флуксопіраксад, Біксафен, Седоксан, Ізопіразам, Боксалід тощо [1,5,6]. Саме тому багатофункціональні піразольні фрагменти є фактично ключовими об'єктами для конструювання нових біологічно активних сполук.

Для отримання нових біологічно активних сполук нами був здійснений синтез відповідних амінопіразолів з 2,3-дихлоро-1,4-нафтохіноном за різних умов, і запропонована препаративно зручна методика їх синтезу. Для синтезованих сполук було проведено первинний біологічний скринінг методом дифузії речовини в агар та методом серійних розведень [2]:



Всі амінопіразольні похідні нафтохінону (1a–d) були протестовані проти бактерій штамів: *Staphylococcus aureus* ATCC 25923, *Staphylococcus aureus* ATCC 29213, *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 27853 та грибів штамів: *Candida krusei*, *Candida glabrata*, *Candida albicans* ATCC 10231, *Candida albicans* SC5314 (Гданський технологічний університет, факультет хімії, кафедра фармацевтичної технології та біохімії).

Найбільш активними сполуками проти *S.tenuis*, ідентифікованими методом серійних розведень, є сполуки 2-хлоро-3-((3-(*n*-толіл)-1H-піразол-5-іл) аміно)нафтален-1,4-діон **1c** (МІК=0,9 мкг/мл, МФК=1,9 мкг/мл) та 2-хлоро-3-((1-метил-1H-піразол-3-іл)аміно)нафтален-1,4-діон **1a** (МІК=7,8 мкг/мл, МФК=15,6 мкг/мл).



Серед синтезованих сполук виявлено сполуки-лідери з високою чутливістю щодо штамів *C.krusei*, *C.albicans ATCC 10231*, а також *C.albinas SC5314* - це 2-хлоро-3-((1-метил-1H-піразол-3-іл)аміно)нафтален-1,4-діон 1a і 2-хлоро-3-((1-метил-1H-піразол-4-іл)аміно)нафтален-1,4-діон 1b.

Результати первинних експериментальних мікробіологічних досліджень свідчать про вибірккову бактеріо- і фунгістатичну активності піразоловмісних похідних 1,4-нафтохінону.

#### Література:

1. Polish N., Marintsova N., Konechna R., Krychkovska A., Zayarnyuk N., Novikov V. (2020). Pyrazole-based drugs in correcting medical and biological problems of human health., 7-23.
2. Saxena, P., Sharma, P. K., & Purohit, P. (2020). A journey of celecoxib from pain to cancer. Prostaglandins & other lipid mediators, 147, 106379. doi:10.1016/j.prostaglandins.2019.106379.
3. Zhang, A., Yue, Y., Yang, J., Shi, J., Tao, K., Jin, H., & Hou, T. (2019). Design, synthesis, and antifungal activities of novel aromatic carboxamides containing a diphenylamine scaffold. Journal of agricultural and food chemistry, 67(17), 5008- 5016. doi:10.1021/acs.jafc.9b00151.
4. Alam, Md Jahangir, et al. (2015). A review on pyrazole chemical entity and biological activity. International Journal of Pharma Sciences and Research, 1433- 1442.
5. Zhou, S., Zou, H., Chen, G., & Huang, G. (2019). Synthesis and Biological Activities of Chemical Drugs for the Treatment of Rheumatoid Arthritis. Topics in Current Chemistry, 377(5). doi:10.1007/s41061-019-0252-5.
6. Hosoya, M., Honda, Y., Ishii, T., Suzuki, H., Mori, S., & Shigeta, S. (1995). Comparative Inhibitory Effects of Ribavirin, Pyrazofurin, and EICAR on Measles (SSPE) Virus Replication In Vitro and In Vivo. Antiviral Research, 26(3), A351- A351.
7. Поліш Н., Марінцова Н., Журахівська Л., Новіков В., Вовк М. Синтез та прогнозування біологічної активності нових гетероциклічних N-похідних нафтохінону // Хімія, технологія речовин та їх застосування // Національний університет «Львівська політехніка». 2019. – Vol.2, №1. с. 69-75.

## СПРЯМОВАНИЙ ПОШУК ПРОТИПУХЛИННИХ АГЕНТІВ СЕРЕД ЗАМІЩЕНИХ ПОХІДНИХ ПТЕРИДИНУ

Кирилова Д. В.

e-mail: darinakir.dk@gmail.com

Дніпровський національний університет ім. О. Гончара,  
Україна, Дніпро

Ефективна терапія пухлинних захворювань залишається невирішеною проблемою сучасної медицини, фармації та медичної хімії. Значні поступи останнього часу у лікуванні онкологічних захворювань перш за все пов'язані з досягненнями в створенні біотехнологічних лікарських препаратів, які показали свою високу ефективність. В той самий час, роботи по розробці та впровадженню в медичну практику низькомолекулярних речовин не втратили свою актуальність, що пов'язано зі значно більш низькою вартістю препаратів такого типу у порівнянні з біотехнологічними. Серед перспективних об'єктів досліджень по створенню низько-молекулярних протипухлинних засобів можна виділити похідні ряду гетероциклічних систем, фрагменти яких присутні в структурі молекул, задіяних в різноманітних біохімічних процесах.

Так, птеридин та його похідні неодноразово досліджувались в рамках проектів по створенню протипухлинних засобів. Необхідно зазначити, що зважаючи на широкі можливості структурної модифікації похідних птеридину, потенціал цього напрямку не можна вважати вичерпаним. Зокрема, досі маловивченим є ряд 6,7-дизаміщених-2-оксо-(іміно-, тіоксо-)-2,3-дигідроapterидин-4(1H)-онів, які привернули нашу увагу.



Схема. Концепція пошуку заміщених птеридинів з протираковою дією

Слід зазначити, що для названого типу речовин характерний ряд таутомерних процесів, що значною мірою ускладнює проведення прескринінгових досліджень методами молекулярного докінгу, які є важливим інструментом сучасної медичної хімії. Враховуючи зазначене, нами розроблена концептуальна схема (Схема) пошуку протиракових агентів серед даного класу сполук, яка передбачає попереднє дослідження особливостей їх будови та таутомерних перетворень. Зазначені дослідження значно підвищують валідність прескринінгу біологічної активності методами *in silico* та дозволять провести ефективне планування експериментів *in vitro* та *in vivo*.

## СИНТЕЗ 2-ТА 4-ФТОРОЗАМЩЕНИХ НАФТАЛІМІДІВ

Кірієнко А.В., Валентірова Є.Ю, Фучеджи А.Д., Мілінчук К.С.

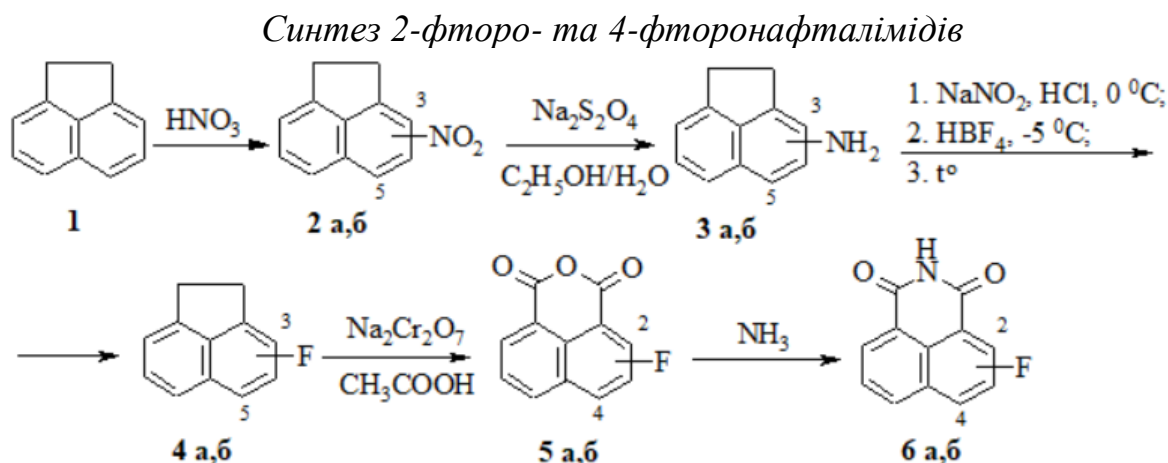
e-mail: fedko@onu.edu.ua

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова,  
Україна, Одеса

Серед галогенонафталімідів - люмінофорів нафталімідного ряду та потенційних біологічно активних речовин, не описаними в літературі залишались фторопохідні нафталіміди.

2-Фторонафталімід (**6a**) та 4-фторонафталімід (**6б**) були нами синтезовані введенням фтору в відповідне положення аценафтену (**1**) за допомогою борофтородіазонієвого методу Шимана, окисленням фтороаценафтену (**4a,б**) та амонілізом відповідного фторонафталевого ангідриду (**5a,б**) (схема 1).

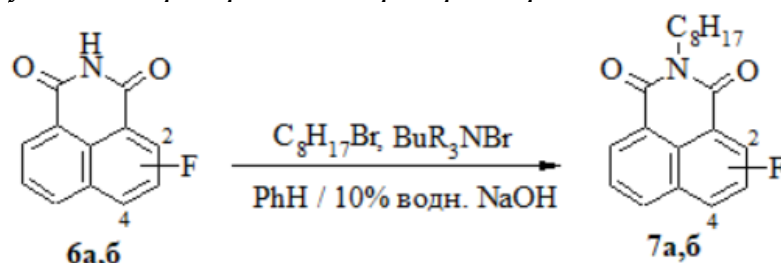
Схема 1



Для перевірки можливості введення фторонафталімідного фрагмента в молекули органічних сполук було проведено міжфазне алкілювання 2-фторо- та 4-фторонафталімідів (**6a,б**) октилбромідом з використанням як каталізатора бутилтриалкіламоній броміду (схема 2).

Схема 2

*Міжфазне алкілювання 2-фторо- та 4-фторонафталімідів октилбромідом*



2-Фторонафталімід (**6a**) та 4-фторонафталімід (**6б**), а також їх N-октилпохідні (**7a,б**) є кристалічними речовинами світло-жовтого кольору, що люмінесціюють в блакитній області спектру.

**QSAR МОДЕЛІ ДЛЯ ПРОГНОЗУВАННЯ ДОКІНГ ФУНКЦІЙ  
ВЗАЄМОДІЇ ФЛАВОНОЇДІВ З МІШЕННЯМИ  
SARS-COV I SARS-COV-2**

Кічьова М.Є., Златов Є.В.

e-mail: KichovaME@nas.gov.ua

*Фізико-хімічний інститут ім. О.В. Богатського НАН України,  
Україна, Одеса*

В грудні 2019 року в Ухані (Китай) почалась одна з самих масштабних пандемій 21 століття, викликана вірусом SARS-CoV2. Це вкрай заразне і небезпечне захворювання викликало вже понад 6.30 мільйонів смертей і змусило світову систему охорони здоров'я працювати на зношення.

Вірус SARS-CoV2 має повітряно-крапельний шлях розповсюдження, що робить можливим зараження через повітряні потоки, рукоштовування, поверхні, і т.д.

Також вірус SARS-CoV2 часто викликає пневмонію, що тягне за собою важке протікання хвороби. Більш ранній вид цього вірусу SARS-CoV викликав спалах атипової пневмонії ще 2003 року, спровокувавши близько 800 смертей.

Сучасна імунопрофілактика погано справляється з попередженням поширення нових штамів коронавірусів у зв'язку з їхньою швидкою мутацією, що робить необхідним посилений пошук нових противірусних препаратів.

Все більшої популярності набирають алгоритми вирішення подібних завдань за допомогою інформаційних технологій, однією з яких є молекулярний докінг. Актуальним напрямком є моделювання взаємодії головної протеази SARS-CoV2 із флавоноїдами, які є ефективними противірусними засобами.

Проте такі розрахунки найчастіше є трудомісткими і вимагають великих обчислювальних витрат. Однак, якщо вже є результати докінгу для певного набору молекул (навчальна вибірка лігандів), їх можна використовувати для побудови відповідних 2D QSAR моделей.

Якщо такі моделі адекватні і мають хорошу прогноуючу здатність, подальший розрахунок оціночних функцій докінгу для нових молекул (віртуальний скринінг) значно спрощується. Фактично він зводиться до простих QSAR розрахунків, без конформаційного аналізу лігандів та варіації їх орієнтацій (пошук оптимальних «поз») щодо мішені.

Метою даної роботи була розробка методології використання методів QSAR для прогнозування значень оціночних функцій молекулярного докінгу похідних флавоноїдів з активними сайтами SARS-CoV-2 та

SARS-CoV, проведення структурної та фізико-хімічної інтерпретацій побудованих QSAR моделей.

Розроблено адекватні 2D PLS QSAR моделі для прогнозування оцінювальних функцій молекулярного докінгу похідних флавоноїдів з активними сайтами мішеней SARS-CoV2 і SARS-CoV. Для молекулярного моделювання досліджуваних сполук використовувався симплексно-інформаційний підхід SIRMS(IF). Проведено фізико-хімічну інтерпретацію побудованих QSAR моделей.

Література:

1. Ognichenko L.N., Kuz'min V.E., Artemenko A.G. New structural descriptors of molecules on the basis of symbiosis of the informational field model and simplex representation of molecular structure. *QSAR & Combinatorial Science.*, 2009. Vol. 28, N 9. P. 939–945.

## ДОСЛІДЖЕННЯ ВМІСТУ ПАРАЦЕТАМОЛУ У РІЧКОВІЙ ВОДІ ТА СОРБЦІ НА ПОВЕРХНІ КАЛІЙ ТИТАНАТУ

Кожухова М.М., Денисюк Р.О., Писаренко С.В., Камінський О.М.

e-mail: mariia.p.m.1999@gmail.com

*Житомирський державний університет імені Івана Франка,  
Україна, Житомир*

Парацетамол є одним із найбільш широко використовуваних безрецептурних фармацевтичних препаратів у всьому світі для полегшення болю та зниження температури. Але водночас він також є одним із фармацевтичних продуктів, які часто виявляють у стічних водах очисних споруд, поверхневих водах і питній воді, тому він став одним із основних забруднювачів водного середовища, що походять від фармацевтичної промисловості та мають антропогенний характер [1]. Присутність цих лікарських засобів у навколишньому середовищі становить загрозу для водних організмів з точки зору мутагенності, а також невідомого впливу на екосистему.

Метою даної роботи було дослідити наявність парацетамолу у річках Житомирщини. Для дослідження були відібрані зразки води із річок Тетерів (м. Житомир), Случ (м. Звягель) та Смолка (м. Звягель). Кількісний вміст парацетамолу у зразках досліджувався за допомогою рідинної хроматографії на приладі Vanquish Core з УФ-детектором методом ВЕРХ.

На всіх отриманих хроматограмах (рис. 1) були відсутні характерні піки із відповідним часом утримання, які порівнювалися до даних еталонного розчину (рис. 2). Одержанні результати підтверджують відсутність вмісту парацетамолу у досліджуваних зразках.

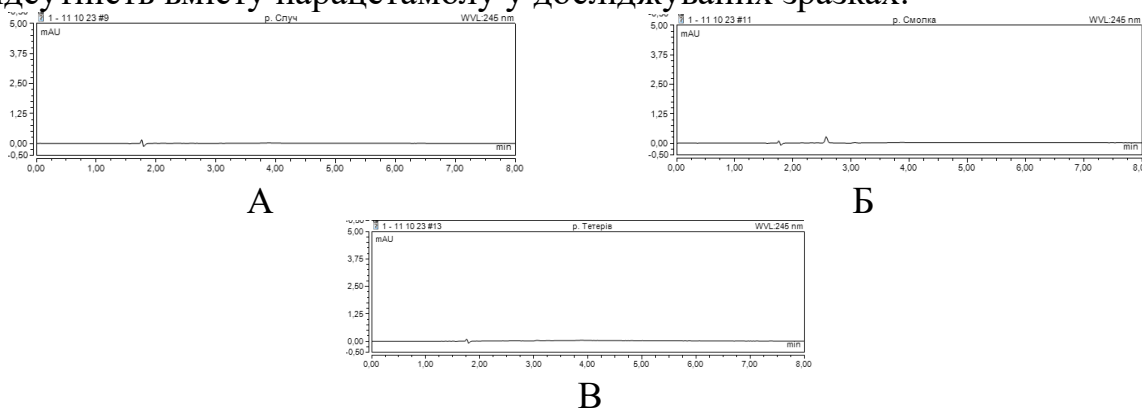


Рис. 1. Хроматограми досліджуваних зразків води (А – р.Случ, Б – р.Смолка, В – р.Тетерів)

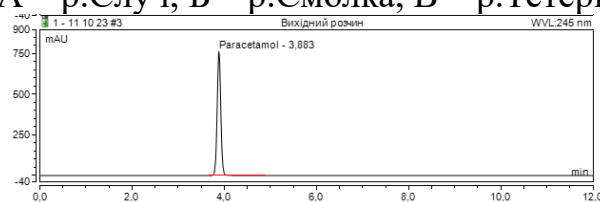


Рис. 2. Хроматограма еталонного розчинну



Також було досліджено кінетику сорбції парацетамолу на поверхні калій титанату, як можливого майбутнього перспективного засобу для використання в якості ефективного сорбенту парацетамолу з водних розчинів.

Для дослідження сорбційних властивостей калій титанату, синтезованого методом лужного плавлення з ільменітового концентрату Іршанського родовища [2], використали 0,1 г сорбенту, з початковою концентрацією парацетамолу 3 г/л, об'єм розчину взятого для дослідження становив 100 мл, вимірювання сорбційної активності синтезованого калій титанату проводили в статичному режимі в залежності від часу контакту з сорбентом. Кількісне визначення проводили за допомогою цериметричного титрування, як титрант використовували 0,1 М розчин церію сульфату.

На основі отриманих даних було побудовано діаграму залежності концентрації парацетамолу в розчині від часу адсорбції (рис. 3).

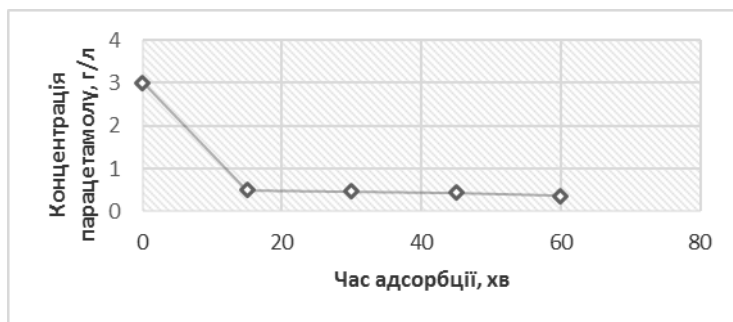


Рис. 3. Діаграма залежності концентрації парацетамолу в розчині від часу адсорбції

Встановлено, що в стічних водах, які мають зв'язок з фармацевтичними підприємствами Житомирської області відсутній парацетамол, що свідчить про якісну очистку стічних вод на підприємствах. З'ясовано, що  $K_2TiO_3$  може слугувати хорошим сорбентом для видалення парацетамолу з водного розчину, що володіє ступенем вилучення до 88% парацетамолу протягом перших 30 хвилин, та може використовуватись в якості альтернативного сорбенту парацетамолу із стічних вод фармацевтичних підприємств.

#### Література:

1. Al-Kaf A. Occurrence of Paracetamol in Aquatic Environments and Transformation by Microorganisms: A Review. *Chronicles of Pharmaceutical Science* – 2017. – Vol. 1, № 6. – P. 341 – 355.
2. Писаренко С.В. Лужне вилуговування титану з ільменіту Іршанського родовища / В.Ю. Черненко, О.Е. Чигиринець, О.М. Камінський, М.О. Мироняк. // Питання хімії та хімічної технології – 2021. – № 6. С. 51–56.

## СИНТЕЗ ПОХІДНИХ 9-АМІНОТРИПТАНТРИНУ – ПОТЕНЦІЙНИХ ІНТЕРКАЛЯТОРІВ ДНК

Колесников В.І.<sup>1</sup>, Карпенко О.С.<sup>2,1</sup>, Ведута В.В.<sup>1</sup>

e-mail: alex\_chem\_2@ukr.net

<sup>1</sup>Одеський національний університет імені І.І. Мечникова,  
Україна, Одеса

<sup>2</sup>Фізико-хімічний інститут імені О.В. Богатського НАН України,  
Україна, Одеса

Здатність речовини до інтеркаляції у ДНК (встраювання плоского (гетеро)ароматичного фрагменту молекули у проміжок між двома сусідніми компліментарними парами основ) – є однією з передумов для очікування в речовини потенційних противірусних та протипухлинних властивостей.

Похідні природного алкалоїду триптантрину (індоло[2,1-b]хіназолін-6,12-діону) цілком відповідні вимогам до інтеркаляторів ДНК та вже продемонстрували низку корисних терапевтичних властивостей: антиоксидантні; протизапальні; протиалергенні; протипухлинні; антибактеріальні; протипаразитарні тощо.

Також нещодавні дослідження [1] показали перспективність використання оксимів триптантрину як ефективних протизапальних засобів в експериментах *in vitro*. Надання молекулі триптантрину водорозчинності за рахунок введення до структури фрагменту аліфатичного аміну має поширити набір скринінгових моделей вивчення таких речовин та підвищити біодоступність препаратів у подальшому.

Нами обраний шлях такої функціоналізації, що включає синтез 9-бромотриптантрину із подальшою його конденсацією з амінокомпонентами, який наведений на схемі:

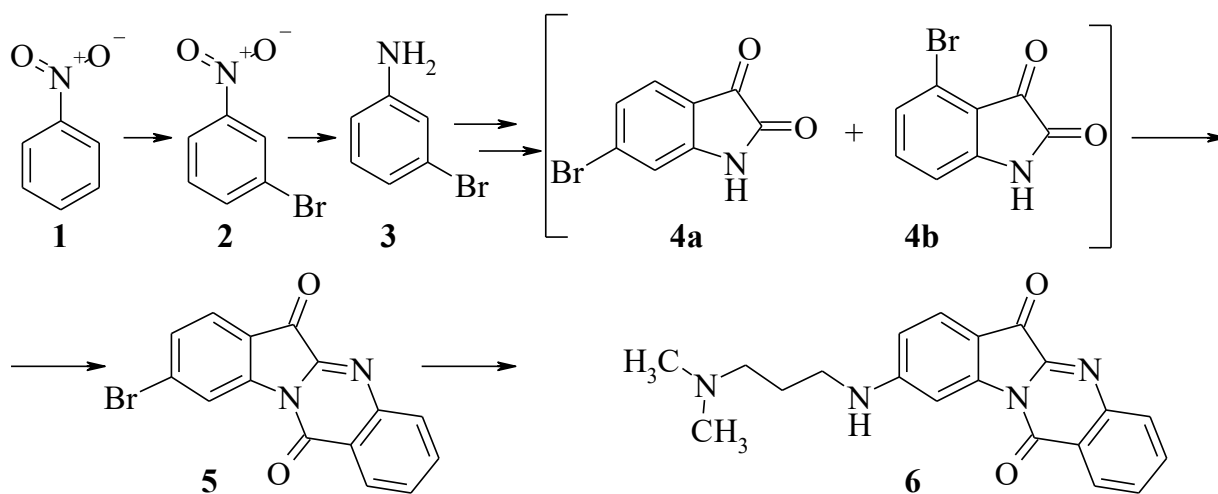


Схема синтезу похідних 9-амінотриптантрину



Варто відмітити, що ізомерна суміш ізатинів **4a+4b**, яка отримується з м-бромоаніліну за методом Зандмайера, може бути ефективно розділена та очищена шляхом переосадження з лужного розчину при підкисленні: 4-бромоізатин утворює кристалічний осад при  $\text{pH} \approx 5$  (підкислення оцтовою кислотою), у той час як 6-бромоізатин кристалізується у сильнокислому середовищі (додавання сірчаної кислоти).

Синтез модельної аміносполуки **6** проходив із виходом нижче за середні та з утворенням помітної кількості побічних речовин. Цільова сполука виділена методом колонкової хроматографії.

За результатами вивчення афінитету до ДНК методом витіснення етидію броміду сполука **6** відноситься до інтеркаляторів помірної сили, що є слушною підставою очікувати від неї та споріднених сполук противірусної активності у подальших дослідженнях.

#### Література:

1. Schepetkin, I.A.; Karpenko, O.S.; Kovrizhina, A.R.; Kirpotina, L.N.; Khlebnikov, A.I.; Chekal, S.I.; Radudik, A.V.; Shybinska, M.O.; Quinn, M.T. Novel Tryptanthrin Derivatives with Selectivity as c-Jun N-Terminal Kinase (JNK) 3 Inhibitors//Molecules. – 2023. – 28. – P. 4806. <https://doi.org/10.3390/molecules28124806>

## ОДЕРЖАННЯ ПЕРОКСИДНИХ АКРИЛАТНИХ МОНОМЕРІВ НА ОСНОВІ 1,3-ДІОКСАНІВ

Кузнецова К.І, Флейчук Р.І, Гевусь О.І

e-mail: Kateryna.I.Kuznetsova@lpnu.ua

Національний університет «Львівська політехніка»,  
Україна, Львів

На даний момент надзвичайно актуальним завданням є одержання нових мономерів для застосування у процесах одержання реакційноздатних олігомерів, макроініціаторів та модифікаторів міжфазної поверхні. Для одержання таких мономерів як вихідні сполуки, на нашу думку, можна використати 1,3-діоксани.

Здійснено спроби синтезу пероксидних акрилатних мономерів на основі 1,3-діоксанів за наступною схемою.

На першій стадії, при взаємодії діоксанів (1а,б) з метакрилоїлхлоридом у присутності цинк хлориду одержано ненасичені хлоропохідні (2а,б). Одержаний розчин хлоропохідного (2а,б) при температурі 0-5°C додавали до розчину трет-бутилгідропероксиду (3а,б) і витримували протягом доби.

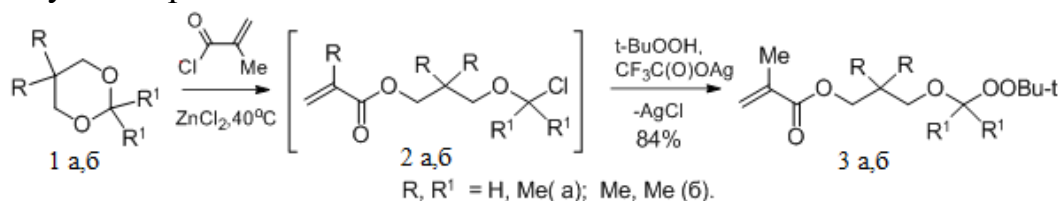


Схема 1. Взаємодія 2,2,5,5-чотирьохзаміщеного 1,3-діоксану з метакрилоїлхлоридом.

Як каталізатор реакції використано аргентум трифлуороацетат або ацетат. У першому випадку вихід пероксидних мономерів 3а,б складав 84-86%. При використанні аргентум ацетату вихід пероксиду зменшувався на 5-8%.

Спроба використати для розкриття діоксанового циклу з метою одержання моноакрилату пентаеритриту акриловоу кислоту до успіху не призвела.

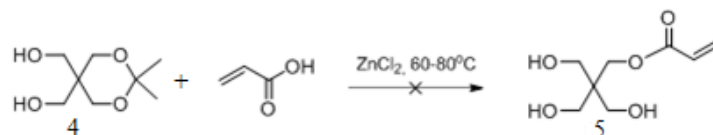


Схема 2. Взаємодія (2,2-диметил-1,3-діоксан-5,5-діол)диметанолу з акриловою кислотою.

Причиною цього, імовірно, є те, що в умовах реакції у присутності цинк хлориду не генерується ацилій-катіон, який на першій стадії процесу бере участь у електрофільній атаці на атом оксигену діоксанового циклу, що призводить до розкриття циклу.

## ЕЛЕКТРОФІЛЬНА ГЕТЕРОЦИКЛІЗАЦІЯ 2-ТІОКСО-N(3)-АЛКЕНІЛЬНИХ ПОХІДНИХ ХІНАЗОЛІНУ

Кут Д.Ж., Кут М.М., Онисько М.Ю.

e-mail: diana.kut@uzhnu.edu.ua

ДВНЗ «Ужгородський національний університет»,  
Україна, Ужгород

Функціоналізовані похідні тіазоло[2,3-*b*]хіназоліну вже давно досліджуються і служать універсальними будівельними блоками в синтетичній медичній хімії. Цей структурний фрагмент відомий своїм широким спектром біологічної активності. Найбільш зручним та керованим методом синтезу гетероциклів з піримідиновим фрагментом є внутрішньомолекулярна електрофільна гетероциклізація. Наша робота спрямована на дослідження регіохімії процесу циклізації 2-тіоксо-N(3)-алкенільних похідних хіназоліну під дією різних за природою електрофільних реагентів.

Вихідними сполуками для нашого дослідження були 2-тіоксо-N(3)-аліл(металіл) хіназолін-4-они. Вихідні тіони мають декілька нуклеофільних центрів для дії електрофільних реагентів — кратний C=C зв'язок алкенільного замісника, екзоциклічні атоми кисню та сульфуру, що сприяє до двох напрямків проходження електрофільної гетероциклізації. Також важливим фактором для вивчення є вплив природи електрофільного реагенту на процес циклізації. В якості електрофільних реагентів використані галогени, кислоти, тетрагалогеніди халькогенідів та *n*-алкоксифенілтелуртрихлориди. Встановлено, що реакції вихідних тіонів з галогенами, халькоген галогенідами та *n*-алкоксифенілтелуртрихлоридами відбувається регіоселективно з утворенням тіазолохіназолінів лінійної будови.



Схема 1. Електрофільна циклізація 2-тіоксо-N(3)-аліл(металіл) хіназолін-4-онів

Таким чином, досліджено регіохімію електрофільної внутрішньомолекулярної гетероциклізації під дією різних за природою електрофільних реагентів. Показано, що природа електрофілу не впливає на регіохімію гетероанелювання тіазольного циклу до остова хіназоліну.

## ФАКТОРИ ВПЛИВУ ЗАМІСНИКІВ БІЛЯ АТОМІВ N і C В ІМІНАХ НА БАР'ЄРИ ІНВЕРСІЇ АТОМА АЗОТУ

Лебідь О.С., Ліб О.С., Куцик-Савченко Н.В. Харченко О.В., Просяник О.В.  
e-mail: lebedlegs@gmail.com

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро*

При розгляді впливу замісників на бар'єри інверсії атома азоту ( $\Delta E_i^{\ddagger}$ ) в імінах завжди основну увагу звертали на невалентні просторові взаємодії між замісниками біля атомів C та N. Встановлено, що експериментальні  $\Delta E_i^{\ddagger}$  атома N зменшуються зі збільшенням об'єму замісників при ньому та при імінному атомі C через більший вплив невалентного відштовхування між замісниками біля атомів N- і C в основному стані (GS), ніж в перехідному (TS), що призводить до відносної дестабілізації GS. Проведені нами розрахунки приводять до дещо інших висновків. Найбільше значення  $\Delta E_i^{\ddagger}$  атомів N дійсно спостерігається для формальдіміну, але не тому, що реалізується мінімальна стерична взаємодія між атомами H груп NH і CH. Скоріш за все зростання бар'єру обумовлене збільшенням s-характеру вільної електронної пари (ВЕП) внаслідок її надсупряження з  $\pi^*$ -розпушуючою орбіталлю групи  $=CH_2$   $nN \rightarrow \pi^*CH_2$ , що призводить до зменшення внеску p-орбіталі в  $sp^2$ -гібридну орбіталь ВЕП атома N формальдіміну. Зростання внеску s-орбіталі у МО ВЕП атома N в свою чергу ускладнює її перетворення в p-орбіталь у TS інверсії атому N і сприяє збільшенню  $\Delta E_i^{\ddagger}$  атомів N. Фактично ми маємо перехід від індукційного механізму впливу на  $\Delta E_i^{\ddagger}$  електронегативності ( $\alpha$ ) атомів замісників згідно правила Бента до механізму надсупряження. Дані розрахунків (DFT (B3LYP/6-31+G(d,p))) імінів  $R_1R_2C=NH$  із замісниками різної природи при атомі C наведено в таблиці 1:

Таблиця 1				$\Delta E_i^{\ddagger}$ , кДж/моль	E взаємодій, кДж/моль		$\Sigma E(nN \rightarrow \sigma^*_{C-R})$
Імін	R	Стан	%s		$nN \rightarrow \sigma^*_{C-R1}$	$nN \rightarrow \sigma^*_{C-R2}$	
1	H	GS	37,72	114,7	45,2	11,3	56,5
2	Me	GS	36,21	117,4	57,0	6,8	63,8
3	NH <sub>2</sub>	GS	37,41	86,9	75,4	10,6	86,0
4	OH	GS	37,36	92,9	90,4	15,2	105,6
5	F	GS	38,18	70,1	107,3	18,5	125,8
6	SiH <sub>3</sub>	GS	36,60	119,9	46,6	0,0	46,6
7	PH <sub>2</sub>	GS	35,79	96,7	63,9	5,1	69,0
8	SH	GS	36,06	81,4	80,4	9,0	89,4
9	Cl	GS	35,85	69,1	100,9	12,7	113,6

Ці дані свідчать про цис-стереоселективність взаємодії ВЕП атома N з  $\sigma^*$  МО зв'язків C-R<sup>1</sup> – енергія взаємодії (E) завжди більша при цис-

орієнтації  $\sigma$ -зв'язків C-R<sup>1</sup> та N-H, що обумовлено досягненням максимального перекривання електронів ВЕП nN з  $\sigma^*$  МО цис-зв'язків C-R<sup>1</sup>, внаслідок їх просторового зближення. Слід зазначити, що E nN  $\rightarrow$   $\sigma^*_{NH}$  приблизно однакова для всіх імінів. s-Характер ВЕП nN зростає як зі збільшенням суми всіх E типу nN  $\rightarrow$   $\sigma^*_{C-R}$   $\Sigma E(nN \rightarrow \sigma^*_{C-R})$  в цілому, так і зі збільшенням  $\alpha$  N- і C-замісників F(3,98) > OH( 3,44) > Cl(3,16) > NH<sub>2</sub>(3,04) > SH(2,58) > CH<sub>3</sub>(2,55) > PH<sub>2</sub>(2,19) > SiH<sub>3</sub>(1,90) та атомах X при атомі C, що узгоджується з відомою їх зміною зі зростанням  $\alpha$  замісників біля атома N F(4,0) > O(3,5) > N(3,0) > C(2,5); Cl(3,0) > S(2,5) > P(2,1) > Si(1,8). Це співпадіння обумовлено відповідним зростанням переносу p-складової від sp<sup>2</sup>-гібридної МО ВЕП nN до  $\sigma^*$  МО зв'язків CR, аналогічно правилу Бента. Величини  $\Delta E_i^{\neq}$  атомів N в цілому зростають зі збільшенням s-характеру ВЕП атома N. При розгляді формальдімінів (DFT (B3LYP/6-311+G(d,p))), в котрих гетероатоми X біля атома N є елементами одного періоду, розрахункові значення  $\Delta E_i^{\neq}$  атома N зростають зі збільшенням s-характеру ВЕП атома N (табл. 2) і відмінно корелюють зі значеннями  $\chi$ -констант замісників біля атома N ( $\Delta E_i^{\neq} = 1+125,4\chi+208,1(r=0,950)$ ) та різницею енергій ВЕП атомів N в E<sup>GS</sup>-E<sup>TS</sup> ( $\Delta E_i^{\neq} = 1+139,1\Delta E-257,49(r=0,962)$ ).

Таблиця 2				$\Delta E_i^{\neq}$ , кДж/моль	Взаємодія, кДж/моль
Імін	R	Стан	%s		nN $\rightarrow$ $\sigma^*_{C-N1,2}$
1	H	GS	39,0	113,9	-57,9
2	Me	GS	30,6	117,9	-68,7
3	NH <sub>2</sub>	GS	33,4	141,8	-57,4
4	OH	GS	42,4	237,6	-38,6
5	F	GS	49,1	311,7	-30,7
6	SiH <sub>3</sub>	GS	28,8	30,9	-77,1
7	PH <sub>2</sub>	GS	32,5	47,3	-66,4
8	SH	GS	40,7	89,6	-49,0
9	Cl	GS	48,6	194,4	-35,5

Порівняння даних табл. 1 і 2 вказує на домінуючий вплив  $\alpha$  замісників при N на зміну значень  $\Delta E_i^{\neq}$  і %s. Необхідно зазначити, що для імінів табл. 2, спостерігаються всі залежності, що і для імінів табл. 1. Значення  $\Delta E_i^{\neq}$  в C-заміснених імінах (табл. 1) показують, що величини  $\Delta E_i^{\neq}$  та %s зростають як зі збільшенням суми E типу nN  $\rightarrow$   $\sigma^*_{C-R}$  ( $\Sigma E(nN \rightarrow \sigma^*_{C-R})$ ) в цілому, так і зі збільшенням  $\alpha$  атомів X замісників при іміногрупі.

Отже, зростання  $\alpha$  замісників при іміногрупі призводить до збільшення s-характеру ВЕП атома N і відповідно до збільшення значень  $\Delta E_i^{\neq}$ . Вірогідно, співпадіння обумовлено однаковою природою зміни s-характеру ВЕП атома N. У випадку C-замісників – відповідним зростанням переносу p-складової від sp<sup>2</sup>-гібридної МО ВЕП атома N до  $\sigma^*$  МО зв'язків C-X, а у випадку N-замісників – згідно правилу Бента до зв'язків NX.

## **КОНФІГУРАЦІЯ ІМІНІВ ТА ПІРАМІДАЛЬНІСТЬ АТОМУ АЗОТУ В ПОХІДНИХ АМОНІАКУ**

Ліб О.С., Лебідь О.С., Куцик-Савченко Н.В. Харченко О.В., Просяник О.В.  
e-mail: alexlib97@ukr.net

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро*

Існує гіпотеза, що нелінійна, а кутова будова сполук  $\text{XN}=\text{C}$  обумовлена гемінальними взаємодіями вільної електронної пари (ВЕП) атому N ( $n\text{N}$ ) з розпушуючими орбіталями зв'язків атома N із замісниками біля нього.  $n\text{N} \rightarrow \sigma_{\text{NX}}^*$  та  $n\text{N} \rightarrow \sigma_{\text{NC}}^*$ , але в даних квантово-хімічних розрахунків амінів та імінів відсутні такі суттєві взаємодії. Аналогічно, пірамідальність атому N в похідних аміаку  $\text{NX}_2\text{YH}_2$  (сума валентних кутів біля атома N обумовлена аналогічними взаємодіями  $n\text{N} \rightarrow \sigma_{\text{NX}}^*$  та  $n\text{N} \rightarrow \sigma_{\text{NH}}^*$ ). Окрім того, з такої точки зору неможливо пояснити зміни валентних кутів атома N в імінах та його пірамідальності в амінах зі змінною (збільшенням) електронегативності замісників XY, навпаки, збільшення електронегативності повинно було б приводити до зменшення енергії ВЕП і відповідного зростання енергетичної щільності між взаємодіючими орбіталями при вказаних вище гемінальних взаємодіях, що повинно було б приводити до зменшення енергій взаємодій і, відповідно, валентних кутів біля атома N і пірамідальності амінів. В дійсності, зростання електронегативності замісників біля атома N викликає зменшення валентних кутів біля атома N і зростання пірамідальності амінів. На нашу думку, в цих випадках реалізується зовсім інший механізм зміни гемінального кута іміна та пірамідальності атому N в амінах. Згідно з правилом Бента [1]—у випадку утворення зв'язку з електронегативним атомом атомна орбіталь, яка надається другим атомом для цього зв'язку, набирає більшого ступеня p-характеру. Правило має широку застосовність при аналізі геометрії органічних сполук. У молекулах валентні кути між зв'язками електронегативних замісників є меншими, оскільки центральний атом, з яким вони сполучені, намагається спрямувати зв'язуючі гібридні орбіталі з більшим p-характером у напрямку більш електронегативних замісників. При цьому, зростає s-характер ВЕП атому N – збільшується її поперечний радіус і вона набуває кулеподібної форми, що викликає збільшення невалентних взаємодій (стеричного та електростатичного відштовхування між ВЕП атому N і заповненими електронами орбіталі  $\sigma$ -зв'язків атому N із замісниками), що і викликає зменшення валентних кутів біля атома N і зростання пірамідальності атому азоту в амінах.

Література:

1. Gillespie R. J. Models of molecular geometry / R. J. Gillespie, E. A. Robinson. // Chem. Soc. Rev. – 2005. – №34. – С. 396–407.



## ЗАСТОСУВАННЯ РЕАКЦІЇ ПААЛЯ-КНОРРА ДЛЯ СИНТЕЗУ 3-(1-R-5-ФЕНІЛ-1-H-ПІРОЛ-2-ІЛ)ПРОПАНОВИХ КИСЛОТ

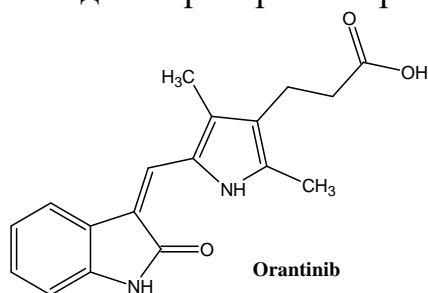
Матійчук В.В., Сітар А.А., Литвин Р.З., Горак Ю.І., Обушак М.Д.

e-mail: viktoriiia.matiichuk@lnu.edu.ua

Львівський національний університет імені Івана Франка,

Україна, Львів

Похідні піролу відносять до важливого сімейства біологічно активних молекул та субстанцій, які використовують у багатьох галузях, включаючи хімію природних сполук, фармацевтичну хімію, агрохімію тощо. Вони входять також до складу різноманітних алкалоїдів. Пірольні фрагменти містяться у багатьох синтетичних терапевтичних та природних сполуках, таких як хлорофіл, гемоглобін, міоглобін, цитохроми, вітамін В12, жовчних пігментах (білірубін, білівердин). Серед похідних піролу знайдено препарати з протираковою активністю (Препарат Orantinib).

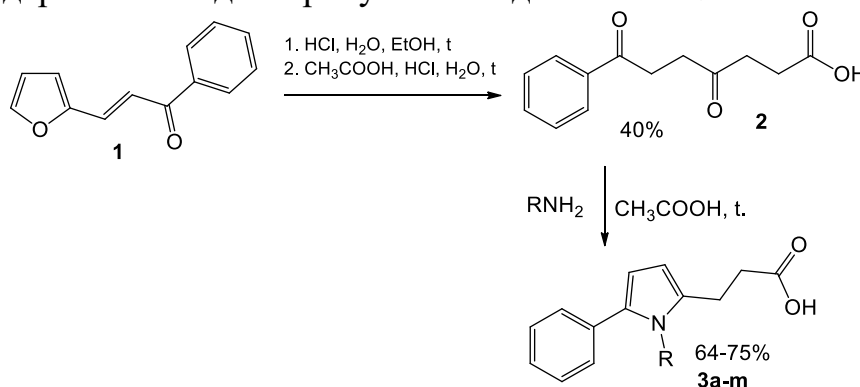


Вихідна сполука для синтезу 3-(1-R-5-феніл-1-H-пірол-2-іл)пропанових кислот – 4,7-діоксо-7-фенілгептанова кислота (фенациллевулінова кислота) **2** одержували за допомогою кислотного розщеплення фуранового циклу сполуки **1**. Реакція відбувається при тривалому (24 год) кип'ятінні фурфуріліденацетофенону **1** в суміші етанол/НСІ/Н<sub>2</sub>О.

Ми запропонували здійснювати синтез Пааля-Кнорра без використання каталізаторів реакцією фенациллевулінової кислоти **2** з ароматичними та аліфатичними амінами при кип'ятінні в крижаній оцтовій кислоті.

В результаті реакції одержано похідні піролу **3** з виходами 64–75%:

**3**: R = H (**a**), Me (**b**), Et (**c**), *iso*-Pr (**d**), Bu (**e**), All (**f**), 2-Furylmethyl (**g**), Cyclopentyl (**h**), 3-Pyridyl (**i**), Ph (**j**), 4-CH<sub>3</sub>Ph (**k**), 4-OCH<sub>3</sub>Ph (**l**), 4-COCH<sub>3</sub>Ph (**m**).



Варто зазначити, що більшість синтезованих сполук мають відносно малу молекулярну масу, що робить їх перспективними скафолдами у створенні комбінаторних бібліотек сполук для скринінгу на біологічну активність.

Робота частково підтримана фондом Simons Foundation (Award No 1037973) та Міністерством освіти і науки України.

## СИНТЕЗ НОВИХ S-( $\omega$ -ФТОРАЛКІЛОВИХ) ЕСТЕРІВ ТІОСУЛЬФОКИСЛОТ ТА ЇХ ПРОТИМІКРОБНА АКТИВНІСТЬ

Милянч А.В.<sup>1</sup>, Паламар О.В.<sup>1</sup>, Конечна Р.Т.<sup>1</sup>, Конечний Ю.Т.<sup>2</sup>,

Кархут А.І.<sup>1</sup>, Лубенець В.І.<sup>1</sup>, Половкович С.В.<sup>1</sup>

e-mail: spolovkovych@ukr.net

<sup>1</sup> Національний університет «Львівська політехніка»,  
Україна, Львів

<sup>2</sup> Львівський національний медичний університет імені Данила Галицького,  
Україна, Львів

Протимікробна активність ефірів тіосульфокислот [1], насамперед етилового естеру 4-амінобензентіосульфокислоти (есулану) добре відома, та широко досліджувалась на кафедрі Технології біологічно активних сполук, фармації та біотехнології, НУ «ЛП». Зокрема, було показано високу активність есулану щодо *Candida tropicalis* [2].

Нами були синтезовані невідомі раніше  $\omega$ -фторалкілові естери 4-амінобензентіосульфокислоти та 4-ацетиламінобензентіосульфокислоти та досліджена їх протимікробна активність щодо ряду штамів бактерій та дріжджових грибів – *Staphylococcus aureus* biofilm-forming Nb2, *Pseudomonas aeruginosa* N197 та *Candida albicans* (ATCC 885-653).

Тіосульфони одержані дією відповідних 1-бром- $\omega$ -фторалканів на натрієві солі 4-аміно- та 4-ацетиламінобензентіосульфокислоти.

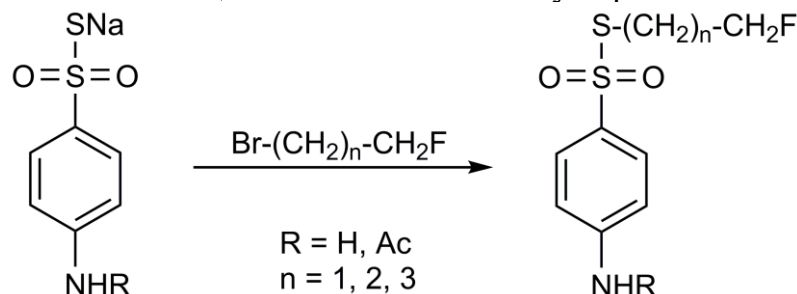


Схема одержання естерів тіосульфокислот

Дослідження протимікробної дії показали вищу активність одержаних сполук щодо *Candida albicans*, проте антибактеріальна активність виявилась незначною відносно сполуки – порівняння (есулану).

Література:

1. V. Lubenets, N. Stadnytska, D. Baranovych et al. Thiosulfonates: The Prospective Substances against Fungal Infections. 2019, IntechOpen. doi: 10.5772/intechopen.84436

2. L. B. Oriabinska, S. O. Starovoitova, S. V. Vasylyuk et al. Ethylthiosulfanilate effect on *Candida tropicalis*. 2017, Ukr. Biochem. J., Vol. 89, N 5. doi: 10.15407/ubj89.05.070



## КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ СИНТЕЗУ ФЕРОЦЕНКАРБОНОВОЇ КИСЛОТИ

Нестеров А. М., Поджарський М. А.

e-mail: chim.anatoliy@gmail.com

*Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара,  
Україна, Дніпро*

Фероцен та його похідні покращують енергетичні характеристики твердого палива. У даній роботі досліджена рівновага у процесі синтезу фероценкарбонкової кислоти з фероцену та вуглекислого газу з використанням програмного забезпечення ChemCAD. Фероценкарбонкова кислота застосовується як немігруючий каталізатор горіння у твердих \ паливах [1].

Процес синтезу починається з приготування розчину бензолу, фероцену і хлориду алюмінію. Розчин перемішують і нагрівають до 40°C. Через розчин барботують вуглекислий газ, реакція протікає при температурі 50°C. Після закінчення реакції розчин охолоджують до 6°C. Потім до охолодженого розчину після синтезу додають холодний 12% водний розчин дихлориду олова для розкладання алюміній хлориду. У результаті отриману неоднорідну суміш відфільтровують від осаду. Розділяють суміш бензол-вода.

Осад після фільтрації розчиняють у 20% водному розчині гідроксиду натрію і відфільтровують від осаду нерозчинного фероцену. Для підкислення лужного розчину до осадження фероценкарбонкової кислоти додають 0,1 М розчин хлоридної кислоти. Осад промивають чистою водою і висушують на повітрі.

Даний процес отримання фероценкарбонкової кислоти відтворений у лабораторних умовах. Встановлено, що з 16 г фероцену з виходом 52% утворюється 10,28 г фероценкарбонкової кислоти.

Рівноважний процес синтезу фероценкарбонкової кислоти змодельований шляхом комп'ютерного моделювання. Процес синтезу залежить від температури та містить газоподібний компонент вуглекислий газ. Програма ChemCAD містить різні види модулів для моделювання хімічних реакцій, що виконують моделювання реакцій на основі різних законів та у різних технологічних режимах.

Для моделювання безперервного процесу синтезу фероценкарбонкової кислоти з використанням даних [2] про константу рівноваги (1) використаний модуль Equilibrium reactor та побудована схема рис. 1.

$$\ln K = 11,4 + \frac{1521}{T} - 0,221 \ln T - 6,34 \cdot 10^{-3} T \quad (1)$$

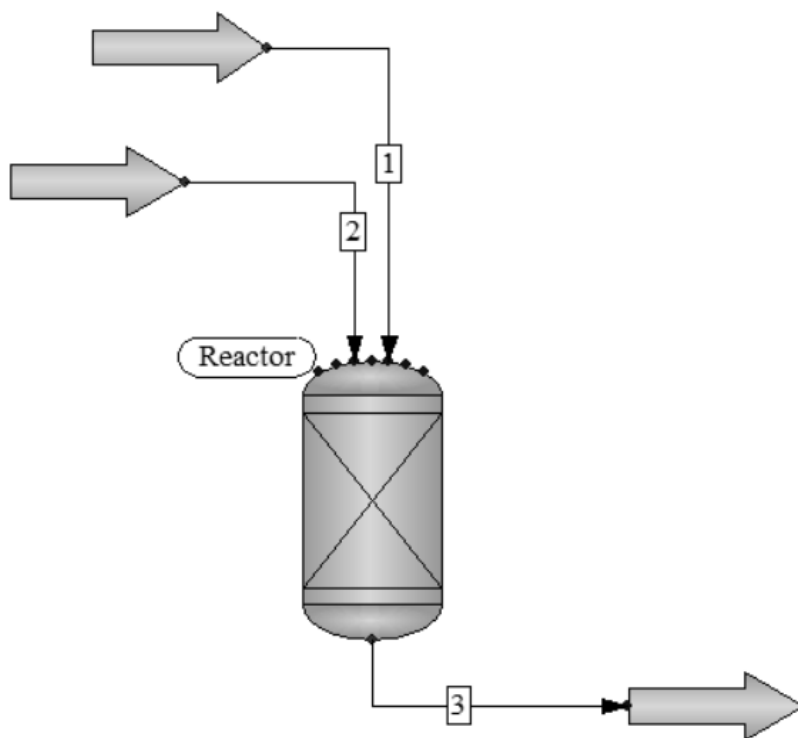


Рисунок 1 – Модель процесу синтезу фероценкарбонової кислоти

Моделювання показало, що за близьких до лабораторних умов, ступінь перетворення фероцену складає 54,2%. Отримане значення співставне з виходом лабораторних досліджень, що дозволяє вважати модель правильною та придатною для подальших досліджень.

Отримана модель дозволяє аналізувати матеріальні та енергетичні витрати, провести дослідження з виявлення вищих ступенів перетворення фероцену, оптимізувати хіміко-технологічний процес виробництва фероценкарбонової кислоти та виявити максимально можливий вихід продукту.

#### Література:

1. Progress on the synthesis and catalytic and anti-migration properties of ferrocene-based burning rate catalysts / W. Zhou et al. Applied organometallic chemistry. 2016. Vol. 30, No. 9. P. 796–805.
2. Grittner G. The preparation and testing of clear coating systems chemically modified with ultraviolet stabilizing ferrocene carboxylic acid : Doctoral dissertation. North Dakota, 1970. 437 p.

## РОЗРОБКА СКЛАДУ ТА ТЕХНОЛОГІЇ М'ЯКИХ ЛІКАРСЬКИХ ФОРМ ПРОТИВІРУСНОЇ ДІЇ

Нирка А.Б., Ніколайчук Н.О., Плугіна Т.В.

e-mail: tfr@nuph.edu.ua

*Національний фармацевтичний університет,  
Україна, Харків*

**Вступ.** Сучасна медицина має у своєму арсеналі різноманітні препарати для профілактики і лікування вірусних інфекцій шкіри і слизових оболонок. Проте, потреба в високо ефективних, доступних вітчизняних лікарських препаратах рослинного походження задовольняється не повністю. У зв'язку з широким поширенням вірусних захворювань, хронічних рецидивів запального характеру різної етіології, розробка нових засобів противірусної дії є актуальною.

Нині для багатьох країн світу, у тому числі і для України, серйозну медико-соціальну проблему представляють і герпесвірусні інфекції.

По даним ВООЗ представники сімейства вірусів простого герпесу людини вражають 60-95% населення, як в розвинених, так – і країнах, що розвиваються. Герпесвірусні захворювання протікають як важкі ускладнення у хворих зі зниженим імунітетом і займають друге місце після грипу.

Відомо, що при лікуванні вірусних інфекцій синтетичними препаратами відбувається послаблення імунної системи організму, а також їх застосування небажане у зв'язку з високою токсичністю. Тому зростає інтерес до лікарських препаратів рослинного походження, які мають ряд переваг перед синтетичними і займають провідне місце в профілактиці і лікуванні різних захворювань, терапевтичний ефект яких обумовлений високою концентрацією біологічно активних речовин.

Досліджуючи літературні джерела, нашу увагу привернула субстанція гіпораміну. Гіпорамін – сухий, очищений екстракт, виділений з листя обліпихи крушиноподібної *Hipporrhae rhamnoides L.*, сімейства *Eleagnaceae*.

Гіпорамін має високу противірусну активність відносно різних штамів вірусів грипу А і В, аденовірусів, параміксовірусів, вірусів простого герпесу. Крім того, гіпорамін має інтерфероніндуціючі властивості, а також є інгібітором росту грампозитивних бактерій, туберкульозних мікобактерій, кандид. Різноманітність клінічних свідчень, при яких доведена ефективність гіпораміна, підкреслює його особливе місце серед інших противірусних засобів.

Нині розроблені сублінгвальні пігулки гіпораміна та ліофілізований порошок. Таким чином, виходячи з клінічної картини герпесвірусних інфекцій розробка м'якої лікарської форми гіпораміна для лікування і

профілактики вірусних інфекцій з урахуванням стадії захворювання є актуальною.

Метою справжнього дослідження є розробка науково-обґрунтованих складів, технології і методів стандартизації гелю гіпораміна для лікування вірусних інфекцій.

**Матеріали та методи.** Об'єктом дослідження є сухий екстракт гіпораміна, виділений з листя обліпихи крушиновидної зі вмістом танинів не менше 60% в перерахунку на казуаринін. Показники якості діючих і допоміжних речовин, використані в ході дослідження; фармакопейні методи визначення реологічних параметрів та методи контролю якості вихідної сировини, та готових лікарських засобів.

**Результати дослідження.** Отримання високоефективних м'яких лікарських форм гіпораміна для лікування герметичних інфекцій представляє практичний інтерес. При виборі основи для гелю керувалися основними положеннями біофармації згідно з якими препарат вимагає індивідуального підбору допоміжних речовин з урахуванням фізико-хімічних і фармакологічних властивостей гіпораміна.

На підставі порівняльного вивчення кінетики вивільнення гіпораміна з основ різної природи - гідрофільної (карбопол, метилцелюлоза М-16) і гідрофобної (вазелін, ланолін) був вибраний рідкозшитий акриловий полімеру карбопол, який забезпечує якнайповніше вивільнення лікарської речовини, має осмотичні властивості, сприяє поглинанню ексудату.

При нанесенні на шкіру утворює щонайтонші гладкі плівки, забезпечуючи пролонгований ефект препаратів, добре розподіляється по слизовим оболонкам шкірних поверхнях, проявляє охолоджувальний ефект. Для обґрунтування складів і технології основи гелю були проведені дослідження по вивченню чинників, що впливають на структуроутворення гелів. Для характеристики структурно - механічних властивостей гідро-основ гелів м'яких лікарських форм були вибрані наступні показники: ефективна в'язкість і напруга зрушення.

Вибір розчинника був здійснений в процесі вивчення набрякання карбополу в різних розчинниках: вода, вода-поліетиленгліколь-400 (ПЕГ), пропіленгліколь(ПГ).

**Висновки.** Отримані результати показали, що зміна властивостей розчинника при переході від сильно полярного (вода) до менш полярному (ПГ) призводить до погіршення процесів структуроутворення.

## ОБГРУНТУВАННЯ СКЛАДУ ТА РОЗРОБКА ТЕХНОЛОГІЇ ВИРОБНИЦТВА ПРОТИВІРУСНОГО ПРЕПАРАТУ З УПОВІЛЬНЕНИМ ВИВІЛЬНЕННЯМ

Олянецька А.С., Крищик О.В.

e-mail: ohanakp15@gmail.com

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро*

Віруси герпесу широко поширені у природі. В даний час їх відомо понад десяток, вісім виділено від людини. Герпесвіруси здатні довічно персистувати в організмі господаря та викликати захворювання з різноманітними клінічними проявами. Найбільший внесок у інфекційну патологію роблять ВПГ 1-го і 2-го типів, якими інфіковано, за різними оцінками, 65-90 % населення планети. Маючи виражений нейродермотропізм, ці віруси часто вражають ЦНС. Летальність при менінгоенцефалітах герпетичної етіології сягає 50-80%.

Ацикловір (АСV) – перший з нуклеозидних аналогів другого покоління, високоселективного інгібітору альфа-герпесвірусів був відкритий на початку 1970-х років. АСV вперше був схвалений для використання як противірусний засіб у 1982 році та все ще перебуває в антивірусному озброєнні [1].

Препарати ацикловіру включені до національного переліку основних лікарських засобів і виробів медичного призначення України [2]. Станом на теперішній час в Україні зареєстровано 44 генерики ацикловіру.

Ацикловір для перорального застосування виробляють у формі капсул, таблеток та суспензій. При пероральному введенні ацикловіру відбувається його повільне та нерівномірне всмоктування, біологічна доступність становить лише 15-30%. Потреба швидко абсорбованих противірусних лікарських засобів для перорального введення є нагальною необхідністю при лікуванні вірусних захворювань.

Метою даного дослідження є розробка лікарської форми ацикловіру та технології її виробництва. Пропонована лікарська форма являє собою внутрішньошлункову флотаційну систему із гастроретентивним ефектом і дозволяє використовувати нижчу дозу та менш часте введення, що сприяє більшій ефективності терапії,

Форма препарату обрана таблетована плаваюча, яку готують методом прямого пресування. Вміст діючої речовини – ацикловіру – 400 мг. У якості допоміжних речовин флотаційні таблетки ацикловіру містять: гідроксипропілметилцелюлозу-К4М, полівінілпіролідон, натрію бікарбонат, кислоту лимонну, магнію стеарат.

Отримані флотаційні таблетки мають такі переваги: при контакті плаваючих таблеток з кислим вмістом шлунку утворюється вуглекислий газ, який утримується всередині гідрофільної матриці, що робить таблетки

плавучими. Отримані таблетки демонструють короткий час затримки плавучості, пролонгований загальний час плавання та, як наслідок, хороший потенціал для тривалої доставки ацикловіру при лікуванні вірусних інфекцій, що значно збільшує пероральну біодоступність ацикловіру.

Розроблено технологію виробництва флотаційних таблеток ацикловіру шляхом прямого пресування, що дозволило значно скоротити час технологічного циклу за рахунок скасування ряду технологічних стадій, скоротити кількість обладнання, знизити енерго- і трудовитрати.

Література:

1. De Clercq, E. Approved antiviral drugs over the past 50 years / De Clercq, E.; Li, G. // Clin. Microbiol. Rev. – 2016. - Vol. 29, № 3. – P. 695–747.

2. Національний Перелік основних лікарських засобів і виробів медичного призначення (Електрон. ресурс) / Спосіб доступу: URL: [www.kmu.gov.ua/npas/207854622](http://www.kmu.gov.ua/npas/207854622).

## ГАЛОГЕНОГЕТЕРОЦИКЛІЗАЦІЇ 1-ПЕНТІНІЛПІРАЗОЛ-4-КАРБОНОВОЇ КИСЛОТИ

Повідайчик М.В., Онисько М.Ю.

e-mail: mariannarovidajchuk@gmail.com

ДВНЗ «Ужгородський національний університет»,

Україна, Ужгород

Функціональні та конденсовані похідні піразолу проявляють високу біологічну активність. Синтез конденсованих піразолів може бути здійснений методом електрофільної гетероциклізації ненасичених N(C)-алкільних похідних функціонализованого піразолу. Тому дослідження регіохімії гетероциклізації алкільних похідних піразолу є актуальним.

Метою даної роботи є дослідження напрямку галогеноциклізації 1-пентинілзаміщеної піразол-4-карбонової кислоти **3**. Синтез кислоти **3** включав стадію алкілювання естеру **1** термінальним пентиніл бромідом з наступним гідролізом. Галогеноциклізацію N-пентинілпіразол-4-карбонової кислоти проводили в середовищі полярного розчинника оцтової кислоти під дією еквімолярної кількості молекулярного чи гібридного галогену. В результаті галогено-індукованої гетероциклізації отримано галогеніди 5-галогенометиліден-2-карбокси-5,6,7,8-тетрагідропіразоло[1,2-а]піридазинію **4-6**.

Слід відмітити, що природа циклізуючого реагенту не впливає на напрямок циклізації, а тільки на виходи солей. Найкращі виходи спостерігалися при циклізації бромом (73%) та бромідом йоду (69%).

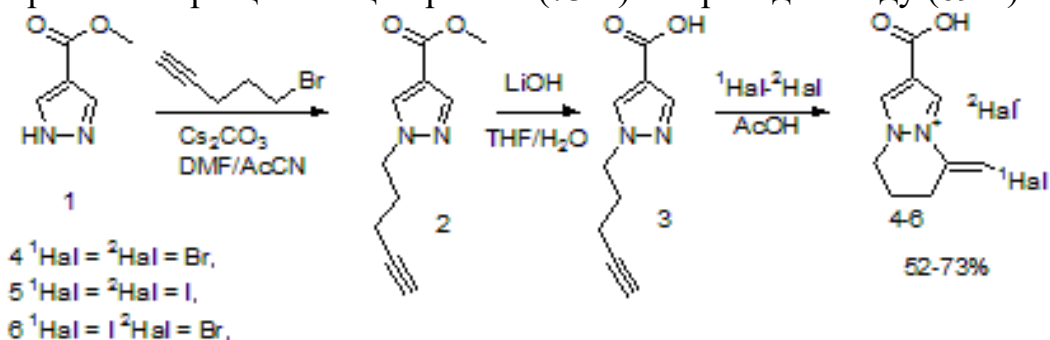


Рис.1. Синтез та гетероциклізація 1-пентинілпіразол-4-карбонової кислоти **3**

Аналіз спектральних даних свідчить про проходження циклізації, а саме зміщення в слабке поле сигналу метінового протону та протонів піразольного циклу, характер прояву ендочіклических метиленових груп в спектрі <sup>1</sup>H ЯМР. Слід зазначити, що утворюються солі галогенометиліденпіразоло[1,2-а]піридазинію у вигляді тільки одного конфігураційного ізомеру, імовірно, E-конфігурації, про що свідчить хімічний зсув метінового протону при 7,8-7,9 м.ч.

Отже, методом електрофільної галогеногетероциклізації синтезовано солі піразолопіримідинію з лабільною до функціоналізації карбоксильною групою.



## СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ 1,2-ОКСАТІОЛАН-4-ОН 2,2-ДІОКСИДІВ

Полюдов А.О.<sup>1,2</sup>, Гавришко Д.Ю.<sup>1,2</sup>, Добриденів О.В.<sup>2,3</sup>

e-mail: antonpoliudov@gmail.com

<sup>1</sup>Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»,

Україна, Київ

<sup>2</sup>Enamine Ltd.,

Україна, Київ

<sup>3</sup>Київський національний університет імені Тараса Шевченка,

Україна, Київ

Одним з найважливіших методів сучасної органічної, медичної та фармацевтичної хімії є біоізотерна заміна. Це дозволяє створити нові лікарські засоби шляхом покращення фармацевтичного профілю препарату.

Тетронова кислота входить до складу значної кількості лікарських засобів та природних сполук (аскорбінова кислота, пеніцилінова кислота тощо).

Лактонний фрагмент, що входить до її складу, можна замінити на сульфонатну групу, керуючись принципами біоізоцерної заміни (Рис. 1).

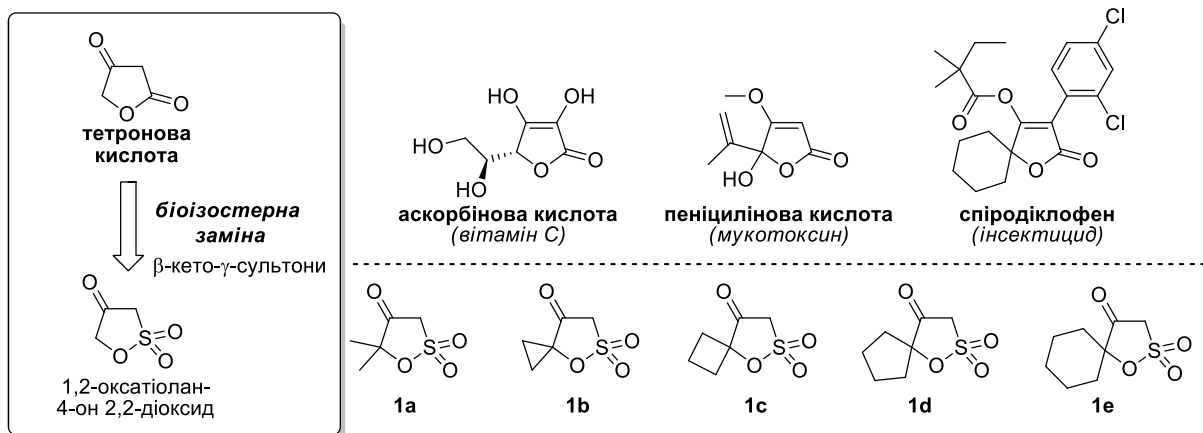


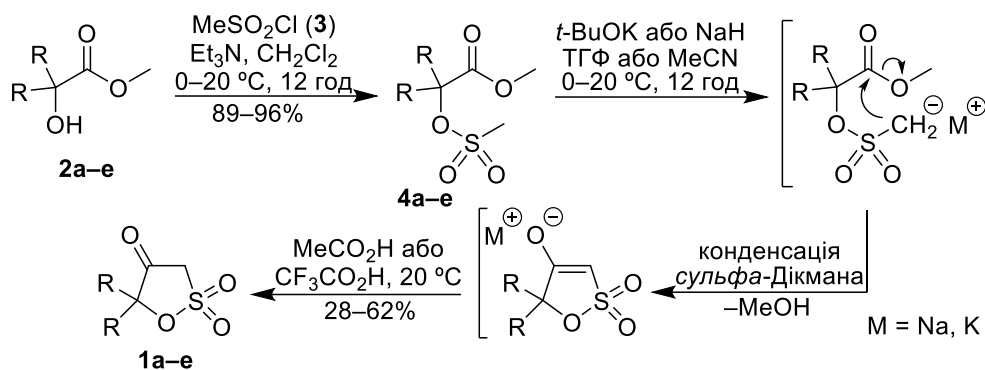
Рис. 1. Тетронова кислота, її похідні та біоізоцери

В рамках нашого дослідження був розроблений загальний метод синтезу  $\beta$ -кето  $\gamma$ -сульфонів та отримані відповідні біоізоцери тетронової кислоти **1a–e** (Схема 1).

Метод базується на сульфонуванні мезилхлоридом  $\alpha$ -гідроксиестерів та подальшій внутрішньомолекулярній конденсації сульфа-Дікмана (CSIC реакція).

Даний метод дозволяє отримати чисті сполуки з високим виходом та з мінімальними матеріальними затратами без застосування дорогих реактивів та специфічних методів очистки (колонкова хроматографія або HPLC).





**1a, 2a, 4a)** R = Me; **1b, 2b, 4b)** R + R = (CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>; **1c, 2c, 4c)** R + R = (CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>;  
**1d, 2d, 4d)** R = Me; **1e, 2e, 4e)** R + R = (CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>.

Схема 1. Синтез 5,5-дизаміщених 1,2-оксатіолан-4-он 2,2-діоксидів **1a-e**

Як і тетроновій кислоті, кетосультонам **1a-e** притаманна таутомерія та перехід в енольну форму, вміст якої залежить від полярності розчинника та напруженості молекули (Схема 2). В найбільшому ступені це характерно для найменш напруженого представника – **1a**, частка енольної форми якого складає 61% згідно спектрів ЯМР у ДМСО-*d*<sub>6</sub>. В той же час, сполука **1c** з найбільш напруженим тричленним циклом перебуває в енольній формі лише на 12%. Для проміжної за напруженістю сполуки – спіроциклобутил заміщеного кетосультону **1b** вміст енольної форми складає 46%.

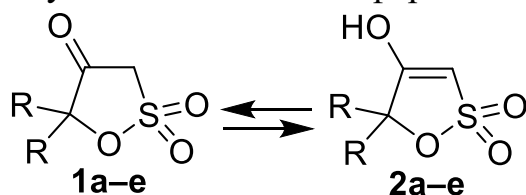


Схема 2. Кето-енольна таутомерія кетосультонів **1a-e**

Крім того, досліджувані сполуки **1a-e** мають в своїй структурі активовану метиленову групу та кето групу, що вступають у взаємодію з електрофільними та нуклеофільними реагентами (Схема 3).

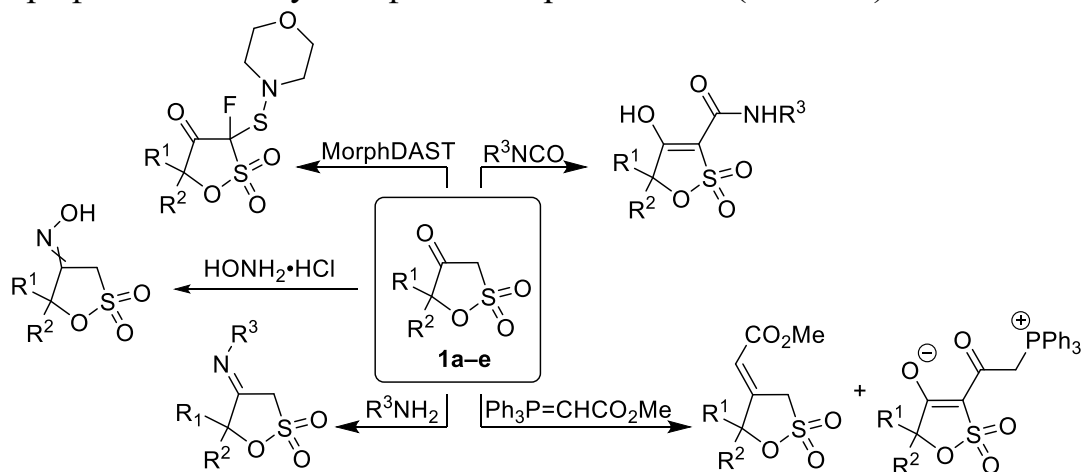


Схема 3. Реакційна здатність β-кето γ-сультонів **1a-e**

## СИНТЕЗ НОВИХ ПОХІДНИХ ІНДЕНОХІНОКСАЛІН-6-КАРБОНОВОЇ КИСЛОТИ З АМІНАМИ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ЇХ АФІНІТЕТУ ДО ДНК

Сазонов К. Д., Ішков Ю.В.

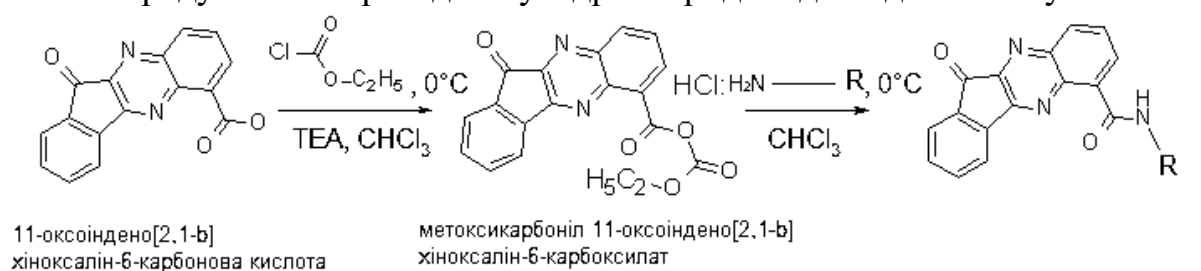
e-mail: kiril5121997@gmail.com

Одеський Національний Університет імені І.І. Мечникова,  
Україна, Одеса

Похідні інденохіноксаліну – це важливі представники азотовмісних гетероциклів, які в останні роки здобули значну увагу через свою високу біологічну активність. Вони здатні пригнічувати репродукцію широкого спектру інфекційних агентів, у результаті чого вони проявляють протівірусну, антибактеріальну та протизапальну активність тощо, що пояснюється механізмом їх інтеркаляції до ДНК, а також здатні індукувати синтез ендогенного інтерферону. Молекула ДНК є поліаніоном, тому ліганд, що буде зв'язуватись з нею, повинен добре протонуватись та бажано бути водорозчинним, аби підвищити біодоступність сполуки. У зв'язку з вищенаведеним, нами було вирішено синтезувати нові похідні інденохіноксалінів з різними амінами.

Цільові продукти отримували за наступною схемою (рис. 1.), використовуючи як зшиваючий агент етиловий ефір монохлорвугільної кислоти.

У синтезах з діамінами, їх брали у п'ятикратному надлишку у співвідношенні до кислоти, та прикапували розчин утвореного змішаного ангідриду до розчину із аміном, оскільки у звичайних умовах утворюється з великою перевагою біс продукт. Отримані виходи 52-70%. Для отримання чистих продуктів їх переводили у гідрохлориди відповідних сполук.



R=C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>N (56%) N-(2-аміноетил)-11-оксо-індено[2,1-*b*]хіноксалін-6-карбоксамід

R=C<sub>6</sub>H<sub>14</sub>N (57%) N-(6-аміногексил)-11-оксо-індено[2,1-*b*]хіноксалін-6-карбоксамід

R=C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>NO (52%) N-[2-(2-аміноетокси)етил]-11-оксо-індено[2,1-*b*]хіноксалін-6-карбоксамід

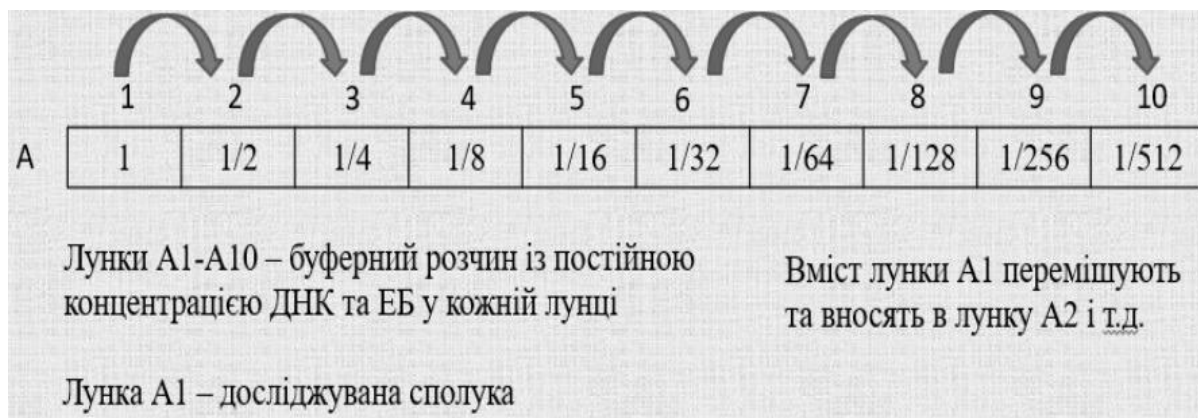
R=C<sub>6</sub>H<sub>14</sub>NO<sub>2</sub> (60%) N-[2-[2-(2-аміноетокси)етокси]етил]-11-оксо-індено[2,1-*b*]хіноксалін-6-карбоксамід

R=C<sub>8</sub>H<sub>18</sub>NO<sub>3</sub> (57%) N-[2-[2-[2-(2-аміноетокси)етокси]етокси]етил]-11-оксо-індено[2,1-*b*]хіноксалін-6-карбоксамід

R=C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>N (70%) N-[3-(диметиламіно)пропіл]-11-оксо-індено[2,1-*b*]хіноксалін-6-карбоксамід

Рис. 1. Схема синтезу естерів амінокислот інденохіноксалін-6-карбоної кислоти

Визначення афінитету досліджуваних сполук до ДНК проводили методом конкуренції з етидієм бромідом в чорному 96-лунковому планшеті за наступною схемою (рис. 2).



**Рис. 2.** Визначення концентрації речовин, що забезпечують 50% -е гасіння інтеркаляції етидію броміду

За результатами експерименту за наступною формулою визначали константу асоціації досліджуваних сполук із ДНК:

$$\lg K_x = 7 - \lg C_{50} + \lg C_e$$

- де  $\lg K_x$  – логарифм константи асоціації сполуки з ДНК;  
7 – логарифм константи асоціації з ДНК етидію броміду;  
 $\lg C_{50}$  – логарифм концентрації сполуки, що забезпечує 50%-е витиснення етидію броміду;  
 $\lg C_e$  – логарифм концентрації етидію броміду в експерименті.

Структуру отриманих сполук підтверджено за допомогою методів мас-спектрометрії та ПМР-спектроскопії. Результати аналізу цих речовин з використанням програми PharmMapper та даних молекулярного докінгу, а також проведеного експерименту свідчать про потенційні біологічні властивості цих сполук та їх здатність виступати інтеркаляторами ДНК.

## **РЕОЛОГІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ РОЗЧИНІВ ПЕКТИНУ**

Сайтарли С.В.<sup>1</sup>, Пушкарьов Ю.М.<sup>2</sup>, Дмитренко І.В.<sup>1</sup>

e-mail: svetlanasaitarly@gmail.com

<sup>1</sup>Національний університет «Одеська політехніка»,  
Україна, Одеса

<sup>2</sup>Українська Технологічна академія,  
Україна, Одеса

Наукові дослідження [1,2] довели ефективність використання пектинів у фармацевтичній і косметичній промисловості. Використання пектину для капсулювання лікарських препаратів забезпечує щадний режим їх всмоктування в шлунково-кишковому тракті.

У косметичній промисловості сорти низькоетерифікованих високомолекулярних пектинів використовують як структуроутворювачі в пастах, мазах, маслах і кремах, косметичних лосьйонах і шампунях. Основою хімічної будови пектинів є полімери  $\alpha$ -D-галактуронової кислоти з молекулярною масою в широких межах ( $20^4 \dots 20^5$  Да).

В'язкість розчинів є важливою характеристикою для технології отримання різних пектиновмісних продуктів, а також розуміння динаміки процесу формування гідрогелів із розчинів полісахаридів. Довжина молекулярного ланцюга, концентрація, температура, ступінь етерифікації, присутність електролітів впливають на величину в'язкості розчинів пектину. З огляду на те, що кожен пектин являє собою суміш молекул з різною довжиною ланцюга, може бути встановлена тільки середня молекулярна маса [3].

Об'єктом дослідження є яблучний пектин натуральний українського виробництва T.V.Fruit – загущувач рослинного походження отриманий шляхом екстракції яблучних вичавок. Метою дослідження є визначення молекулярної маси та реологічних властивостей розчинів пектину. Реологічні властивості визначали на ротаційному віскозиметрі «Rheotest-2». Молекулярна маса пектинових речовин може бути визначена багатьма методами, проте найбільш надійним є метод визначення характеристичної в'язкості  $[\eta]$  їх розчинів за допомогою капілярного віскозиметра Оствальда. Для визначення середньої молекулярної маси пектину готували серію розчинів різної концентрації яблучного пектину (%): 0,0156; 0,03125; 0,0625; 0,125; 0,25; 0,5; 1; 2.

За результатами вимірювань будували залежність питомої в'язкості від концентрації розчину  $\eta_{\text{пит}}/C$ . Величина відрізка, що відсікається в точці перетину отриманої прямої з віссю ординат  $[\eta_{\text{пит}}]$  визначає характеристичну в'язкість.

Розрахунок молекулярної маси проводили за рівнянням Марка-Куна-Хаувінка:

$$[\eta] = KM^a,$$

де  $M$  – молекулярна маса;

$K$  і  $a$  – константи для систем полімер – розчинник.

За результатами розрахунку визначено, що середня молекулярна маса становить 23678 Да. Відносно низька величина молекулярної маси не дає підстав для забезпечення сильних міжмолекулярних взаємодій у досліджуваному полімері та утворення досить міцних флуктуаційних сіток, що забезпечується силами Ван-дер-Ваальса.

Для дослідження реологічних властивостей розчинів пектину готували 2, 5 і 10% розчини. Розчини 10% концентрації – сиропоподібні в'язкотекучі рідини. В'язкість водних розчинів пектину в межах 2-5% мас. змінюється незначно і різко зростає при концентрації 10% (табл.1).

Таблиця 1 – В'язкість водних розчинів пектину

Концентрація розчину, % мас.	В'язкість, Па·с
2	0,2
5	0,4
10	4,7

Дуже неміцні структури в цих розчинах за рахунок значного прошарку водного середовища між частками пектину і, відповідно, слабкою взаємодією між ними легко руйнуються вже в області швидкостей зсуву від 3 до 9 с<sup>-1</sup> і далі течуть як ньютонівські рідини. Більш міцні коагуляційні структури в 10% розчині пектину при 20°C зберігаються при більш високих швидкостях зсуву.

Розраховані за рівнянням Френкеля-Ейринга  $\eta = A \cdot e^{\frac{E}{RT}}$  в межах швидкостей зсуву 3 і 27 с<sup>-1</sup> значення енергії активації в'язкої течії становлять відповідно 16 і 12 кДж/моль. Таким чином, зсув і температура за постійної величини молекулярної маси діють на зниження в'язкості розчинів пектину незалежно і взаємно доповнюючи один одного.

За результатами експериментальних даних визначено величину молекулярної маси дослідженого зразка пектину та встановлено вплив концентрації розчину пектину на його структурно-механічні властивості та реологічну поведінку.

#### Література:

1. Гайнюк М.Б., Шеремета Л.М. Детоксикуючий ефект яблучного пектину за умов експериментальної гострої алкогольної інтоксикації / Медична та клінічна хімія. – 2018. – Т. 20, № 2. – С.72-76
2. Каліновська, Т.В. Дослідження вмісту пектинових речовин напівфабрикатів з виноградних вичавок та визначення їх сорбційних властивостей / Т.В. Каліновська, В.І. Оболкіна, С.Г. Кияниця // Харчова наука і технологія. – 2013. – № 4 (25). – С. 69–74.
3. Грабовська О.В. Про перспективи розвитку пектинового виробництва в Україні / О.В. Грабовська, Г.С. Пастух // Цукор України. – 2017. – № 6-7. – С. 42-47.



**ОБҐРУНТУВАННЯ СКЛАДУ ТА РОЗРОБКА ТЕХНОЛОГІЇ  
ВИРОБНИЦТВА ПРЕПАРАТУ ДЛЯ ЛІУВАННЯ ТА  
ПРОФІЛАКТИКИ ІШЕМІЧНОЇ ХВОРОБИ МОЗКУ**

Сергієнко К.О., Крищик О.В.

e-mail:oxanakp15@gmail.com

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро*

Хронічні цереброваскулярні захворювання, зокрема хронічна ішемія мозку (ХІМ) або дисциркуляторна енцефалопатія (ДЕ), широко поширені в популяції [1]. Найбільш частими клінічними проявами ХІМ є когнітивні розлади, а також такі симптомокомплекси, як тривога, депресія, астенія та рухові розлади насамперед порушення рівноваги та ходьби.

На сьогодні оксидативний стрес розглядається як важлива ланка в патогенезі ішемічного ураження головного мозку, підґрунтям якого є підвищення продукції похідних вільно радикального окислення і перекисного окислення ліпідів з виснаженням антиоксидантних захисних механізмів організму.

Подальша актуалізація проблеми ХІМ у клінічній практиці (старіння населення, екологічні фактори, хронічний стрес і т. п.), а також кількість випадків цереброваскулярних розладів, що стрімко зростає, на різних стадіях захворювання COVID-19 (у тому числі, в рамках постковідного синдрому) свідчить про необхідність розширення спектру конвенційних ангіо- та нейропротекторних лікарських препаратів, насамперед за рахунок засобів на основі природних компонентів, що максимально поєднують ефективність, безпеку та доступність у процесі лікування та відкривають нові перспективи у стратегії нейрофармакотерапії [3].

Метою даного дослідження є обґрунтування складу та розробка технології виробництва препарату для лікування та профілактики ішемічної хвороби мозку на основі ацетилшиконіну з екстракту коріння *Lithospermum erythrorhizon* Sieb. Et Zucc.

Ацетилшиконін є похідним нафтохінону з широкими фармакологічними перевагами, включаючи протипухлинні, протизапальні, ліпідорегулюючі, протидіабетичні, антибактеріальні, протигрибкові, антиоксидантні, нейропротекторні та противірусні властивості.

Відомо, що ацетилшиконін, виділений з екстрактів *Lithospermum erythrorhizon* Sieb. Et Zucc, захищає пошкоджені тканини головного мозку, зокрема, від ішемічного апоптозу, причому захист пошкоджених тканин мозку збільшується залежно від дози ацетилшиконіну. Встановлено, що ацетилшиконін пригнічує експресію синтази оксиду азоту залежно від дози на рівні гена та білка, і, таким чином, ацетилшиконін має захисну дію на пошкодження тканин мозку. Було підтверджено, що ацетилшиконін істотно

та залежно від дози інгібує експресію мРНК iNOS, IL-1beta та TNF-alpha у первинних клітинах мікроглії.

Також було підтверджено, що ацетилшиконін істотно та залежно від дози інгібував експресію iNOS та IL-1beta, прозапальних цитокінів, у первинних клітинах мікроглії. Випробування гострої токсичності ацетилшиконіну на мишах ICR та щурах лінії Sprague-Dawley шляхом перорального та внутрішньовенного введення підтвердило, що ацетилшиконін є безпечною сполукою з майже повною відсутністю гострої токсичності [3].

Тому екстракт *Lithospermum erythrorhizon* Sieb. Et Zucc, що містить ацетилшиконін, можна ефективно використовувати для профілактики та лікування дегенеративних захворювань мозку, які індукуються апоптозом нейронів, прикладом яких є інсульт, апоплексія, деменція, хвороба Альцгеймера, хвороба Паркінсона, хвороба Хантінгтона, хвороба Піка та хвороба Крейтцфельда-Якоба.

Нами було запропоновано склад препарату для лікування та профілактики ішемічної хвороби мозку з умовною назвою «Шикогенін» у капсулах по 0,01 г. У якості допоміжних речовин обрано лактозу як наповнювач (розріджувач), целюлозу мікрокристалічну – наповнювач, для посилення плинності капсульної маси, магнію стеарат – антифрикційну речовину.

Розроблено технологічний регламент виробництва «Шикогеніну» у капсулах. Створена математична модель та на її основі проведені математичні розрахунки виробництва. Обране необхідне технологічне обладнання для виробництва капсул препарату «Шикогенін» для лікування та профілактики ішемічної хвороби мозку.

#### Література:

1. Хронічна ішемія головного мозку. Сучасний погляд на проблему / Т. Черній, В. Черній, Д. Світлицька // Клінічна та профілактична медицина. - 2023. - № 3(25). – С. 100-112.
2. Нейропротекція та вазопротекція: стратегія захисту мозку «два в одному» / С. Г. Бурчинський // Укр. мед. часопис. – 2023. – № 3 (155) – V/VI. – С. 3–9.
4. Pat. US 7731994 B2, Int. Cl. A61K 36/00 (2006.01). Pharmaceutical composition for protecting neurons comprising extract of *Lithospermum erythrothizon* seb. et. Zucc or acetylshikonin solated therefrom asan effective ingredient / Ho Cheol Kim, Ha Young Lee, Ni Na Ha et al. (KR). – Assignee: Industry Academic Cooperation Foundation of Kyunghee University. – Appl. No.: 11/762,350, Filed.: Jun. 13, 2007. – Date of Patent: Jun. 8, 2010. – 15 p.



## ЗАСТОСУВАННЯ 2-МЕТИЛ-3-(5-АРИЛ-2-ФУРИЛ)АКРОЛЕЇНІВ У ТАНДЕМНИХ ПЕРЕТВОРЕННЯХ

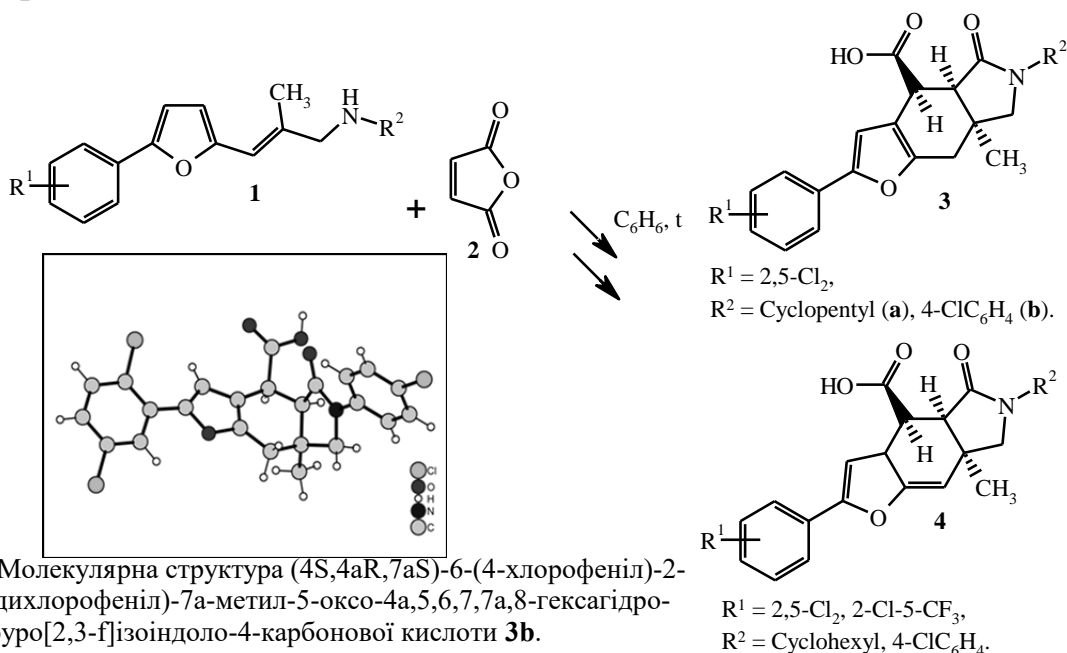
<sup>1</sup>Сітар А.А., <sup>1</sup>Матійчук В.В., <sup>1</sup>Чура О.Р., <sup>1</sup>Литвин Р.З., <sup>2</sup>Кінжибало В.В.,  
<sup>1</sup>Горак Ю.І., <sup>1</sup>Обушак М.Д.  
e-mail: andrii.sitar@lnu.edu.ua

<sup>1</sup>Львівський національний університет імені Івана Франка,  
Україна, Львів

<sup>2</sup>Інститут низьких температур і структурних досліджень ПАН,  
Польща, Вроцлав

Одним з найбільш важливих синтетичних методів для конструювання шестичленних циклів є реакція Дільса-Альдера. Завдяки молекулярному різноманіттю дієнів та дієнофілів межі застосування цієї реакції досить широкі. Дієновий синтез широко використовують як у синтетичній органічній хімії, так і у промисловому виробництві. Раніше показано, що подвійний зв'язок у деяких гетероциклах разом з екстернальним подвійним зв'язком можуть утворювати дієнову систему, що є реакційним центром у тандемній реакції ацилювання – циклоприєднання [1]. Так було розроблено схему конструювання частково гідрованих похідних ізоіндолу, анельованих з п'ятичленими гетероциклами. 2-Метил-3-(5-арил-2-фурил)акролеїни та їхні похідні у таких реакціях не досліджували.

У цій роботі ми вивчили взаємодію [2-метил-3-(5-арил-2-фурил)проп-2-ен-1-ілден]амінів **1** з малеїновим ангідридом **2** і з'ясували, що реакція відбувається за схемою ацилювання – внутрішньомолекулярного циклоприєднання (IMDA), що дало змогу запропонувати простий метод одержання аза-аналогів сесквітерпенів пінгвісанового ряду на основі похідних 2-метил-3-(5-арил-2-фурил)акролеїнів:



Ми дослідили також взаємодію амінів **5** з малеїновим ангідридом **2**. З'ясовано, що при цьому відбувається N-ацилювання аміну з подальшим циклоприєднанням. Оскільки сполука **5** має дві потенційні дієнові системи – подвійні зв'язки у боковому ланцюзі і фурановому циклі та фурановий цикл у фурилметильному фрагменті, то були можливими два напрями циклоприєднання. Встановлено, що при кип'ятінні реагентів **5** та **2** у бензолі, реакція Дільса-Альдера відбувається регіоселективно з формуванням адуктів **6**. Похідні ізоіндолу **7** в цих умовах не утворювались.

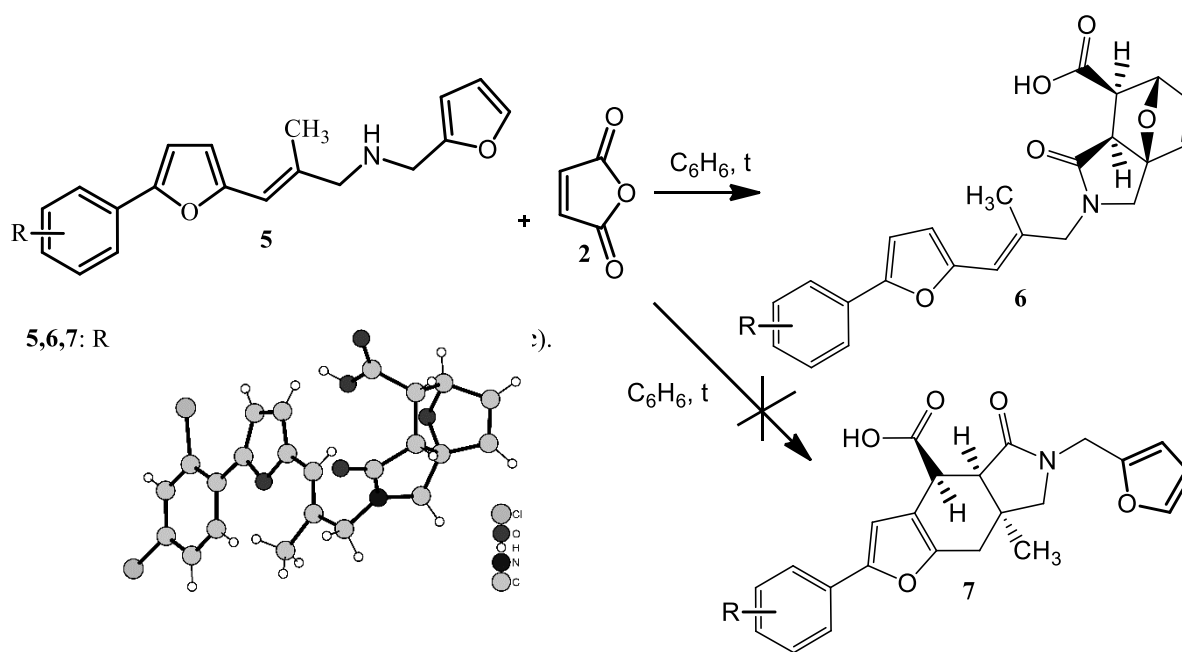


Рис. Молекулярна структура (3aS,6R,7S,7aS)-2-((E)-3-(5-(2,4-дихлорофеніл)фуран-2-іл)-2-метилаліл)-1-оксо-1,2,3,6,7,7a-гексагідро-3a,6-епоксиізоіндола-7-карбонової кислоти **6c**

Робота частково підтримана фондом Simons Foundation (Award No 1037973) та Міністерством освіти і науки України.

#### Література:

1. Horak Yu.I. et al. Tetrahedron Lett. 2017. Vol. 58, № 43. P. 4103.

**ПРИНЦИПИ «ЗЕЛЕНОЇ ХІМІЇ» ПІД ЧАС РОЗРОБКИ  
ПРОМИСЛОВОЇ ТЕХНОЛОГІЇ СИНТЕЗУ НАФАЗОЛІНУ НІТРАТУ**

Соломінчук Т.М., Рудюк В.В., Сидоренко Л.В.\*, Георгіянц В.А.\*

e-mail: t.solominchuk@farmak.ua

*Акціонерне товариство «Фармак»,*

*Україна, Київ*

*Національний фармацевтичний університет,*

*Україна, Харків\**

Відомо, що головною запорукою якості лікарського препарату є якість та безпечність активного фармацевтичного інгредієнту, що входить до його складу. Для зменшення впливу синтетичного виробництва на атмосферу провідні фармацевтичні компанії світу стали широко впроваджувати в свою діяльність принципи «зеленої хімії» [1]. Ці принципи дозволяють не тільки зменшити ризики забруднення навколишнього середовища, але й водночас зменшити вплив небезпечних речовин, якими є хімічні реагенти, на здоров'я співробітників, зайнятих у виробництві АФІ. Отже, існує суттєва потреба у вдосконаленні синтетичної та інженерної хімії або шляхом використання екологічно чистих вихідних матеріалів, або шляхом правильного проектування нових шляхів синтезу, які зменшують використання та утворення токсичних речовин за допомогою сучасних джерел енергії [2].

На АТ «Фармак» було впроваджено принципи «зеленої хімії» в промислове виробництво субстанції Нафазоліну нітрату. Раніше субстанція напруцьовувалась за старою радянською технологією, яка передбачала використання соляної кислоти в якості каталізатора. Також синтез проводився без використання розчинників, і в результаті це все призвело до утворення побічних продуктів сплавлення, низького виходу субстанції та великої кількості відходів. Згідно нової технології синтезу було введено розчинник 1,2,4-трихлорбензол. Технологія синтезу передбачає регенерацію даного розчинника, що призводить до зменшення кількості відходів, збільшення виходу кінцевого продукту та як наслідок зменшення негативного впливу на навколишнє середовище. За кількістю відходів на кілограм продукту (Е-фактор) модифікована технологія одержання Нафазоліну нітрату є у 7 разів ефективніша ніж стара радянська технологія. Для підтвердження відсутності 1,2,4-трихлорбензолу на допустимому рівні було розроблено та валідовано методіку його визначення методом газової хроматографії в кінцевому продукті. Результати кількісного визначення розчинника показали його відсутність на рівні межі детектування. Також його не було виявлено в жодній з 11 комерційних серій, що підтверджує очищення від нього в процесі синтезу.

Література:

1. Anastas P. T., Warner J. C. Green Chemistry: Theory and Practice, Oxford University Press: New York, 1998. 30 p.
2. Saleh, H. E.-D. M., & Koller, M. (2018). Introductory Chapter: Principles of Green Chemistry. Green Chemistry. doi:10.5772/intechopen.71191

## МЕТОД ФУНКЦІОНАЛІЗАЦІЇ ЕПОКСИДІВ ЗА ДОПОМОГОЮ РЕАКЦІЇ ОЛЕФІНУВАННЯ ХОРНЕРА-ВОДСВОРДА-ЕММОНСА

Хорзеєв В.В.<sup>1,2</sup>, Коряко С.С.<sup>2</sup>, Малащук А.С.<sup>2,3</sup>

e-mail: vladiksale@gmail.com

<sup>1</sup>Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»,

Україна, Київ

<sup>2</sup>НАУКОВО-ВИРОБНИЧЕ ПІДПРИЄМСТВО «СНАМІН»,

Україна, Київ

<sup>3</sup>Київський національний університет імені Тараса Шевченка,

Україна, Київ

Відомі способи олефінування епоксидів ілідами фосфору з утворенням ефірів у реакції Вітіга. [1]

Але застосування реакції Вітіга має багато обмежень, так реакції з епоксидами проходять часто з розкриттям циклу і не завжди вдається підібрати оптимальні умови. Також слід зазначити, що необхідні іліди фосфору є досить дорогими реагентами і трифенілфосфіноксид, який утворюється при реакції важко відділити від необхідного продукту.

Для цієї задачі найбільш підходить реакція Хорнера-Водсворда-Еммонса, бо олефінування проходить при більш м'яких умовах, а сам фосфонат можна легко функціоналізувати. Можливість епоксидів вступати у реакцію Хорнера вже була відома і використовувалась для отримання біологічно-активних речовин.[2]

У нашій роботі вперше розглянуте олефінування епоксидів триетил 2-фосфонопропіонатом. Отриманий ефір гідролізували до відповідної карбонової кислоти, яку можна використати для подальших перетворень.

Олефінування проводилось за наступною методикою: триетил 2-фосфонопропіонат розчиняється у толуені, при 0°C до реакційної суміші прикапується n-BuLi і реакційна маса вимішується 30хв, після чого прикапується розчин відповідного епоксиду у толуені і суміш гріється при 110 0°C 12 годин. Після чого суміш виливається у холодний водний розчин NH<sub>4</sub>Cl та екстрагується ЕА.

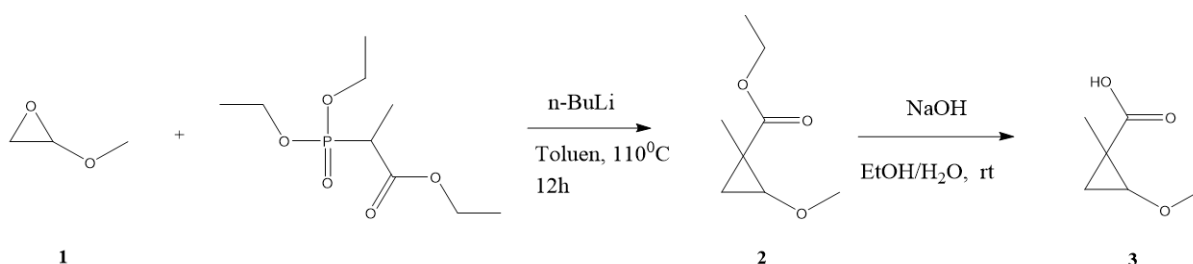


Рисунок 1. Схема одержання (3) 2-метокси-1-метилциклопропан-1-карбонової кислоти з (1) 2-метоксиоксирану

Аналогічним методом функціоналізації епоксидів були отримані наступні сполуки: **(4)** 7-метилбіцикло[4.1.0]гептан-7-карбонова кислота, **(5)** 6-метил-3-оксабіцикло[3.1.0]гексан-6-карбонова кислота, **(6)** 6-метил-3-азабіцикло[3.1.0]гексан-6-карбонова кислота. Загальні виходи по епоксиду склали 70-80%.

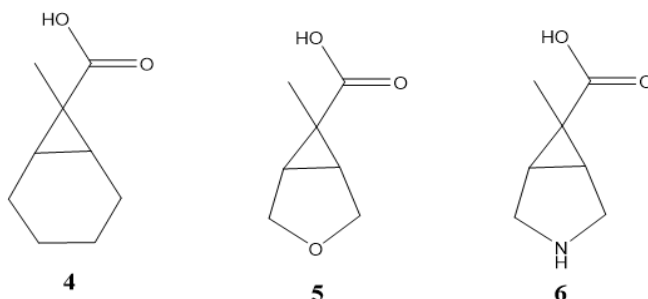


Рисунок 2. Отримані в ході роботи сполуки

**Висновки.** В ході нашого дослідження був розглянутий зручний метод олефінізації епоксидів за допомогою реакції Хорнера-Водсворда-Еммонса. Вперше для цієї задачі був використан триетил 2-фосфонопропіонат. Вихідні епоксиди та реактив Хорнера є комерційно доступними речовинами. Також слід зазначити, що використання реакції Хорнера зручніше за використання реакції Вітгіга, через те що побічними продуктами реакції є диалкілфосфати, яких можна легко позбутися, через їх добру розчинність у воді. Це відкриває багато синтетичних можливостей.

Наразі нами проводиться робота, щодо отримання за цією методикою інших речовин, а також дослідження вже отриманих.

#### Література:

1. Wallace P., Warren S. Synthesis of  $\gamma$ -homoallylic alcohols,  $\gamma$ -hydroxyketones, and cyclopropyl ketones from 3-diphenylphosphinoyl (Ph<sub>2</sub>PO) propanols by acyl transfer. *Tetrahedron Letters*. 1985. Т. 26, № 46. С. 5713–5716.

2. Synthesis, biological activity and mechanistic insights of 1-substituted cyclopropylamine derivatives: A novel class of irreversible inhibitors of histone demethylase KDM1A / P. Vianello et al. *European Journal of Medicinal Chemistry*. 2014. Vol. 86. P. 352–363.

## СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ ПОЛІМЕРИЗАЦІЙНОЗДАТНИХ МОНОМЕРІВ НА ОСНОВІ РОСЛИННИХ ОЛІЙ

Чеботар А. С.<sup>1</sup>, Гаргай Х. І.<sup>1</sup>, Дончак В. А.<sup>1</sup>

e-mail: anastasiia.chebotar.xt.2020@lpnu.ua

<sup>1</sup>Національний університет «Львівська політехніка»,  
Україна, Львів

В останні роки відбувається інтенсивний розвиток полімерної хімії пов'язаний із синтезом полімерів на основі відновлюваної природної сировини. Це пов'язано зі стрімким виснаженням запасів нафти, а також забрудненням навколишнього середовища продуктами синтетичного походження.

З відновлюваних природних ресурсів, таких як полісахариди, білки, а також рослинні олії, найбільший потенціал для полімерної хімії представляють саме рослинні олії. Полімери отримані на основі рослинних олій мають ряд переваг над "традиційними" полімерами нафтохімічного походження: біодеградабельність, біосумісність, низька токсичність, відсутність негативного впливу на довкілля, доступність сировини та, у перспективі, нижча вартість.

У роботі [1] описано синтез нових акрилатних мономерів на основі соєвої та оливкової олій за допомогою одностадійного методу їх переестерифікації 2-*N*-(гідроксиетил)акриламідом.

Разом з тим, ацильні фрагменти лінолевої та олеїнової кислот, які переходять з олій до молекул одержаних мономерів, містять у своїй структурі подвійні зв'язки. Це спричиняє зменшення як швидкості процесу полімеризації цих мономерів, так і молекулярної маси полімерів на їх основі через негативний вплив реакцій передачі та обриву ланцюга, що проходять за участю цих подвійних зв'язків (т.з. алільний обрив).

Ми запропонували використовувати для синтезу таких мономерів олії з високим вмістом залишків насичених жирних кислот, переважно пальмітинової та стеаринової а саме: пальмову олію та саломас (суміш гідрогенізованих рослинних олій). Відсутність, або незначний вміст залишків ненасичених жирних кислот в одержаних мономерах дозволить звести на нівець внесок реакцій передачі та обриву ланцюга, і таким чином прискорити процес полімеризації та сприятиме зростанню молекулярної маси полімерів.

Синтез мономерів проводили за реакцією наведеною на схемі 1, у середовищі тетрагідрофурану з використанням лужного каталізатора, вихід продуктів становить 78-84 %.

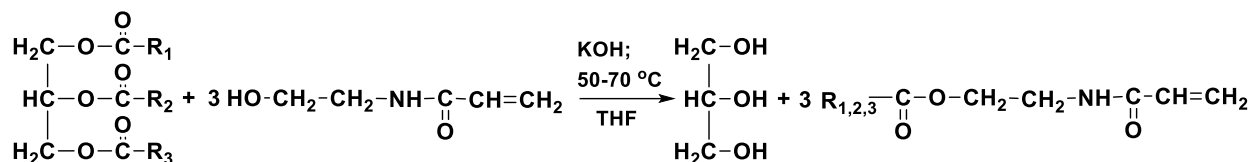


Схема 1. Синтез мономерів через реакцію переестерифікації (R<sub>1,2,3</sub> – алкільні залишки, переважно, насичених жирних кислот пальмової олії та саломасу)

Структуру синтезованих мономерів підтверджено ІЧ-Фур'є спектроскопією. Отримані мономери нерозчинні у воді, але добре розчинні у полярних органічних розчинниках.

Наявність полімеризаційноздатного *N*-акрилоїльного фрагменту забезпечить можливість участі цих мономерів у процесах вільнорадикальної полімеризації, що відкриває значні перспективи для створення на їх основі нових гомо- та кополімерів.

Література:

1. Free Radical Polymerization Behavior of the Vinyl Monomers from Plant Oil Triglycerides / Z. Demchuk, O. Shevchuk, I. Tarnavchyk [et. al] // ACS Sustainable Chemistry & Engineering. – 2016. – Vol. 4. – P. 6974 - 6980.



## N-(*tert*-БУТИЛСУЛЬФІНІЛ)ПОЛІФТОРОАЛКІЛІМІНИ В АСИМЕТРИЧНОМУ СИНТЕЗІ

Чередніченко А. С.<sup>1</sup>, Рассукана Ю. В.<sup>1</sup>

e-mail: alyonachered@gmail.com

<sup>1</sup>Інститут органічної хімії НАН України,  
Україна, Київ

Асиметрична функціоналізація поліфтороалкілімінів є зручним методом синтезу різних типів оптично активних фторовмісних ациклічних та гетероциклічних сполук. [1] Особливо привабливими субстратами в цьому аспекті є іміни, які містять *tert*-бутилсульфінільну стереонаправляючу групу на атомі азоту, оскільки вони демонструють високу реакційну здатність і стереоселективність в широкому колі реакцій. [2,3].

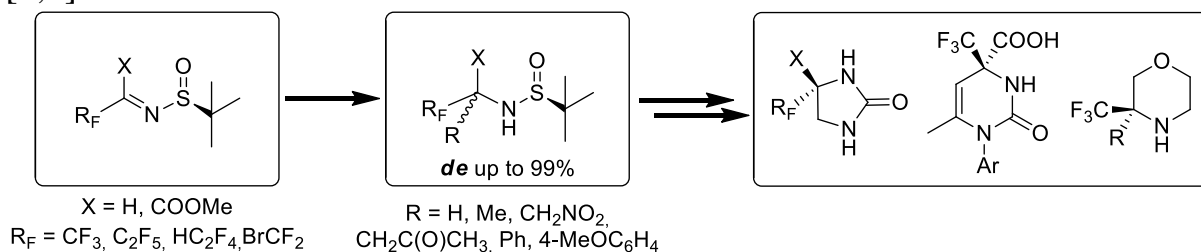


Схема 1. N-(*tert*-бутилсульфініл)поліфтороалкіліміни в синтезі оптично чистих речовин

Розроблено хемо- та стереоселективні методи функціоналізації оптично чистих N-(*tert*-бутилсульфініл)поліфтороалкілальдімінів та імінів трифторопірувату взаємодією з нітрометаном, ацетоном і магнійорганічними сполуками. Синтетичний потенціал отриманих продуктів продемонстровано на прикладі одержання біологічно перспективних енантімерно чистих  $\alpha$ -трифторометиламінокислот і азотистих гетероциклів з імідазольним, піримідиновим і морфоліновим ядрами.

### Література:

1. Fioravanti, S. Trifluoromethyl aldimines: an overview in the last ten years. *Tetrahedron* 2016, 72, 4449–4489.
2. Mei, H.; Xie, C.; Han, J.; Soloshonok V. A. N-*tert*-Butylsulfinyl-3,3,3-trifluoroacetalimine: Versatile Reagent for Asymmetric Synthesis of Trifluoromethyl-Containing Amines and Amino Acids of Pharmaceutical Importance. *Eur. J. Org. Chem.* 2016, 5917–5932.
3. Mei, H.; Han, J.; Fustero, S.; Román, R.; Ruzziconi, R.; Soloshonok, V. A. Recent Progress in the Application of Fluorinated Chiral Sulfinimine Reagents. *J. Fluor. Chem.* 2018, 216, 57–70.

## СИНТЕЗ ПАРА-/МЕТА-ЗАМІЩЕНОЇ АЗОМЕТИНВМІСНОЇ СПОЛУКИ – 3-(ГЕКСИЛОКСИ)-N-(4-(ГЕКСИЛОКСИ)БЕНЗИЛІДЕН)АНІЛІНУ

Шведчикова К.В.

e-mail: katasvedchikova0@gmail.com

Національний університет «Києво-Могилянська академія»,  
Україна, Київ

Введення до складу органічних сполук, зокрема полімерів, азометинових груп дозволяє надати їм електрооптичних, люмінесцентних, рідкокристалічних властивостей, а також здатності до комплексоутворення з іонами різних металів. Відомо, що поліазометини (ПАМ), отримані поліконденсацією діамінів і діальдегідів (класичний спосіб синтезу ПАМ), мають низькі молекулярні маси (ММ) і недостатню розчинність, що ускладнює їхнє практичне застосування. Альтернативним способом отримання ПАМ з високими значеннями ММ є використання азометинвмісних мономерів. Введення етерних груп, ізомерних фрагментів та аліфатичних блоків до складу полімерів дозволяє покращити їхню розчинність і регулювати оптичні та рідкокристалічні властивості полімерів. Тому метою даної роботи є синтез *пара-/мета*-заміщеного азометинвмісного дифенолу, а також розробка способу синтезу нової модельної сполуки – 3-(гексилокси)-N-(4-(гексилокси)бензиліден)аніліну для демонстрації можливості використання синтезованого азометинвмісного дифенолу як мономеру для отримання ПАМ реакцією ароматичного нуклеофільного заміщення.

Для досягнення поставленої мети отримано азометинвмісний дифенол **3** на основі *мета*-амінофенолу **1** та *пара*-гідроксibenзальдегіду **2** з використанням принципів зеленої хімії (розчинник – вода):

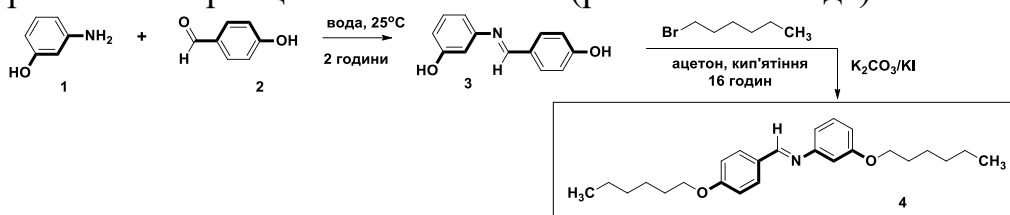


Схема. Синтез азометинвмісного дифенолу **3** та діалкіл-заміщеної сполуки **4**. Шляхом обробки сполуки **3** двократним мольним надлишком 1-бромгексану в ацетоні успішно отримано кінцеву сполуку **4**, а саме 3-(гексилокси)-N-(4-(гексилокси)бензиліден)анілін, згідно представленої схеми. Будова сполуки **4** охарактеризована методами ГЧ, <sup>1</sup>Н ЯМР та УФ спектроскопії.

Таким чином, в роботі отримано *пара-/мета*-заміщений азометинвмісний дифенол, який, як показано на прикладі модельної алкілзаміщеної сполуки **4**, може буде використаний для отримання широкого спектру ПАМ, зокрема поліазометинетерів.

**ДОСЛІДЖЕННЯ ПІДКОНТРОЛЬНИХ СИЛЬНОДІЮЧИХ ТА  
ОТРУЙНИХ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ МЕТОДОМ ГАЗОВОЇ  
ХРОМАТОГРАФІЇ**

Щербак К.Є., Гуржій О.Б.

e-mail: katicosch@gmail.com

*Дніпропетровський науково-дослідний експертно-криміналістичний центр  
Міністерства внутрішніх справ України,  
Україна, Дніпро*

Зловживання та незаконне використання сильнодіючих та отруйних лікарських засобів у суспільстві є серйозною проблемою з важливими наслідками, які можуть впливати на здоров'я, безпеку та соціальне благополуччя. Чинним законодавством України передбачена кримінальна відповідальність за незаконне виробництво, виготовлення, придбання, перевезення, пересилання, зберігання з метою збуту, а також збут отруйних чи сильнодіючих речовин та отруйних чи сильнодіючих лікарських засобів. Тому, з огляду на вищевказані аспекти до підрозділів Експертної служби МВС на дослідження надходять речовини з метою визначення їхньої якісної та кількісної належності до сильнодіючих та отруйних лікарських засобів.

Відповідно до наказу Міністерства охорони здоров'я України від 17.08.2007 № 490 до отруйних та сильнодіючих відносяться чітко визначені міжнародні непатентовані назви та форми лікарських засобів. Вибір методів дослідження таких речовин повинен ґрунтуватися на забезпеченні максимальної селективності та достовірності результатів. Газова хроматографія з мас-селективним детектуванням є одним з методів газової хроматографії, що являє собою метод розділення компонентів досліджуваної суміші, який заснований на процесах адсорбції-десорбції з подальшою ідентифікацією речовин, наприклад, мас-селективним детектором. Сучасний газовий хроматограф являє собою повністю автоматизовану систему з високою роздільною здатністю та достовірністю відтворювання. Для дослідження даним методом аналізована речовина потребує правильної пробопідготовки та умов проведення хроматографування.

Основними вузлами газового хроматографа є пристрій для введення проби проби (інжектор), що аналізується, хроматографічна колонка, яка поміщена в камеру термостату та детектор для ідентифікації сполук та їх фрагментів, які виходять з колонки. Під час хроматографування на екрані комп'ютера записується хроматограма – залежність сигналу детектора від часу аналізу. Дані величини є індивідуальними для кожної сполуки і порівняння їх з наявними базами даних (такими, як, наприклад NIST 05, Sauman, SWDRUG) дає змогу ідентифікувати надані на дослідження

речовини. Для кількісного хроматографічного аналізу використовують висоту ( $h$ ) хроматографічного піку або його площу ( $S$ ).

Принцип дії мас-селективного детектора базується на визначенні мас-спектра досліджуваної речовини, що являє собою розподіл інтенсивності сигналу від іонів в залежності від їхньої маси та енергії.

В більшості випадків для правильного процесу розподілення з метою аналізу лікарський засіб, який надійшов на дослідження після гомогенізації піддається екстракції органічним розчинником (метанол, гексан, хлороформ тощо). Також, в залежності від форми діючої речовини (основа чи сіль) екстракцію можуть проводити з кислого чи лужного середовища, при цьому розчинник обирається, той, який не змішується з водою (наприклад гексан чи хлороформ). Якщо на дослідження надходять термічно не стійкі або нелеткі речовини, тобто ті, що не відповідають умовам хроматографування у своєму первісному стані, тоді проводиться дериватизація з утворенням похідного досліджуваного препарату, що за своїми фізико-хімічними властивостями буде відповідати умовам проведення ефективного розділення в колонці хроматографа.

Враховуючи той факт, що лікарський засіб зазвичай являє собою суміш речовин: діюча речовина (безпосередньо сильнодіючий чи отруйний лікарський засіб) та допоміжні компоненти (цукри, жирні кислоти), то на хроматограмах відображується декілька піків. Для якісної ідентифікації піків, в тому числі для визначення їхніх площ чи висоти (для кількісного визначення), хімік аналітик може коригувати умови хроматографування в залежності від природи досліджуваної речовини. Вплив параметрів хроматографічного процесу на розділення має суттєве значення. Температура інжектора та колонки, а також швидкість програмного підігріву суттєво впливає на час розділення компонентів та їхню взаємодію з нерухомою фазою колонки. Обсяг введеної проби зразка може впливати на ширину та інтенсивність піків. Тиск газу в системі напряму впливає на швидкість проходження газу через колонку і, отже, на час розділення. Величина потоку газу також впливає на час аналізу та розділення компонентів. Налаштування цих параметрів може допомогти досягти найкращого можливого розділення та чутливості для конкретного аналізу, а оптимальні умови можуть різнитися для різних типів зразків та властивостей аналізованих речовин.

Отже, для здійснення надійного аналізу досліджуваних речовин хімік-аналітик повинен мати достатні знання та навички. Ці навички включають розуміння структури і хімічних властивостей речовини, а також усвідомлення впливу фізико-хімічних факторів з метою якісної інтерпретації результатів дослідження.

## ЗАСТОСУВАННЯ 2-МЕТИЛ-3-(5-АРИЛ-2-ФУРИЛ)АКРОЛЕЇНІВ У РЕАКЦІЇ РАДЗІШЕВСЬКОГО

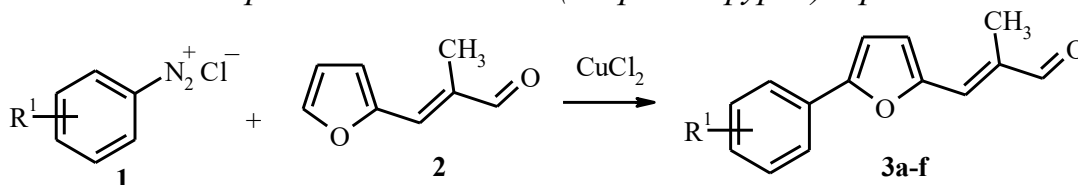
Юрчук Д.В., Євтушок І.О., Литвин Р.З., Горак Ю.І., Обушак М.Д.  
e-mail: diana.yurchuk@lnu.edu.ua

Львівський національний університет імені Івана Франка,  
Україна, Львів

Мультикомпонентні реакції дозволяють одержувати цільові сполуки складної будови за одну стадію, не змінюючи при цьому умов реакції. Слід зазначити, що розробка мультикомпонентних реакцій останнім часом є важливою складовою наукових пошуків і практичного застосування в області органічного синтезу, оскільки вони економлять ресурси і сприяють впровадженню концепції зеленої хімії.

Вихідні сполуки, неописані раніше – 2-метил-3-(5-арил-2-фурил) акриральдегіди **3** одержані арилюванням 2-фурил-2-метилакриральдегіду **2** ароматичними солями діазонію **1** в умовах реакції Меєрвейна. З'ясовано, що арилювання відбувається у водно-ацетоновому середовищі за наявності хлориду міді(II) з утворенням відповідних продуктів арилювання в положення 5 фуранового циклу (сполуки **3a-f**). Альдегіди **3** одержували з виходами 30–49% за одним винятком (R = 2-Cl, вихід – 12%).

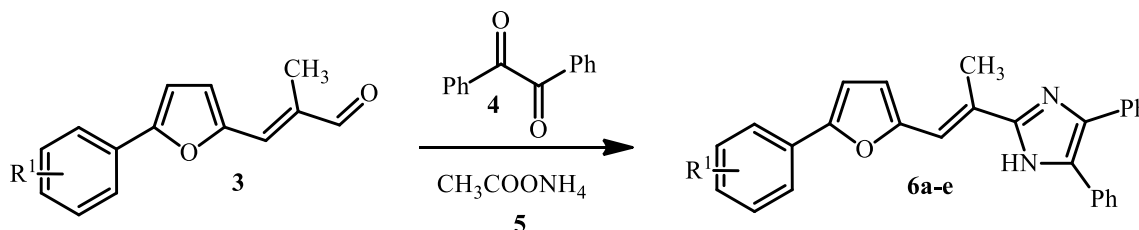
Схема 1. Одержання 2-метил-3-(5-арил-2-фурил)акриральдегідів:



**3:** R = 2,4-Cl<sub>2</sub> (**a**), 2,5-Cl<sub>2</sub> (**b**), 2-Cl-5-CF<sub>3</sub> (**c**), 3-NO<sub>2</sub> (**d**), 2-NO<sub>2</sub>-4-OCH<sub>3</sub> (**e**), 2-Cl (**f**).

Ми дослідили взаємодію альдегідів **3** з бензилом **4** та ацетатом амонію **5** в умовах реакції Радзішевського і з'ясували, що у такій трикомпонентній реакції утворюються 4,5-дифеніл-1H-імідазоли **6** з арилфурановими фрагментами.

Схема 2. 2-Метил-3-(5-арил-2-фурил)акриральдегіди у реакції Радзішевського:



**6:** R = 2,4-Cl<sub>2</sub> (**a**), 2,5-Cl<sub>2</sub> (**b**), 2Cl-5-CF<sub>3</sub> (**c**), 3-NO<sub>2</sub> (**d**), 2-NO<sub>2</sub>-4-OCH<sub>3</sub> (**e**).

Слід відзначити, що розчини у диметилформаміді імідазолів **6** при опроміненні ультрафіолетом (довжина хвилі 360 нм) виявляють інтенсивну люмінесценцію.



## QSPR АНАЛІЗ КРИТИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК

Ярема І. М.<sup>1</sup>, Стародумова Ю.І.<sup>1</sup>, Кічьова М.Є.<sup>2</sup>, Муратов Н.Н.<sup>1</sup>  
e-mail: u96ok69@gmail.com

<sup>1</sup> Національний університет «Одеська Політехніка»,  
Україна, Одеса

<sup>2</sup> Фізико-хімічний інститут ім. О.В. Богатського НАН України,  
Україна, Одеса

Незважаючи на те, що теоретична складова термодинаміки є однією з найбільш детально розроблених, все ж існує велика кількість розрахункових програм, що потребують знань термодинамічних властивостей, які ще не були виміряні і які не можуть бути прогнозовані існуючими теоретичними методами. Останнім часом спостерігається зниження швидкості накопичення нових експериментальних даних, з одного боку, і водночас, з іншого боку, зростаюча потреба в точних даних.

Оскільки такі термодинамічні властивості, зокрема, критичні властивості, є фундаментальними властивостями, на основі яких розраховуються важливі параметри для проектування хіміко-технологічних процесів, то для прогнозування цих властивостей існує необхідність у розробці адекватних моделей на основі структурної інформації.

Масив накопичених експериментальних даних з критичних властивостей дозволяє скласти представницькі вибірки, що включають інформацію щодо великої кількості сполук різних класів. Експериментальні дані було взято з довідника [1]. Були сформовані наступні бази даних, які включають 400 сполук відносно критичної температури і 380 сполук відносно критичного тиску.

Для всіх досліджуваних сполук були розраховані структурні параметри за допомогою методу симплексного представлення молекулярної структури [2]. Розрахунок структурних дескрипторів проводився на 2D-рівні представлення молекулярної структури, коли враховується лише топологія молекули, тобто вся інформація береться зі структурної формули. При використанні таких статистичних методів, як метод часткових найменших квадратів (PLS – Partial Least Squares) і метод випадкового лісу (RF - Random Forest), було побудовано низку адекватних 2D PLS і RF QSPR моделей з високою прогнозуючою здатністю. Проведено фізико-хімічну інтерпретацію побудованих моделей.

Література:

1. Reid R. C. The properties of gases and liquids / R. C. Reid, J. M. Prausnitz, V. E. Poling. – McGraw-Hill, 1987. – 741 p.
2. Kuz'min V., Artemenko A., Ognichenko L. et al. Simplex representation of molecular structure as universal QSAR/QSPR tool. *Structural Chemistry*. 2021. Vol. 32, N 4. P. 1365–1392.

## СПОСОБИ ПІДВИЩЕННЯ ІНТЕРЕСУ УЧНІВ ДО ВИВЧЕННЯ ХІМІЇ

Криворучко А.Р., Кривов'яз А.О.

e-mail: kryvoruchko.arsen@student.uzhnu.edu.ua

*ДВНЗ «Ужгородський національний університет»,*

*Україна, Ужгород*

Сучасний підхід до викладання хімії визнає необхідність не просто передачу фактів, а вимагає створення навчального середовища, яке викликає зацікавленість та стимулює активну участь учнів. Для вирішення цього завдання необхідно ретельно підбирати методи, які б сприяли появі інтересу дітей до хімії.

Аналіз наукової літератури дозволив виділити такі найбільш поширені методи, як навчання через гру, графічне представлення, екскурсія в лабораторію, експериментальні демонстрації [1]. Проведемо детальнішу характеристику названим методам.

1. Вивчення хімії через гру включає в себе елементи змагань та співпраці, що робить навчання цікавішим та заохочує учнів до активного вивчення матеріалу.

2. Графічні представлення. Використання сучасних графічних засобів та анімацій дозволяє наглядно демонструвати складні концепції та хімічні процеси, і це значно полегшує засвоєння абстрактних понять, сприяє взаємодії та обміну ідеями, тобто зробить навчання більш привабливим для дітей.

3. Екскурсія в лабораторію передбачає вивчення хімічних процесів не тільки через теоретичні аспекти, але й шляхом особистого досвіду, адже тут є можливість учням власноруч проводити експерименти та спостерігати за хімічними реакціями. Цей метод не лише дозволяє учням відчувати себе частиною наукового процесу, але й розвиває практичні навички, критичне мислення та вміння працювати в команді. Хоча даний метод здається ефективним, але його можна використовувати тільки для учнів з 9 по 11 клас. Оскільки в даний період учні починають задумуватися про свою майбутню професію і така екскурсія може підвищити їх інтерес до хімії, а також деякі учні виберуть хімію як один із предметів на НМТ.

4. Експериментальні демонстрації. Експериментальна демонстрація вивчення хімії – це спосіб привернути увагу дітей до найважливіших аспектів науки про речовини та їх взаємодію. Суть цього методу полягає в тому, щоб дозволити учням особисто спостерігати за реальними хімічними явищами, які можуть вражати своєю несподіваністю та ефектністю. Використання цього методу передбачає проведення вчителем або лаборантом хімічних експериментів під час уроків. Ці експерименти можуть включати в себе проведення кольорових реакцій, досліджувати динамічні явища. Головна мета – не лише проілюструвати хімічні закони,



але й зацікавити учнів, викликати в них бажання розуміти, як ці явища відбуваються. Експериментальні демонстрації мають потужний вплив на учнів, оскільки вони забезпечують можливість не лише бачити результати хімічних процесів, але й особисто взаємодіяти з ними. Цей метод дозволяє дітям відчувати себе частиною великого наукового експерименту, що робить навчання більш особистим та захоплюючим.

**Висновки.** Вважаємо, що експериментальна демонстрація є одним із найбільш ефективних методів стимулювання інтересу у дітей до хімії. Оскільки він не має обмежень і може бути використаним в будь-якої вікової категорії учнів. Вагомою її перевагою є можливість особистої участі школяра та повторення деяких дослідів в домашніх умовах.

Література:

1. Харченко Ю. Онлайн-вікторини з хімії як елемент гейміфікації, спрямований на активізацію пізнавального інтересу учнів. *Актуальні питання природничо-математичної освіти : збірник наукових праць*. Суми : СумДУ імені А. С. Макаренка, 2022. Вип. 2 (20). С. 144–154.

**ХІМІЯ І ТЕХНОЛОГІЇ  
ПАЛИВНО-МАСТИЛЬНИХ, ПОЛІМЕРНИХ,  
ПОЛІГРАФІЧНИХ МАТЕРІАЛІВ ТА  
ХАРЧОВИХ ПРОДУКТІВ**

**CHEMISTRY AND TECHNOLOGY OF FUELS,  
LUBRICANTS, POLYMERS, PRINTING  
MATERIALS, AND FOOD PRODUCTS**



## FEATURE OF THE INFLUENCE OF PHYSICAL FIELDS ON THE STRUCTURE AND PHYSICAL PROPERTIES OF EPOXY MATERIALS

Bardadym Yu.

e-mail: yuliia.bardadym@gmail.com

*University of Helsinki, Finland, Helsinki*

*Institute of Macromolecular Chemistry of the National Academy of Sciences of Ukraine, Ukraine, Kyiv*

In the manufacture of functional composite epoxy materials, the control of agglomeration and orientation of the filler in the polymer matrix is extremely important. To date, there are several approaches to obtain polymer composites with oriented fillers. Among these approaches, the physical fields (PF) are very attractive due to the ease of manipulating the alignment of the filler in desired directions, even when the filler may not have sufficient magnetic properties. Samples of composites were formed from epoxy polymer (EP) with was 3% CdO, PbO or Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. The influence of constant magnetic (CMF) or electric (CEF) fields were  $2 \cdot 10^5$  A/m and  $1.5 \cdot 10^4$  V/m. In the scattering region  $2\theta = 26.11^\circ$  and  $2\theta = 29^\circ$  in the structure of the crystalline phase CdO the disappearance of part of the reflexes was observed, and for others the change in intensity after the influence of PF. However, reflexes with the highest intensity remained unchanged, which indicated the stability of the CdO crystal system in the composition of composites. Samples with PbO were characterized by the new reflexes in areas  $2\theta = 26^\circ$ ,  $50.6^\circ$ ,  $54.6^\circ$  appeared after the influence of PF. Significant changes in the angular position and intensity of the main maxima of hexagonal syngony were not observed for samples with Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. It should be noted changes in the topological structure were observed for unfilled EP. This was due to the influence of external CPF on the polycondensation reaction and the formation of a three-dimensional chemical network. Differences in the influence of CPF were manifested after reaching the range of 88-94°C (relaxation of segments of intermolecular fragments of EP). Changes in the temperature range 97-167°C indicate that the use of CMF or CEF to form the structure of the EP allows you to change the packing density of the chemical network relative to its initial state (without PF). Differences of the influence of PF on the dielectric characteristics occur after reaching the region 88-94°C. The high-temperature transition in the region 134-136°C can be related to the relaxation in the biphenylolpropane fragment, which is stored regardless of the external conditions of influence. The orientation effect of PF increases the free volume of the molecular chains of a chemical grid, which results in a decrease of glass transition temperature by 8°C and 14 °C for CMF and CEF, respectively.

**Acknowledgements.** The author is grateful for financial support from the Academy of Finland (Grantnumber:353886)

## COMPOSITION AND PROPERTIES OF OIL DEPOSITS OF NORTHERN TAJIKISTAN

\*Pochoev A.A., \*\*Azizov R.O., \*Razykov Z.A.

e-mail: anushervon.pochoev@mail.ru, rustam.azizov57@gmail.com, zafarrazykov@mail.ru

\**“Mining-metallurgical Institute of Tajikistan”*,  
*Tajikistan, Buston*

\*\**“National Academy of Sciences of Tajikistan”*,  
*Tajikistan, Dushanbe*

**Abstract.** This article provides an overview of research related to the analysis of the chemical composition and basic properties of oil. The influence of individual components of oil on its physicochemical properties has been studied. The article also provides information on the composition and properties of oil from fields developed by Petroleum Sugd JLLC.

Based on the research results, recommendations have been developed to improve the quality of the oil used.

**Key words:** oil composition, oil density, oil viscosity, fractional composition, crude oil, commercial oil, dehydration, desalting.

Oil – it is a natural polymerized organic substance consisting of a mixture of hydrocarbons as well as other chemical compounds. It is formed through a long process of decomposition of organic materials such as plants and microorganisms under high pressure and temperature in the earth's crust.

The composition of oil can vary depending on its source, but generally it contains hydrocarbons in various fractions. In terms of molecular composition, oil consists mainly of carbon and hydrogen, and may also contain traces of nitrogen, oxygen, sulfur and other elements. Oil is classified by its density and viscosity.

Crude oil can be light, medium or heavy, depending on the ratio of various hydrocarbon fractions in its composition. In addition, its viscosity can vary, from fluid to thick.

Oil also has different physical and chemical properties. One of the most important is the calorific value, which determines the energy value of oil as a fuel source. It also has interesting electrical and thermal conductivities, making it useful for several industrial and scientific applications.

The composition and properties of oil play a decisive role in its use. Oil is the main raw material for the production of petroleum products such as gasoline, diesel fuel and kerosene. It is also used in the manufacturing process of plastics, lubricants, synthetic fibers and other products. In addition, oil is of significant importance to the economies of countries dependent on the export of petroleum products.

However, oil also causes environmental problems due to unauthorized extraction and leakage. The study of the composition and properties of oil is also

an important aspect in the development of environmentally friendly technologies, processing and disposal of petroleum products, which will minimize negative impacts on the environment and develop more sustainable ways of using oil and its derivative products.

The composition and properties of oil from the fields of Northern Tajikistan are very similar to each other. The properties of oil from fields on the balance sheet of the joint limited liability company of Tajikistan and Austria JLLC Petroleum Sugd are studied in the laboratories of this enterprise.

Below are several results of the analysis of oil properties for different oil and gas fields in Northern Tajikistan [1] (Table 1)

Table 1

***Composition and properties of oil from the Mahram field***

	Indicators	Before dehydration	After dehydration
1	Density at 20°C	0,858 g/cm <sup>3</sup>	0,843 g/cm <sup>3</sup>
2	Content of chloride salts	1111 mg/l	202 mg/l
3	Water content	20%	0,2%
4	Content of mechanical impurities	0,0531%	0,0475%

After taking a sample of crude oil from the vertical steel tank VST – 700 m<sup>3</sup> of the Makhram field, a chemical analysis of the oil was carried out, where it was found that the density of the oil before the dehydration process was 0,858 g/cm<sup>3</sup>, after dehydration it decreased and amounted to 0,843 g/cm<sup>3</sup> at 20°C.

The water content before the dehydration process was 20%, after the dehydration process with the addition of demulsifiers it was 0.2%. The content of chloride salts in crude oil was 1111 mg/l, after washing them with hot distilled water it decreased to 202 mg/l.

Table 2

***Composition and properties of oil from the Niyazbek field (for well No. 22)***

	Indicators	Before dehydration	After dehydration
1	Density at 20°C	0,859 g/cm <sup>3</sup>	0,852 g/cm <sup>3</sup>
2	Content of chloride salts	935 mg/l	185 mg/l
3	Water content	18 %	0,4 %
4	Content of mechanical impurities	0,052 %	0,047 %

Oil produced from the Niyazbek fields, as determined from chemical composition indicators, belongs to the category of medium oil. The density of crude oil from wells No. 21-22 is 0,859 kg/m<sup>3</sup>, the water content before oil dehydration is 12-18%, respectively. The content of chloride salts in the oil sampled from well No. 21 is 1621 mg/l, in well No. 22 Niyazbek 935 mg/l (Table 2).

Oils from different fields differ greatly from each other in their fractional composition, and therefore in their potential content of gasoline, kerosene, diesel and oil distillates. It is obvious that the fractional composition of a particular oil predetermines the ways of its washing processing, which is determined by the indicators given in tables 3 and 4.

Table 3

***Composition and properties of oil from the Rawat field***

	Indicators	Before dehydration	After dehydration
1	Density at 20°C	0,988 g/cm <sup>3</sup>	0,870 g/cm <sup>3</sup>
2	Content of chloride salts	10055 mg/l	267 mg/l
3	Water content	69%	0,4%
4	Content of mechanical impurities	0,31%	0,11%

The density of oil from the Rawat field is close to unity, it depends on the content of paraffin-resinous substances. The density of oil from the Rawat field before dehydration with the addition of demulsifiers is 0,870 kg/m<sup>3</sup>. The average water content before dehydration is 69%, the content of chloride salts is 10055 mg/l. (Table3)

Table 4

***Composition and properties of oil from the Obi Shifo field***

	Indicators	Before dehydration	After dehydration
1	Density at 20°C	0,925 g/cm <sup>3</sup>	0,865 g/cm <sup>3</sup>
2	Content of chloride salts	9253 mg/l	-
3	Water content	28%	0,3%
4	Content of mechanical impurities	0,12%	0,08%

In the process of determining the content of water, chloride salts and mechanical impurities of oil from the above-mentioned fields, it turned out that, compared to the Kanibadam and Northern Kanibadam fields, their content is much lower. When oil is heated to a temperature of 365°C, the yield of light petroleum products is 68%. The density of oil from the Kanibadam field at a temperature of 20°C is 0,990 kg/m<sup>3</sup>, which depends on the high content of paraffin-resinous substances. The end of the boiling point and the yield of light oil products is only 50%. The oil also contains chloride salts in very large quantities (Table 5).

Table 5

***Composition and properties of oil from the Kanibadam field***

	Indicators	Before dehydration	After dehydration
1	Density at 20°C	1,00 g/cm <sup>3</sup>	0,870 g/cm <sup>3</sup>
2	Content of chloride salts	11074 mg/l	-
3	Water content	92%	0,3%
4	Content of mechanical impurities	0,117%	0,091%



The preparation of crude oil to marketable quality at Petroleum Sugd JLLC is carried out at the central oil collection point (CPSP) “Kanibadam”. Crude oil is prepared to marketable condition for further transportation to consumers for processing. Petroleum Sugd JLLC does not process oil into petroleum products due to the lack of necessary processing equipment.

The average indicators of commercial oil prepared at the central oil collection point of Petroleum Sugd JLLC are shown in Table 6.

Table 6

*Indicators of commercial oil of Petroleum Sugd JLLC*

<b>The name of indicators</b>	<b>Numeric value</b>
Mass fraction of water, %	1,5
Mass fraction of sulfur, %	0,5
Mass fraction of mechanical impurities	0,07
Content of chloride salts, mg/l	1500
Paraffin content, %	3,2
Asphaltenes content, %	0,9
Resin content,%	10,8
Viscosity at temperature 50° cts	10,7
Pour point; with thermal return	+20°
Without heat treatment	+17°
Density at 20°C, kg/m <sup>3</sup>	0,865
Coking ability,%	3,7
Saturated steam pressure mmHg	67,7
Acidity mg KOH	7,91
Ash content, %	0,2

Oil extracted from a well usually contains formation water in both free and bound (emulsified) states. The release of oil from water is carried out twice: the first time at the oil field area or at the central point for collecting and preparing oil, where the bulk of water is extracted from the oil in installations and its content is adjusted from 0,5 to 1,0% by weight, and the second time in oil refineries, where residual water is removed from oil. When carrying out the dehydration process using thermochemical treatment of oil, a sharp decrease in viscosity and sedimentation of water occurs due to the difference in density of oil and water.

According to the given indicators in Table 6, the mass fraction of water in commercial oil is 1.5%. The sulfur content in commercial oil is 0.5%, which

falls into the category of low-sulfur oils. The content of mechanical impurities in commercial oil reaches up to 0.07%, which is higher than the norm.

As is known, the presence of mineral salts in the form of crystals in oil and solution in water leads to increased corrosion of metal equipment. After the desalting process, at the central collection point and its preparation, the content of chloride salts in commercial oil decreases and amounts to 1500 mg/l. The main amount of oil produced at Petroleum Sugd JLLC belongs to the category of medium oil, containing a large amount of light low-boiling fractions and dissolved gas.

During the collection, transportation and storage of this oil in field conditions, dissolved gases are often completely lost, in addition, significant losses of light oil fractions are noticed during the evaporation of components such as methane, ethane and partially propane, as well as heavier hydrocarbons evaporate from the oil (butanes, pentanes and higher).

Based on the above, it follows that the Petroleum Sugd JLLC should use more modern technologies in the field of oil collection and treatment.

Based on the results of an analysis of the properties of oil from the fields of Northern Tajikistan, it is recommended to use the following innovative technologies in the field of oil preparation [2]:

1) Electroflotation. A technology based on the use of electrical energy to remove water and solids from crude oil. Using electroflotation, it is possible to achieve a higher quality of oil and reduce the content of impurities, which facilitates its further processing.

2) Ultrafiltration. The technology is based on the use of membranes to remove micro- and nanoparticles from oil. Ultrafiltration allows you to purify oil from various contaminants, such as asphaltenes, resins and other insoluble substances.

3) Use of microorganisms. In some cases, microorganisms can be used for biological refining of oil. These microorganisms break down contaminants and help improve the quality of oil. This can be especially useful when cleaning oil from oily runoff or when extracting oil from shale formations.

4) Fluid separation technologies. In some cases, oil contains gas or water that must be separated. Innovative fluid separation techniques, such as the use of membranes, adsorbents or ultrasound, allow this process to be carried out efficiently and accurately.

5) Use of nanotechnology. Nanotechnology is widely used in the field of oil preparation. With the help of nanoparticles and nanomaterials, it is possible to improve the processes of dehydration, purification and separation of oil, as well as improve the efficiency of oil refining plants.

Literature:

1. Report on analysis of produced oil of the central collection point Kanibadam of JLLC Petroleum Sugd, Nefteabad, 2022.
2. Shaimardanov V.Kh. Processes and devices for technologies for collecting and preparing oil and gas in the fields / Under. ed. IN AND. Kudinova. – M.-Izhevsk: Research Center “Regular and Chaotic Dynamics”, Institute of Computer Research, 2013. – 508 p.
3. Ponikarov I.I., Gaidullin M.G. Machines and apparatus for chemical production and oil and gas processing. M.: Alfa, 2006.

**ПАТ «УКРТАТНАФТА» – НАУКОВО-ТЕХНІЧНИЙ РОЗВИТОК ПІДПРИЄМСТВА**

Богун В.В., Тертишна О.В.  
e-mail: bogun@ukrtatnafta.com  
*ПАТ «Укртатнафта»,  
Україна, Кременчук*

Кременчуцький нафтопереробний завод – єдиний працюючий НПЗ в Україні. Проектна потужність заводу складає 18,624 млн. т/рік, однак з плином часу через низку різних факторів (розподіл ринку нафтопродуктів, диверсифікація потоків нафтової сировини, воєнні дії) реальна потужність первинної переробки нафтової сировини складає  $\approx 7,0$  млн. т/рік. Початковим проектом заводу передбачено 35 технологічних установок, але у зв'язку з переходом підприємства на паливний варіант переробки нафти та внаслідок ракетних ударів 2022÷23 р.р. на сьогодні задіяно 20 технологічних установок.

Географічне розташування Кременчуцького НПЗ дозволяє одночасно поєднувати вигідну логістику як забезпечення нафтовою сировиною, так і реалізації товарної продукції. В якості нафтової сировини використовується західно-українська нафта, що постачається залізничним транспортом, східно-українська нафта – по трубопроводу, а також імпортована вуглеводнева сировина, яка постачається водним транспортом до морських нафтових терміналів і далі трубопроводом безпосередньо на нафтопереробне підприємство.

В галузі нафтопереробки України, у довоєнний час обсяг переробки нафтової сировини ПАТ «Укртатнафта» складав 2787,0 тис. тон, що становило 86% загального обсягу у даному сегменті ринку.

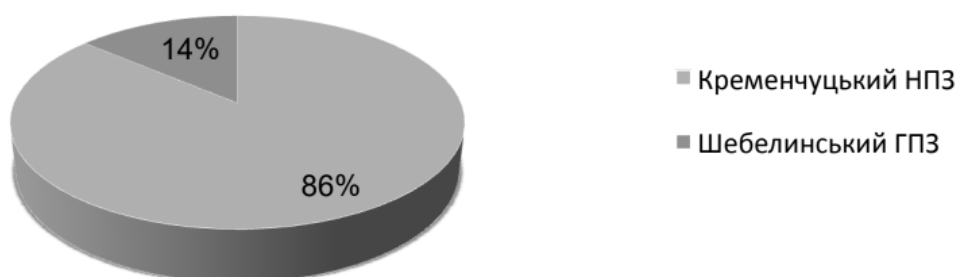


Рисунок 1 – Переробка нафтової сировини

Наявність установок з дублюючими технологічними процесами різних обсягів переробки забезпечує гнучкість потужності підприємства від 4,5 тис. тон на добу до 20 тис. тон на добу по нафтовій сировині. Це дозволяє маневрувати завантаженням залежно від наявності нафтової сировини.

Автоматизована система управління технологічними процесами використовується не тільки за прямим функціональним призначенням, а й

забезпечує зв'язок та обмін даними з іншими програмними ресурсами бухгалтерського та комерційного напрямків. Висококваліфікований персонал – це, в першу чергу, молоді спеціалісти, які мають наукову базу, закріплену практичними навичками. Тому підприємство зацікавлене в науково-технічному та кар'єрному розвитку свого персоналу. Товарна продукція, що виробляється на ПАТ «Укртатнафта», гарантується комплексною системою управління якістю, яка успішно функціонує на підприємстві.

Історію технічного розвитку Кременчуцького заводу можна розділити на:

- пуск заводу та випуск першої продукції – пуск першої черги технологічних установок;
- збільшення потужності переробки та розширення корзини нафтопродуктів – пуск другої та третьої черги технологічних установок з переведення роботи підприємства по паливно-оливній схемі;
- впровадження комплексу природоохоронних об'єктів – мінімізація шкідливих викидів, перехід на замкнутий цикл водозабезпечення;
- приведення якості товарної продукції в умовах впровадження жорстких екологічних стандартів Євро 4, Євро 5 – розроблення програми модернізації підприємства та реалізація I етапу «Підвищення якості автомобільних бензинів і дизельного палива», що відповідають за якістю вимогам Євро 4 і Євро 5»;
- підвищення енергоефективності та максимальної автономності роботи підприємства – впровадження малих енергоефективних проєктів, націлених на зниження собівартості товарної продукції.

Якщо проглянути життєвий цикл Кременчуцького НПЗ в розрізі з обсягами переробки нафти, то можна виділити декілька етапів циклу (рис.2):

**РІСТ** – розвиток підприємства згідно прийнятої програми будівництва та збільшення потужності переробки. В цей етап попадаються всі три черги пуску технологічних установок.

**СТАБІЛЬНІСТЬ** – після виконання програми розвитку підприємства, настає період стабільної його роботи в умовах державної політики планового виробництва, фактичної відсутності екологічних вимог та незмінності законодавчих вимог до якості продукції.

**СПАД** – робота підприємства в умовах впливу зовнішніх геополітичних факторів (розпад СРСР, становлення державності України) та диверсифікації, в наслідок цього, нафтових потоків.

**УМОВНА СТАБІЛЬНІСТЬ** – період роботи підприємства в умовах високої турбулентності приватизаційних процесів та євроінтеграції законодавства України, період визначення подальшого напрямку модернізації підприємства.

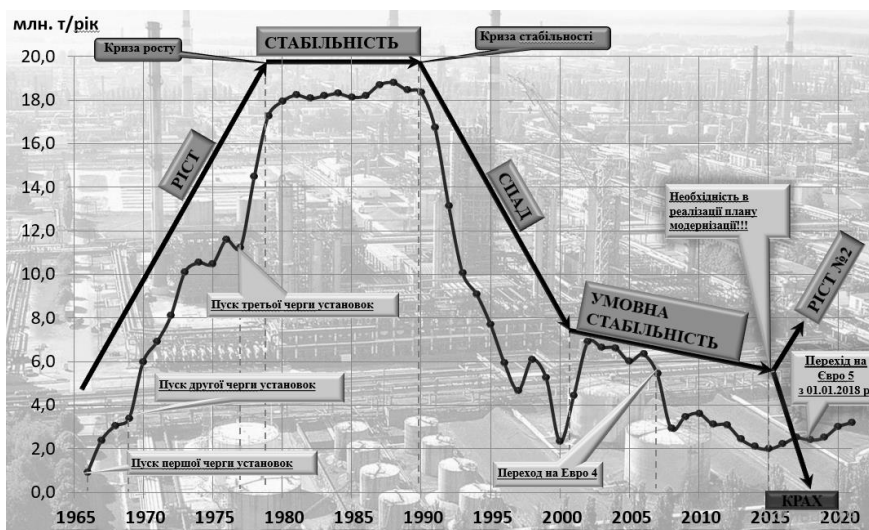


Рисунок 2 – Життєвий цикл підприємства

РІСТ №2 – розвиток підприємства після відновлення фінансування I етапу плану модернізації. Без відновлення фінансування наступав етап «КРАХ».

Вартість впроваджених заходів, які забезпечили перехід на Євро 4 та Євро 5 по дизельному паливу складає біля 30 млн. доларів.

Робота та розвиток будь-якого нафтопереробного заводу не можлива без співпраці з компаніями-ліцензіарами технологій, науково-технічними та інжиніринговими компаніями, виробниками каталізаторів та хімічних реагентів. Тому ПАТ «Укртатнафта» без винятку співпрацює зі світовими ліцензіарами технологій нафтопереробки (Axens, Shell, UOP, WorleyParsons), виробниками каталізаторів (BASF, Grace, UOP, Axens, Shell, Criterion, Haldor Topsoe) та хімічних реагентів (Chimex, Nalco, Infineum, BASF, Paltech).

ПАТ «Укртатнафта» можливо не має широкого спектру співпраці з національними науково-технічними компаніями, однак має тривалий період кооперації з фірмою ДЕОЛ (15 років була постачальником хімічних реагентів для процесу первинної переробки нафти, з АТ «Нафтохімпроект» (більше 25 років є генеральним проєктувальником ПАТ «Укртатнафта», розробником базових та робочих проєктів окремих технологічних схем та процесів), з ТОВ «МАНГ» (більше 10 років надавало інжинірингові послуги щодо оптимізації технологічних процесів та базові проєкти реконструкції систем теплообміну окремих технологічних установок), з ДП «Масма» (більше 15 років співпраці в сфері визначення ефективності та отримання допусків до застосування присадок до товарних палив).

Тільки співпраця зі світовими та національними науково-технічними компаніями дозволяє ПАТ «Укртатнафта» в подальшому забезпечувати впевнений розвиток та продовжувати виробництво широкого спектру якісної товарної продукції.



## **ПРОГНОЗУВАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ ЕЛАСТОМЕРНИХ КОМПОЗИЦІЙ, ЯК ГЕОМЕТРИЧНИХ ФАЗОВИХ ПЕРЕХОДІВ**

Гаврилюк Ю. В., Сухий К. М., Євдокименко Н. М.

e-mail: yuragavriluk@gmail.com

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро*

Сьогодні немає жодної галузі промисловості у якій не застосовуються еластомерні композити. Ступінь їх використання є важливим критерієм оцінки рівня науково-технічного прогресу країни. Використання еластомерних композитів забезпечує можливість створення принципово нових конструкцій різноманітних виробів, сприяє зменшенню їх маси, експлуатаційних та транспортних витрат, підвищенню якості. Характерно, що для конкретних умов експлуатації, як правило, необхідні полімерні матеріали з новим комплексом властивостей, а вирішувати дану проблему найкраще за рахунок пошуку оптимальних комбінацій традиційних каучуків.

Багаточисельні дослідження останніх років показали вирішальну роль геометричної фазової морфології у забезпеченні високого рівня властивостей еластомерних композитів.

Виходячи з того, що, на відміну від інших матеріалів конструкційного призначення, розвиток технології еластомерів обумовлений не тільки підвищенням рівня міцності (традиційний підхід для всіх матеріалів конструкційного призначення), але і необхідністю збереження основної властивості еластомерів – здатності дисипувати механічну енергію.

З урахуванням принципових відмінностей фізичної природи таких властивостей, як міцність і еластичність, геометричну фазову морфологію необхідно визначати як матричну структуру: дисперсійне еластичне середовище в якому розповсюджено дисперсну фазу (елемент матричної системи, що забезпечує високий рівень міжмолекулярної взаємодії).

Параметри морфологічної будови еластомерних композитів та характер структурних перетворень вивчали як геометричні фазові переходи із застосуванням методу перколяційного аналізу (рис. 1) [1].

Заповнені квадрати моделюють властивості гетерофази, а незаповнені – властивості дисперсійного середовища. Відомо [1], що імовірність геометричних фазових переходів при заданому вмісті гетерофази  $P$  різко зменшується при зменшенні розміру (діаметр  $d$ ) часток гетерофази. Таким чином, при зменшенні часток гетерофази зменшується імовірність геометричного фазового переходу – зберігається основна властивість матриці еластичність гуми. Одержані результати добре узгоджені з експериментальними даними: спостерігаємо зростання еластичності та міцності гуми (внаслідок зміни механізму руйнування).



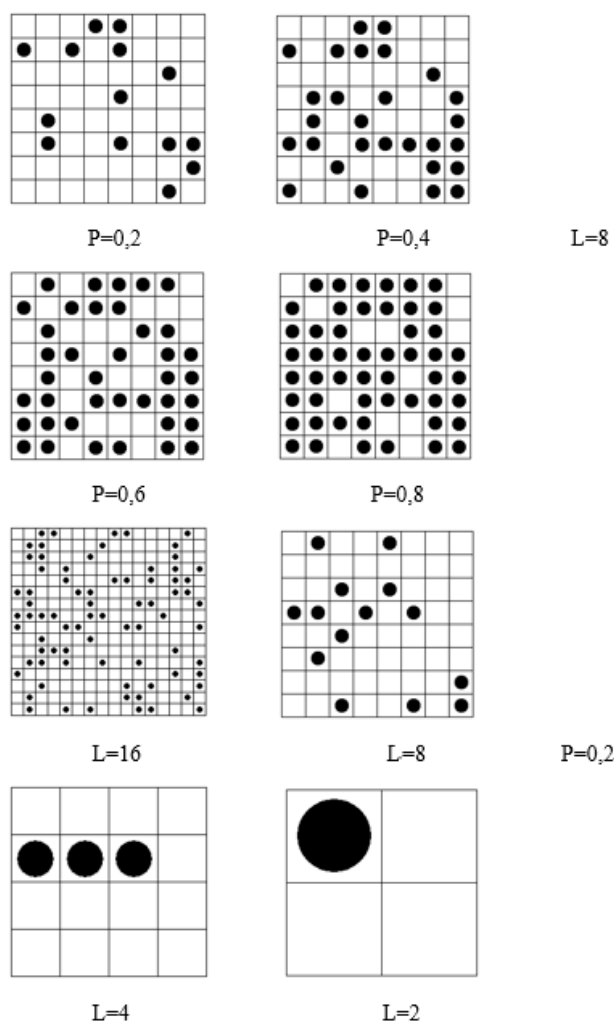


Рисунок 1. – Приклади перколяційних конфігурацій на квадратній решітці за різних значень  $P$  та  $L$  ( $P$  – частка зайнятих елементів на решітці;  $L$  – розмірність решітки)

Аналіз у задачах перколяції дозволяє оцінити вплив морфологічної будови еластомерних композитів на рівень деформаційно-міцносних властивостей, як імовірність геометричного фазового переходу, виходячи із умов пов'язаності.

Геометричні фазових переходи і термодинамічні фазові переходи якісно подібні, однак аналіз геометричних фазових переходів, у порівнянні з термодинамічними, простіший – базується на деяких поняттях геометрії та теорії ймовірності.

#### Література:

1. Гулда Х., Тобочкин Я. Компьютерное моделирование в физике, том 1. – М.: Мир, 1989. – 400с

## **ВИЛУЧЕННЯ БІЛКОВИХ ПРОДУКТІВ З ВІДХОДІВ ОЛІЙНОГО ВИРОБНИЦТВА**

Голуб Л.С., Водолазька А.В.

e-mail: man-shan@ukr.net

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро*

Вдосконалення рецептур та технологій виробництва існуючих харчових продуктів з метою збереження поживних властивостей компонентів харчового продукту або надання продукції нових властивостей за допомогою добавок функціонального призначення дозволяє ефективно зберігати можливість повноцінного харчування. Особливе значення для здоров'я людини мають білки рослинного походження. Дефіцит білків в організмі людини призводить до розпаду власних. Крім того білкові продукти мають високу біологічну цінність та емульгуючу здатність, їх застосування в складі харчових продуктів дозволяє отримувати стійкі емульсії.

На сьогоднішній день більшість виробників харчової продукції використовують в рецептурах білки тваринного походження. Але є категорія людей, які погано сприймають або мають алергічні реакції на білки тваринного походження. Цього недоліку не мають білки рослинного походження, саме тому виробництво саме таких білків є актуальною задачею для харчової технології.

Білкові ізоляти – це найбільш концентровані білкові продукти. Сировиною для одержання білкових ізолятів з насіння олійних культур є знежирений жмих або шрот, тобто відходи олійно-екстракційних підприємств. Відходи з цих підприємств не знайшли широкого подальшого використання в харчових продуктах, але вони містять багато цінних компонентів. Принципова технологічна схема білкових ізолятів передбачає екстрагування білків із жмиху або шроту, наступне вилучення білків з екстракту та їх висушування. Білковий ізолят із насіння – це високо очищений від небілкових компонентів продукт зі вмістом білка приблизно 90%. Оптимізована технологія вилучення білкового ізоляту з суміші шротів з насіння соняшника, гарбуза, коноплі. Розробка технології одержання рослинного білку є значним кроком вперед у вдосконаленні рецептур та технологій виробництва існуючих харчових продуктів, метою яких є збереження поживних властивостей компонентів продукту або надання продукції нових властивостей, а це в свою чергу дозволяє ефективно зберігати можливість повноцінного харчування. Розроблений білковий продукт рослинного походження може повноцінно замінювати білок тваринного походження в рецептурах харчових продуктів оздоровчого призначення.

## **ОПТИМІЗАЦІЯ РЕЦЕПТУРИ ІНТЕР'ЄРНОЇ ФАРБИ**

Голуб Л.С., Кравчук А.В.

e-mail: man-shan@ukr.net

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро*

Відомо, що велика кількість інтер'єрних фарб містить акрилові та стирол-акрилові похідні, які найчастіше призначені для використання в якості мінеральної основи. Фарби для внутрішньої обробки стін та фасадні (інтер'єрні) фарби становлять велику частку ринку лакофарбових матеріалів. Незважаючи на це, відчувається значна потреба в багатофункціональних, універсальних сполучних інтер'єрних фарбах для архітектурного застосування, які однаково добре працюватимуть на різних поверхнях, наприклад дерев'яних, мінеральних, залізних. Акрилові лакофарбові матеріали не містять в своєму складі органічних розчинників, тому вони практично не мають запаху і є екологічно чистими. Вони наносяться кистю, валиком або розпилювачем. Покриття, що утворюються, характеризуються високою адгезією практично до всіх основ і високим рівнем експлуатаційних характеристик.

На теперішній час виробництво фарби в промислових масштабах являє собою складний процес з використанням великої кількості різних штучних компонентів, багато з яких токсичні та шкідливі для здоров'я людей та навколишнього середовища. Акрилові фарби, подібно до інших водно-дисперсних фарб, можуть бути розведені водою. При розведенні водою акриловим фарбам можна придати іншого кольору при додаванні водних пігментних паст, але після висихання ці фарби мають бути стійкими до дії води.

На сьогоднішній день актуальним є створення нових рецептур акрилових лакофарбових матеріалів, які б задовольняли основні вимоги – екологічність, високий рівень декоративних і експлуатаційних властивостей, а також простоту в роботі.

Розроблена рецептура інтер'єрної фарби, в якості зв'язуючого було вибрано акрилову дисперсію марки jonkryl 8336 вітчизняного виробництва. Як наповнювач використовували оміакарб 5КА (тонкоподрібнений природний карбонат кальцію). В якості пігменту використовували оксид титану, також в рецептурі використовували піногасник byk-024. Додатками для стабілізації піни були: згущувачі целюлозний gomastyl wn700 та акриловий загущувач acrysol 825. Для мікробіологічного захисту використовували біоцид actacid mv.

Проведені дослідження по визначенню оптимального рецептурного співвідношення фарби зі збереженням відповідних фізико-механічних показників досліджуваних зразків інтер'єрної фарби.

## **ТЕХНОЛОГІЧНІ ОСОБЛИВОСТІ РЕЦЕПТУР БЕЗГЛЮТЕНОВИХ КОНДИТЕРСЬКИХ ВИРОБІВ**

Гусар А.О., Горах О.О.

e-mail: uunlovedt@gmail.com

*Херсонський державний аграрно-економічний університет,  
Україна, Кропивницький*

Одним з основних факторів актуальності теми безглютенової дієти є хвороба целиакія, на яку хворіють менш ніж один відсоток людей світу. Хвороба являє собою непереносимість пшеничного білка. Другим чинником є приріст інтересу користувачів інтернету до безглютену, за останні 5 років пошуковий запит зріс майже удвічі. Звісно, непереносимість глютену не могла так зрости, тому більш вагомою причиною, скоріш за все, є популяризація актуальності новітніх дієт та зниження якості продуктів харчування [1-3]. Деякі засоби масової інформації поширюють думки щодо великої кількості модифікації пшениці. Очевидним фактом є те, що люди, які самовільно перейшли на безглютенове харчування, помічають значні покращення здоров'я. Покращення як зовнішні так і внутрішні, також загальний емоційний стан в цілому описується позитивно, що дає основу для обговорення і поширення такої теми як безглютенове харчування, а актуальною метою харчових технологів стає розробка і збільшення асортименту даних продуктів харчування.

Традиційні кондитерські вироби виготовляють на основі пшеничного борошна і його похідних – клейковини та крохмалю. В ряду випадків достатньо замінити пшеничне борошно на рисове або кукурудзяне без будь-якої шкоди для смаку та якості виробу. Але якщо мова йде про вироби, де клейковина необхідна для особливої консистенції, то першим завданням є необхідність видозмінення рецептури. Тому що завдяки, як раз глютену звичайні борошняні кондитерські вироби набувають пишної та ніжної текстури. Зазвичай відсутність клейковини – компенсується збільшенням кількості яєць, якщо вони є в рецепті, додаванням кукурудзяного крохмалю, ксантанової камеді, агар-агару або пектину [4].

Створюючи кондитерські вироби без глютену, важливо проконтролювати те, щоб виключення із рецептури клейковини, як цінного рослинного білка, не потягло за собою збільшення кількості «пустих» калорій, яких у солодких виробах і так достатньо. Тому головним завданням і актуальною темою для харчової інженерії і самих технологів галузі є співпраця з спеціалістами – дієтологами, які знаються на збалансованих раціонах, які будуть максимально і правильно підбирати необхідні інгредієнти насичені вітамінами та мікроелементами.

Відомо, що під час виготовлення безглютенових кондитерських виробів, головним принципом є дотримання відсутності контакту з будь-

якими глютенними інгредієнтами та виробами. Так як це єдиний спосіб гарантувати відсутність глютену у продукті, що дає більш якісне і безпечне виробництво для споживачів. Основними продуктами для виготовлення кондитерських виробів повинні стати какао-боби, кокосовий горіх, рослинні вершки, фрукти та ягоди, рисове борошно та всі барвники з натуральних продуктів, так як вони дають більш яскраву барву, аромат та смак. Загусниками служать агар-агар із морських водоростей і пектин [4].

При дотриманні безглютенового виробництва можливо виробити дуже багатий асортимент солодоців, де замість пшеничного борошно в рецептуру було додано 1:1 рисове та кукурудзяне борошно. Так, наприклад, в Чехії на полицях звичайних супермаркетів можна знайти вже як готові вироби з поміткою «bezlepkové», а також упаковки з необхідними елементами рецепту і точною інструкцією для приготування виробу вдома як шоколадний торт виробника SEMIX, де замість звичайного пшеничного борошна до рецепту входить борошно рисове та пшеничний депротеїнізований крохмаль. Наприклад, італійський виробник Dr. Schär, який вже багато років спеціалізується на виробництві безглютенової продукції. Їх продукція доступна на полицях магазинів більш ніж 100 країн світу. Головними їх цінностями є відповідальність, прогрес та наближеність до споживача. Щодо українського ринку, то асортимент менш різноманітні, але натомість, українське кондитерське мистецтво в безглютеновому контексті процвітає, так в багатьох кондитерських великих міст України можна знайти абсолютно різні вироби від печива, до вишуканих тортів.

#### Література:

1. Горач О.О., Михалик К.В., Гусар А.О. Аналіз виробництва безглютенової продукції функціонального призначення на основі використання вітчизняної сировини / Таврійський науковий вісник, 2021. №6. С. 94-100. <http://dspace.ksau.kherson.ua/handle/123456789/7867>

2. Gorach O. Conceptual basis of the formulation of gluten-free products based on the use of domestic plant raw materials / Monografia. Moderní aspekty vědy: XXV. Díl mezinárodní kolektivní monografie / Mezinárodní Ekonomický Institut s.r.o.. Česká republika: Mezinárodní Ekonomický Institut s.r.o., 2022. p. 373-388.

3. Кіпіоро І.М., Гусар А.О., Горач О.О. Використання альтернативних видів сировини з метою розробки нових безглютенових рецептур. Таврійський науковий вісник. Серія: Технічні науки / Херсонський державний аграрно-економічний університет. Херсон : Видавничий дім «Гельветика», 2022. Вип. 5. С. 38-44.

4. Дорохович В.В. Безглютенові борошняні кондитерські вироби. Обладнання та технології харчових виробництв, 2013. С. 341-347.

## **ЗАСТОСУВАННЯ ПІРОЛІЗУ ДЛЯ ПЕРЕРОБКИ ПОБУТОВИХ ПОЛІМЕРНИХ ВІДХОДІВ**

Дудік Д.В., Андріянова М.В., Головенко В.О.

e-mail: holovenkovvv@gmail.com

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро*

Світове споживання пластикової продукції збільшується рік у рік. І разом із ним неухильно зростає обсяг пластикових відходів. Особливо складно з пластиковими пакетами, які буквально заповнили міста та природні зони. Відомі два основні методи ліквідації побутових відходів: захоронення на полігонах та спалювання. Найбільше розповсюдження в Україні отримав метод захоронення на полігонах 98% [1]. Що призводить до виведення на тривалий час великих ділянок землі та до значних витрат на проведення необхідних санітарно-епідеміологічних заходів. Найбільший недолік захоронення твердих побутових відходів на полігонах пов'язаний з небезпекою забруднення водяних горизонтів питної води.

Піроліз твердих полімерних відходів дозволяє не тільки вирішити питання їх ліквідації, але і отримати додаткове джерело сировини для нафтопереробної промисловості [2, 3].

Метою даної роботи є розгляд такого способу переробки та утилізації поліетиленових пакетів, як піроліз. Процес проводили при температурах 550, 600 та 650°C. При температурі 550°C деструкція полімеру майже не відбувається, вихід рідкого продукту складає всього 2,53% при цьому залишок має вигляд оплавленого поліетилену і складає 97,36%. При підвищенні температури до 600°C вдається піддати піролізу полімер майже на 50%, що забезпечує вихід рідкого продукту 44,12% та смоло подібного залишку 58,26%. Слід відмітити, що при даних температурах не виділяється газ піролізу. Найкраще процес проходив при температурі 650°C, що дозволило збільшити вихід піроконденсату до 72,06% та отримати невелику кількість газу 5, 23%, при цьому на залишок приходиться 19,32%.

### Література:

1. Стародубцева О.В. До рішення проблеми знешкодження твердих побутових відходів// Проблемы экологии. – 2004. – № 1-2. – С. 129-133.
2. Holovenko V.O., Andriianova M.V., Roienko K.V., Roienko Yu.S. Pyrolysis of solid polymer waste and properties of obtained products // Voprosy khimii i khimicheskoi tekhnologii. – 2022. - №4. – pp. 24-30.
3. Головенко В.О., Андріянова М.В., Роєнко К.В. Характеристика продуктів піролізу гуми/ Chemical technologies and engineering. Prague, Czech Republic March 12–13, 2021// Publishing House “Baltija Publishing”. С. 135-137.



## **МЕТОД ОТРИМАННЯ КОМПОЗИТА НА ОСНОВІ ФТОРПОЛІМЕРА З СРІБЛОМ**

Кабат О.С., Сула М.П.

e-mail: mnb472@ukr.net

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро*

На даний час існує кілька методів для покращення роботи обладнання. Найбільше розповсюдження набув метод модернізації вузлів тертя за рахунок заміни матеріалів пар тертя на більш сучасні. Одним із таких матеріалів є полімери по композити на їх основі.

На теперішній час серед полімерів найбільше розповсюдження у вузлах тертя набули фторполімери. Для покращення властивостей у їх склад вводять наповнювачі різної природи та морфології. В даній роботі в якості полімерної матриці було обрано політетрафторетилен, який наповняли дрібнодисперсним сріблом.

Методи введення дрібнодисперсного срібла у полімер можуть бути різні. Стандартний метод полягає у механічному змішуванні відбувається у спеціальних апаратах із швидкохідним змішувальним пристроєм.

До основних переваг такого методу слід віднести: простоту змішування, можливість досягнення різного ступеню перемішування матеріалів за рахунок регулювання швидкості обертання лопатей мішалки, тощо. До недоліків слід віднести складність при отриманні рівномірно розповсюдженого наповнювача у об'ємі полімеру.

Тому у даній роботі ми запропонували новий метод отримання полімерного композиту за рахунок *insitu* суміщення вихідних компонентів полімерної композиції у реакційному середовищі при синтезі дрібнодисперсного срібла із нітрату срібла.

Цей метод складається із декількох етапів:

- отримання водного розчину нітрату срібла;
- введення у отриманий розчин полімеру із подальшим перемішуванням тривалий час при високих обертах мішалки;
- синтез дисперсного срібла при додаванні міді у розчин нітрату срібла
- фільтрація та промивка отриманої системи від залишків солі, кислоти тощо;
- сушка отриманої полімерної композиції.

Полімерні композити, отримані за даною методикою мають значно кращу ступінь розподілення наповнювача у полімері, ніж при механічному перемішуванні. Це сприятиме кращому рівню їх фізико-механічних, теплофізичних та трибологічних властивостей, ніж отримані за стандартною методикою механічного перемішування.



## ОСОБЛИВОСТІ ВИКОРИСТАННЯ ХАРЧОВИХ ВОЛОКОН В ХАРЧОВІЙ ПРОМИСЛОВОСТІ

Коновалова І.С., Горач О.О.

e-mail: ikonovalova218@gmail.com

Херсонський державний аграрно-економічний університет,  
Україна, Кропивницький

Харчові волокна (клітковина) – це природний компонент їжі, який стійкий до дії амілази та інших ферментів, не перетравлюється ендogenousним шлунково-кишковим секретом і не всмоктується в тонкому кишечнику, впливаючи на процеси перетравлення і всмоктування поживних речовин [1]. Харчові волокна дуже корисні для організму людини, їх ділять на розчинні (пектин, камедь, слиз) та не розчинні (целюлоза, лігнін).



Рисунок 1 – Класифікація харчових волокон

Продукти, багаті розчинними волокнами, це – вівсянка, горіхи, бобові, яблука та чорниця. Доведено, їх позитивний вплив на організм людини, а саме на серцево-судинну систему, сприяють втраті ваги, від діабету, для здорової моторики кишечника. Нерозчинні харчові волокна. Продукти, багаті нерозчинними волокнами, це – насіння, шкірки фруктів, цільнозернове борошно та хліб, коричневий рис, морква, капуста, зелень. Позитивний вплив на здоров'я включає: втрату ваги, здорове травлення.

Існує багато класифікацій харчових волокон. За будовою полімеру вони поділяються на гомогенні (целюлоза, пектин, лігнін, альгінова кислота) і гетерогенні (целюлозний лігнін, геміцелюлозо-целюлозо-лігнін та та ін.). За видом сировини, з якої отримують харчові волокна, їх поділяють на харчові волокна нижчих рослин (водорості, гриби) і вищих рослин (злаки, трави, деревина); за фізико-хімічними властивостями - водорозчинні речовини. (пектин, камедь), розчинна геміцелюлоза, протопектин, лігнін, резистентний крохмаль) [1].

Харчові волокна мають позитивний вплив на здоров'я людини та сприяють нормалізації життєво важливих функцій організму. На рис. 2 наведено властивості харчових волокон.

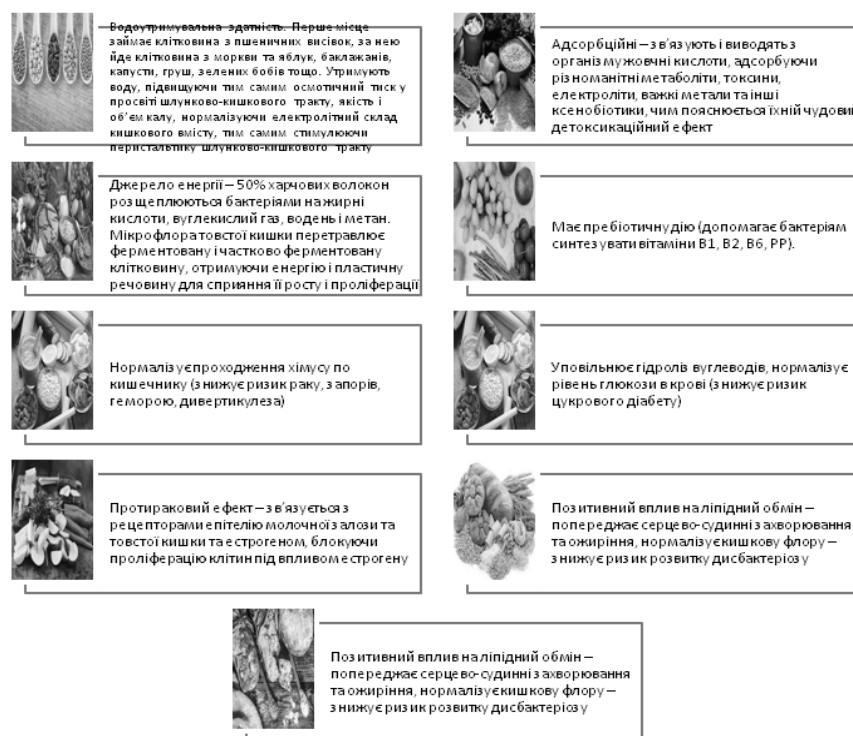


Рисунок 2 – Властивості харчових волокон

На основі проведеного аналізу застосування харчових волокон в харчовій промисловості, можна зробити висновок, про необхідність їх застосування, особливо при розробці функціональних рецептур, враховуючи широкий спектр корисного впливу їх на здоров'я людини. Потрібно відмітити, що харчові волокна є незамінними компонентами харчування, які містяться лише в сировині рослинного походження та відрізняються за складом та властивостями [2]. Розчинні волокна краще виводять важкі метали, токсичні речовини, радіоізотопи, холестерин. Нерозчинні волокна краще утримують воду, сприяючи формуванню м'якої еластичної маси в кишечнику і покращуючи її виведення. Рослинна сировина містить, як правило, харчові волокна різних видів. Тому актуальним завданням для харчової галузі є розробка рецептур та технологій з використанням харчових волокон в якості функціональних інгредієнтів.

#### Література:

1. Ільїна О. Харчові волокна – важливий компонент хлібобулочних та кондитерських виробів. // Хлібопродукти, №9. 2002. с. 34-367.
2. Gorach O. Conceptual basis of the formulation of gluten-free products based on the use of domestic plant raw materials / Monografia. Moderní aspekty vědy: XXV. Díl mezinárodní kolektivní monografie / Mezinárodní Ekonomický Institut s.r.o.. Česká republika: Mezinárodní Ekonomický Institut s.r.o., 2022. p. 373-388.

## **ВПЛИВ ЗОЛЬНОГО ПИЛУ НА ВЛАСТИВОСТІ ДЕРЕВИННО-ПОЛІМЕРНОГО КОМПОЗИТУ**

Криволапов Д.С., Романченко І.С., Баштаник П.І., Третьяков А.О.,  
Сухий К.М.

e-mail:bashtanyk@i.ua

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро*

Останнім часом на ринку будівельно-оздоблювальних матеріалів набувають популярність вироби з деревинно-полімерних композитів (ДПК) [1]. ДПК – це композит, який поєднує властивості як деревини (вироби можна обробляти такими ж методами, як і звичайну деревину), так і полімеру (матеріал піддається переробці у вироби, зокрема методом екструзії). ДПК використовуються в умовах дії вологи, температурних впливів, УФ випромінювання, а також механічного навантаження, а отже, оцінка якості продукції та порівняння різних типів виробів повинні проводитися з урахуванням усіх вказаних факторів [2].

Актуальною проблемою різноманітних технологій є використання вторинної сировини та відходів різних галузей виробництва. Так, використовуючи вторинні полімери, які наповнені побічними продуктами різноманітних галузей виробництва, можна отримувати нові композити із заздалегідь заданими властивостями. Одним із таких побічних продуктів є зольний пил, що утворюється в результаті спалення твердого палива на ТЕС, після чого уловлюється електрофільтрами і в сухому стані за допомогою пневмотранспорту надходить у силос-накопичувач [3].

Мета роботи полягала у дослідженні впливу використання у якості дрібнодисперсного наповнювача зольного пилу на фізико-механічні та експлуатаційні властивості ДПК на основі вторинного поліетилену високої густини.

У якості об'єкту дослідження був використаний композит із наступним складом: вторинний поліетилен високої густини – 30 мас. %; деревинне борошно – 54 мас. %; кальцит – 11 мас. %; поліетилен із вмістом 1-6 % прищепленого малеїнового ангідриду – 0,85 мас. %; поліетиленовий віск – 1,1 мас. %; стеаринова кислота – 1,1 мас. %, УФ стабілізатор та барвники – інше [4]. Для оцінки впливу зольного пилу на властивості даного композиту відбувалась часткова заміна кальциту на зольний пил у наступних пропорціях: зразок № 0 – кальцит – 11 мас. %, зола – 0 мас. %; зразок № 1 – кальцит – 8,25 мас. %, зола – 2,75 мас. %; зразок № 2 – кальцит – 5,5 мас. %, зола 5,5 мас. %; зразок № 3 – кальцит – 2,75 мас. %, зола – 8,25 мас. %; зразок № 4 – кальцит – 0 мас. %, зола – 11 мас. %. Результати дослідження наведено у табл.

Таблиця – Фізико-механічні властивості ДПК в залежності від вмісту зольного пилу

Властивості	Зразок				
	0	1	2	3	4
Густина, кг/м <sup>3</sup>	1234	1259	1275	1287	1294
Міцність при вигині, МПа	51,3	51,4	53,9	54,6	55,8
Ударна в'язкість за Шарпі (на зразках з надрізом), кДж/м <sup>2</sup>	11,9	6,9	5,4	5,1	5,1
Коефіцієнт лінійного термічного розширення, по довжині, 10 <sup>-5</sup> 1/С	4,90	2,65	2,55	2,50	2,30

Аналізуючи дані табл., можна констатувати, що заміщення кальциту зольним пилом підвищує міцність при вигині композиту (від 51,3 МПа до 55,8 МПа) та значно знижує коефіцієнт лінійного термічного розширення по довжині. Але при цьому дуже знижується ударна в'язкість за Шарпі ДПК. Таку тенденцію можна пояснити наповненням частками зольного пилу внутрішніх порожнин у композиті, про що свідчить зростання його густини. А зниження ударної в'язкості за Шарпі вказує на недостатній зв'язок на межі розподілу фаз «зольний пил – полімер».

Зниження ж коефіцієнту лінійного термічного розширення (по довжині зразка) у двічі дає можливість зробити висновок, що застосування зольного пилу у якості дрібнодисперсного наповнювача в деревинно-полімерних композитах дозволить отримувати вироби, які мають більш точні розміри в умовах великого розбігу температур експлуатації.

#### Література:

1. Коршун О.А., Романов Н.М., Наназашвили И.Х., Бикбау М.Я. Экологически чистые древеснонаполненные пластмассы // Строительные материалы. – 1997. – № 5. – С. 8-11.
2. Абушенко А.В., Воскобойников И.В, Кондратюк В.А. Производство изделий из древесно-полимерных композитов // Деловой журнал по деревообработке. – 2008. - № 4. – С. 88–94.
3. Drozhzhin V.S., Danilin L.D., Pikulin I.V. and etc. Functional Materials on the Basis of Cenospheres. 2005 World of Coal Ash Conference, April 11 15, 2005, Lexington, Kentucky, USA, pp. 117-118.
4. Криволапов Д.С., Сухий К.М., Баштаник П.І., Третьяков А.О., Безрукавий В.О. Дослідження впливу стеаринової кислоти на властивості деревинно-полімерних композитів // Питання хімії та хімічної технології. – 2023. – № 5. – С. 50-54.

## ГЕОМЕТРИЧНІ ФАЗОВІ ПЕРЕХОДИ В СУМІШІ ПОЛІМЕРІВ

Орешин П. В., Гаврилук Ю.В., Юрков К.Ю., Євдокименко Н.М.

e-mail: yuragavriluk@gmail.com

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро

Актуальною проблемою сучасною техніки є необхідність створення матеріалів з підвищеною зносо та абразивостійкістю. На основі суміші блок-кополіуретанів оптимальної морфології з промисловими термопластами було отримано результати, щодо створення нових композиційних матеріалів.

Завдяки комбінуванню різних за хімічним складом полімерів було отримано композити, які не тільки поєднують у собі властивості складових композиції, але й перевищують рівень фізико-механічними характеристик. Спостерігаємо синергію [1, 2].

Аналіз геометричних фазових переходів у задачах перколяції дозволив визначити будову блок-кополіуретанів, наприклад БПУ ОБГА<sub>500</sub>(55) – блок кополіуретан з еластичним блоком молекулярної маси 500, та вмістом гетерофази 40%.

Вивчали суміші блок-кополіуретанів: БПУ ОБГА<sub>500</sub>(55), БПУ ОЕГА<sub>2000</sub>(40), БПУ ОЕБГА<sub>2000</sub>(39), ООТМГ<sub>1000</sub>(48) з поліетиленом низької густини (ПЕНГ) марки 15803=020, поліетиленом високої густини (ПЕВГ) марки 277-73, суспензійним полістиролом марки ПСС-500 та ударотривким полістиролом УПМ-0508 (табл. 1).

Виявлено, що рівень властивостей суміші блок-кополіуретану з поліетиленом, або полістиролом, характеризуються зростанням рівня умовної міцності при розтягу та відносного видовження при розриві із збереженням величини інтенсивності зношування на задовільному рівні.

Таблиця 1 Склад та властивості суміші блок-кополімеру з термопластом (рівень властивостей суміші/рівень властивостей термопласту) [3, 4]

Показник	Дослід			
	1	2	3	4
Склад, мас. %				
БПУ ОБГА <sub>500</sub> (55)	90,0	-	-	-
БПУ ОЕГА <sub>2000</sub> (40)	-	90,0	90,0	90,0
ПЕНГ 15803-020	-	-	-	10,0
ПЕВГ 277-73	-	10,0	-	-
ПСС-500	-	-	10,0	-
УПМ-0508	20,0	-	-	-

Умова міцності при розтягу ( $f_p$ ), МПа	35,3/15,1	10,1/7,4	45,5/12,2	36,2/5,7
Відносне видовження при розриві ( $\epsilon$ ), %	937/4	1050/400	1150/3	1165/150
Температура розплаву (t), °C	(197±12)/ (205±25)	(185±5)/ (167±12)	(200±10)/ (190±30)	(177±12)/ (145±20)
Інтенсивність зношування (при терті без змащування: P=0,1 МПа, V=0,2 м/с) ( $I \cdot 10^4$ ), г/км	22/40	18/8	12/40	10/32

Оптимальний рівень властивостей мають суміші у випадку введення до складу БПУ 10÷20 мас. % поліетилену або 10 мас.% полістиролу. Виявлено кореляцію між деформаційно-міцносними характеристиками суміші БПУ з поліетиленом або полістиролом та триботехнічними властивостями. Максимальна зносостійкість реалізується під час збільшення еластичності.

Це підтверджує важливість деформаційної складової у процесах тертя та зношування сумішей, які досліджували.

#### Література:

1. Гулда Х., Тобочкин Я. Компьютерное моделирование в физике, том 1. – М.: Мир, 1989. – 400с.
2. Aksimentyeva O.I., Martyniuk G.V. Percolation phenomena in the polymer composites with conducting poloymer filters / Physics and Chemistry of solid state, 2021. Vol. 22. No. 4, P. 811-816. DOI: 10.15330/pcss.22.4.811-816.
3. Anisimov V.; Anisimov V. Linear block-polyurethanes with optimal molecular topology for tribotechnology. Voprosy khimii i khimicheskoi tekhnologii, 2020, 3, 20-25.
4. Anisimov V.; Anisimov V. Forecasting the properties of linear block-copoliurethanes based on oligoesters of regular structure. Voprosy khimii i khimicheskoi tekhnologii, 2021, 4, 4-10.



## **СУЧАСНІ ПІДХОДИ ДО ВИРОБНИЦТВА І ВИКОРИСТАННЯ ПЕТ ТАРИ ДЛЯ ХАРЧОВОЇ ПРОДУКЦІЇ**

Павлюк С.К., Суха І.В., Філінська А.О.

e-mail: Serpik07@ukr.net

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро*

Застосування ПЕТ тари, особливо переробленої, у харчовій галузі супроводжується певними ризиками для здоров'я споживачів. Вивченню міграції хімічних речовин з первинного і вторинного ПЕТ останнім часом приділяється значна увага. Результати досліджень повторного використання переробленої полімерної тари вказують на те, що вплив небезпечних хімічних речовин на людину збільшується, і має контролюватися належним чином. Використання ПЕТ пляшок з-під напоїв зросло завдяки їх повторному переробленню з впровадженням процесів знезараження для зменшення хімічного забруднення. Однак існують експериментальні докази того, що перероблений ПЕТ містить додаткові хімічні забруднювачі, які потрапляють в полімерний матеріал у процесі використання, обробки та перероблення відходів і можуть мігрувати в упаковані продукти [1].

В ПЕТ матеріалах, що контактують з харчовими продуктами, присутні олігомери, що пояснюється неповною полімеризацією або термічною чи гідролітичною деградацією полімерних ланцюгів при виробництві. Крім того, вони також можуть утворюватися під час використання та перероблення полімерів. В переробленому ПЕТ були виявлені лінійні та циклічні олігомери, переважно ди- та тримери. Підвищені кількості циклічних олігомерів спостерігали у ПЕТ, який піддавався повторній обробці до п'яти разів. Незалежно від походження олігомери можуть бути присутніми в матеріалі, що переробляється, і мігрувати в харчові продукти і напої. На сьогоднішній день не розроблено і не затверджено спеціального керівного документу щодо оцінювання ступеня негативного впливу олігомерів, відсутні прямі рекомендації з боку органів безпеки харчових продуктів по встановленню ризиків [2,3].

ПЕТ пляшки використовують для пакування питної води, безалкогольних, алкогольних і слабоалкогольних напоїв, молока, молочної продукції, оцту та ін. Для ПЕТ пляшок харчового призначення мають виконуватися токсикологічні дослідження, визначатися показники міграції хімічних речовин, які виділяються з тари. Серед них диметилтерефталат, формальдегід, ацетальдегід та ін. Вказані показники не повинні перевищувати величину допустимої кількості міграції (ДКМ). Насьогодні вітчизняні лабораторії виконують визначення показників міграції хімічних речовин, які виділяються з полімерних та інших матеріалів, що контактують з харчовими продуктами, за застарілими методиками.



Відповідно до Європейського регламенту (ЄС) № 1935/2004 про матеріали та вироби, призначені для контакту з харчовими продуктами, їх виготовлення має бути таким, щоб «за нормальних або прогнозованих умов використання вони не переносили свої компоненти в продукти у кількостях, які можуть поставити під загрозу здоров'я людини» [4]. Зараз спрямовуються зусилля на реалізацію Стратегії сталого розвитку ЄС у галузі хімічних речовин, яка орієнтована на видалення найбільш шкідливих хімічних речовин із споживчих товарів, у тому числі з матеріалів, що контактують із харчовими продуктами (FCM) [5].

Можна зробити висновок, що для вітчизняних виробників ПЕТ тари і первинної і вторинної (з різною часткою повторно переробленого ПЕТ матеріалу) актуальними є завдання з впровадження інноваційних технологій з попередньої підготовки сировини і виготовлення ПЕТ тари, технологічного контролю на всіх стадіях процесу, використання сучасних методів аналізу проміжних і кінцевих продуктів виробництва. Особливої уваги заслуговує питання розширення переліку хімічних речовин, міграцію яких необхідно досліджувати у різні харчові середовища, а також розроблення нормативної документації, гармонізованої з Європейськими регламентами.

#### Література:

1. Hazardous chemicals in recycled and reusable plastic food packaging / B. Geueke, D.W. Phelps, L.V. Parkinson, J. Muncke // Cambridge Prisms: Plastics, Vol. 1, 2023, e7.<https://doi.org/10.1017/plc.2023.7>

2. Evaluating the food safety and risk assessment evidence-base of polyethylene terephthalate oligomers: A systematic evidence map / V.N. Schreier, E. Çörek, Ch. Appenzeller-Herzog, B.J. Brüscheweiler, B. Geueke, M.F. Wilks, B. Schilter, J. Muncke, Th.J. Simat, M. Smieško, N. Roth, A. Odermatt // Environment International, Vol. 176, 2023, 107978. [doi.org/10.1016/j.envint.2023.107978](https://doi.org/10.1016/j.envint.2023.107978).

3. Food packaging in the circular economy: Overview of chemical safety aspects for commonly used materials / B. Geueke, K. Groh, J. Muncke // Journal of Cleaner Production, Vol.193, 2018, Pages 491-505. [doi.org/10.1016/j.jclepro.2018.05.005](https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2018.05.005).

4. EU, 2004. Regulation (EC) No 1935/2004 of the European Parliament and the Council of 27 October 2004 on materials and articles intended to come into contact with food. Official Journal of the European Union. (L 338/4), 1–14.

5. Implementing the EU Chemicals Strategy for Sustainability: The case of food contact chemicals of concern / L. Zimmermann, M. Scheringer, B. Geueke, J.M. Boucher, L.V. Parkinson, K.J. Groh, J. Muncke // Journal of Hazardous Materials, Vol. 437, 5 September 2022, 129167. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2022.129167>.

## ВИКОРИСТАННЯ АМІДІВ ЖИРНИХ КИСЛОТ РОСЛИННОГО ПОХОДЖЕННЯ У ЯКОСТІ ІНГРЕДІЄНТІВ ЕЛАСТОМЕРНИХ КОМПОЗИЦІЙ

Панфілова О.А., Півень М.В., Соколова Л.О., Овчаров В.І., Суха І.В., Черваков О.В.

e-mail: olexandra.panfilova@gmail.com

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро*

Ощадливе ресурсокористування є важливим кроком до екологізації виробництва та технологій. На часі гостро постає питання забезпечення маловідходного виробництва та утилізації відходів. Його вирішення наблизить виробництво до суттєвого ресурсозбереження.

Сучасні вимоги до збалансованого природокористування та захисту навколишнього середовища спонукають науковців та виробників до раціонального ставлення до сировинних потоків оліє жирової галузі України. Вітчизняна технологія очищення, зокрема соняшникової олії на стадії відбілювання та фільтрації (процес вінтеризації), передбачає щорічне отримання десятків тисяч тон небезпечного для довкілля відпрацьованого гідрофобізованого мінерального адсорбенту, який за своїм складом може бути потенційною сировиною при отриманні інгредієнтів для еластомерних композицій.

Командою авторів було виконано ряд досліджень щодо використання складників відходів виробництва соняшникової олії у складах еластомерних композицій у якості наповнювачів та технологічних добавок. Метою даної роботи є отримання із органічного складника відходу від виробництва соняшникової олії амідів жирних кислот та визначення їх функціональної дії як інгредієнтів еластомерних композицій.

Синтез амідів жирних кислот: олеаміду, моноетаноламиду (МЕАЖК), діетаноламиду (ДЕАЖК), виконано за відомими методиками. Визначення їх фізико-механічних характеристик здійснено різними інструментальними методами.

Наприклад, методом ІЧ-спектроскопії ДЕАЖК його структура підтверджено наявністю характерних смуг поглинання: широка інтенсивна смуга валентних коливань із максимумом  $3371\text{ см}^{-1}$  і смуга деформаційних коливань  $1051\text{ см}^{-1}$  ОН-груп; смуга валентних коливань  $\text{C}=\text{O}$   $1620\text{ см}^{-1}$  і  $1365\text{ см}^{-1}$  С-N-груп. Наявність смуги валентних коливань  $1343\text{ см}^{-1}$   $\text{C}=\text{O}$  складноетерних груп свідчить про присутність у суміші невеликої кількості вихідного тригліцериду.

Оцінювання впливу дослідних продуктів на формування комплексу властивостей еластомерних композицій проводилося в ненаповнених і наповнених гумових сумішах і вулканізатах модельного типу на основі

синтетичного нестереорегулярного за будовою бутадієн- $\alpha$ -метилстирольного каучуку марки СКМС-30 АРК за наявності дослідних продуктів у рівномасовому дозуванні 1,5 мас.ч. на 100,0 мас.ч. каучукової основи. Дослідження кінетики сірчаної вулканізації виконано на реометрі MDR 3000 Professional виробництва компанії MonTech Werkstoffprüfmaschinen GmbH (Німеччина) відповідно до міжнародного стандарту ASTM DIN 53529.

Встановлено, що процес зшивання за наявності амідів жирних кислот соняшnikової олії як органічних активаторів відбувається з меншим індукційним періодом, вищою швидкістю та меншою енергією активації відносно еластомерних композицій з відомою стеариновою кислотою, без реверсії при температурах 155 °С. За показником ефект Пейна показано позитивний вплив досліджуваних амідів жирних кислот на розподіл технічного вуглецю в гумовій суміші і зниження рівня в'язкісних характеристик гумових сумішей в результаті пом'якшувальної дії амідних похідних. Амідні жирних кислот в гумах забезпечують підвищений відносно дії стеаринової кислоти рівень показників модуль пружності при зсуві, модуль втрат при зсуві з одночасним зменшенням значення рівня показника тангенс кута динамічних втрат, доволі високий рівень фізико-механічних властивостей. Оптимальними властивостями володіли еластомерні композиції за наявності у складі сірчаної вулканізуювальної системи з ДЕАЖК.

Також було виконано комплекс досліджень по впливу дозування ДЕАЖК в межах 0,75-2,25 мас.ч. у складі еластомерних композицій із СКМС-30 АРК наповнених 40,0 мас.ч. технічного вуглецю марки N 300. Показано, що з підвищенням дозування ДЕАЖК як органічного активатора сірчаної вулканізуювальної системи зростає в 1,4-1,8 разів швидкість вулканізації, в 1,1-1,2 рази ступінь зшивання, багаторазово зменшується вміст вільної сірки в вулканізатах. Розподіл технічного вуглецю еластомерної композиції, що кількісно характеризуються ефектом Пейна ( $\Delta G'$ ), зберігається на рівні дії 1,5 мас.ч. стеаринової кислоти.

Тобто встановлено, що амідні жирних кислот на основі органічного складника відходу від виробництва соняшnikової олії слід віднести до перспективних технологічних добавок багатоцільової дії еластомерних композицій на основі дієнових каучуків.

Результати досліджень є певним внеском у розробку технологій отримання інгредієнтів еластомерних композицій на основі поновлюваної сировини рослинного походження, екологізацію виробництва соняшnikової олії.

## ВПЛИВ ХІМІЧНОЇ СТРУКТУРИ ФТОРПОЛІМЕРІВ НА ТЕМПЕРАТУРУ РОЗМ'ЯКШЕННЯ ПО ВІКА

Пікула І.І., Кабат О.С.

e-mail: I.Pikula54@gmail.com

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро

Полімерні матеріали є невід'ємною складовою із якої виготовляються велика кількість вузлів та деталей у сучасній техніці. Вони відрізняються від інших конструкційних матеріалів достатнім рівнем фізико-механічних та теплофізичних характеристик при цьому мають унікальну хімічну стійкість та можуть працювати у вузлах тертя без змащування [1]. Одними із найбільш розповсюджених полімерів є фторполімери. Завдяки своєму унікальному рівню хімічної та термічної стійкості, та можливості роботи у парах тертя без змащування вони знайшли широке використання у вузлах машин і механізмів, зокрема вузлах тертя [2].

В якості об'єктів досліджень були обрані наступні фторполімери: політетрафторетилен, кополімер тетрафторетилену з етиленом, полівініліденфторид (рис. 1).

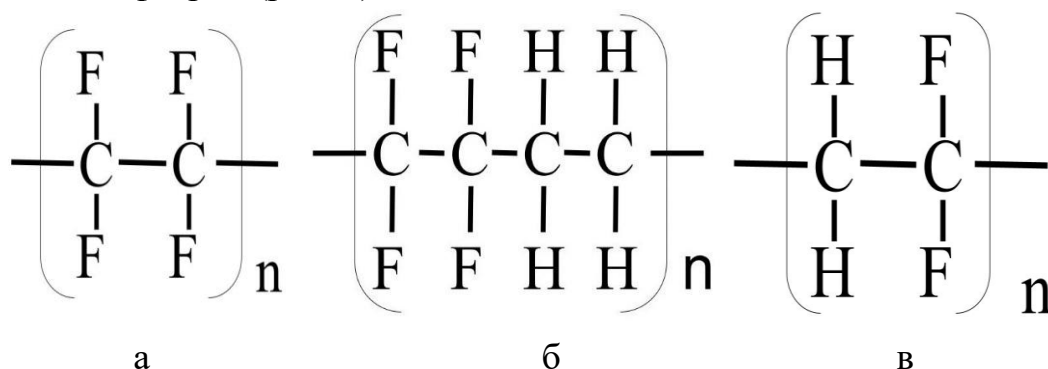


Рисунок 1 – Структурні формули фторполімерів: а – політетрафторетилен; б – кополімер тетрафторетилену з етиленом; в – полівініліденфторид

Досить часто виробниці із полімерів працюють при дії високого рівня температур. Тому являє зацікавленість визначити межові температури експлуатації виробів із них. Ці температури визначаються за температурою розм'якшення за методом Віка. Дослідження проводили згідно із ISO 11359-2 на машині VEB Thuringer Industriewerk Rauenstein FWV. Результати досліджень приведені на рисунку 2.

Згідно отриманих даних температура розм'якшення за Віка політетрафторетилену складає 164, кополімеру тетрафторетилену з етиленом 135, а полівініліденфториду 145°C.

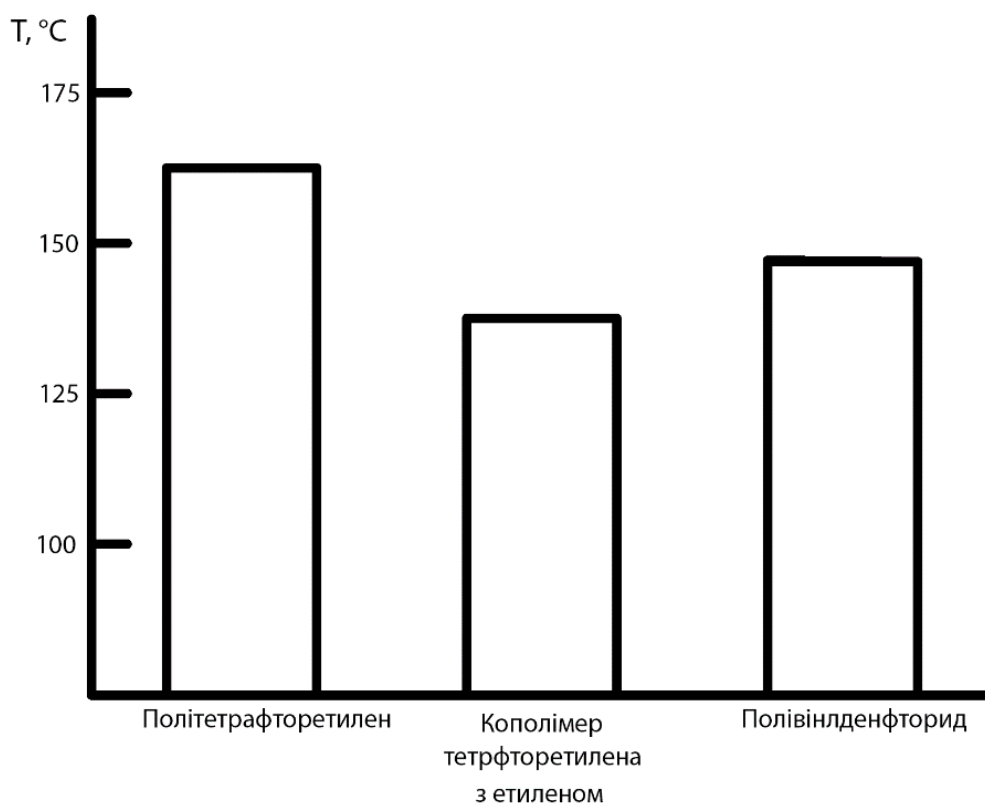


Рисунок 2 – Значення температури розм'якшення за Віка для досліджених фторполімерів

З отриманих досліджень можна зробити висновок, що деталі виготовлені із досліджених фторполімерів можуть працювати у вузлах машин і механізмів при температурах до 145°C, зберігаючи при цьому свою працездатність.

#### Література:

1. Kabat OS, Sytar VS, Derkach OD, Sukhyy KM. Polymeric composite materials of tribotechnical purpose with a high level of physical, mechanical and thermal properties. *Voprosy Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii*(in ukrainian). – 2021. – VOL. 15 (4). – P. 543-550
2. Polymeric composites of tribotechnical purpose based on fluoropolymers O.S. Kabat, O.D. Derkach, N.V. Pavlushkina, I.I. Pikula *Problems of Tribology*, 92 (2) (2019)75-81.

**ПИТАННЯ ЩОДО РОЗРОБКИ ПОЛІМЕРНИХ КОМПОЗИЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ ДЛЯ ОБЛАДНАННЯ МЕТАЛУРГІЙНИХ ПІДПРИЄМСТВ**

Поліщук Б.В., Ситар В.І., Матросов О.С.

e-mail: polischuk.boris@gmail.com

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро*

Важливою проблемою сьогодення є впровадження ефективних заходів зміцнення поверхневих шарів деталей, тому розробка полімерних композиційних матеріалів матиме потенційно значущий вплив на підвищення продуктивності металургійного виробництва та зменшення витрат на обслуговування обладнання. Метали та їх сплави відіграють роль основних матеріалів для вузлів тертя, але в останні роки вони активно витісняються різноманітними полімерними композиційними матеріалами. Зараз усі прикладні роботи направлені на досягнення придатних умов тертя і зношування матеріалів, на усунення патологічних процесів у зоні контакту, на різке зменшення величини зношування [1,2]. Також, необхідність дослідження зносостійкості деталей машин, технологічного обладнання витікає і з економічних витрат. Однією з найголовніших причин зношувальних відмов є власне зношування рухомих з'єднань машин, так втрати у наслідок зношення і тертя досягають 8% національного доходу високорозвинених країн. Прокатні або робочі кліті – основні технологічні машини станів, призначені для деформації металу поміж робочими валками, які найчастіше обертаються в зустрічних напрямках. В багатьох випадках надійність машин, як вказувалось вище визначається довговічністю пар тертя і для більшості видів технологічного обладнання і машин першорядне значення має підвищення зносостійкості деталей. Композиційні матеріали на основі термостійких полімерів, наповнених порошками та волокнами карбоновими матеріалами, надають таким твердим тілам унікальні властивості [2]. Отже, розробка термостійких полімерів для вузлів тертя прокатних станів є важливим кроком у напрямку розвитку екологічно чистих та ефективних технологій у металургії, інноваційним підходом спрямованим на оптимізацію роботи обладнання в умовах високих температур та інтенсивного тертя, підвищення стійкості вузлів тертя та зменшення впливу агресивних середовищ.

Література:

1. Hawk J.A. и др. Abrasive wear faibres// ASM Handbook. Materials Park, CH, ASM International. – 2002 (11), 906-921 с.
2. Sytar V., Burya A., Belyanovskaya E., Tomina A.-M Constructional materials based on graphite-filled. Phenylone / The Potential of Modern Science volume 3. London. - 2019 – 238-253 с.



## **ВПЛИВ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ РЕЧОВИН ПОРОШКУ М'ЯТИ НА ВЛАСТИВОСТІ ПШЕНИЧНОГО ХЛІБА**

Полодюк Р.І., Горач О. О.

e-mail: polodukruslan5@gmail.com

*Херсонський державний аграрно-економічний університет,  
Україна, Кропивницький*

Хлібобулочна продукція займає одну з провідних ланок у харчовій промисловості. І не дивно, оскільки борошняні вироби зажди складали помітну частину раціону українського суспільства. Дана галузь являється стратегічно важливою для країни, тому виробництво якісної продукції є головним завданням хлібобулочної промисловості. Як відомо, хліб та хлібобулочні вироби в першу чергу являються цінним джерелом вуглеводів. Так, калорійність хлібу на 100 г становить 242 ккал, з яких вуглеводи займають 48,8 г (78%), тобто третину від добової потреби організму. Хімічний склад хліба також характеризується наявністю білків та вітамінів групи В [1-2].

З харчової точки зору хліб являється одним із головних харчових продуктів. Він втамовує відчуття голоду, забезпечує організм енергією і чудово поєднується з іншими продуктами харчування. При цьому борошняні вироби являються однією з найпоширеніших груп товарів, які є доступними для усіх верств населення. Але попри всі свої достоїнства хліб має ряд недоліків, які тим не менш можна усунути шляхом його фортificaції. До основних недоліків борошняних виробів відносять наступні: висока калорійність, незбалансований амінокислотний склад та недостатню кількість вітамінів. Тому актуальним завданням є розробка функціональної продукції, яка б компенсувала ці недоліки. У якості добавки було обрано м'яту перцеву, яка є досить поширеною на території України та має багатий хімічний склад.

Головним компонентом у складі м'яти є ефірна олія, яка міститься у листках рослини. До складу олії входить ментол, дипентен, флавоїди, урсолова та олеїнова кислоти, бетаїн, каротин та дубильні речовини. Вітамінний склад м'яти представлений вітамінами А, С та групи В, які містяться у рослині у значних кількостях. При цьому, сушена м'ята містить значно більшу їх кількість, ніж свіжа. Також рослина має багатий мінеральний склад [3]. Хімічний склад м'яти обумовлює і її лікувальні властивості. Наприклад, ментол володіє заспокійливою дією та позитивно впливає на процеси травлення. Він покращує апетит, стимулює моторну активність кишечника та згубно діє на патогенну мікрофлору [3]. Загалом, м'ята має широкий спектр корисних властивостей, до яких відносяться спазмолітична, антисептична, жовчогінна, седативна, знеболююча та інші дії. Завдяки цьому м'яту використовують як засіб проти нудоти, метеоризму, безсоння, неврозх тощо [3]. Сукупність саме таких ознак



роблять рослину цінною сировиною для покращення якості хліба. Найдоцільнішим способом використання м'яти є її сушіння з наступним розмелюванням до порошкоподібного стану. Це обґрунтовано тим, що у сушеному вигляді збільшується її вітамінний та мінеральний склад, що проілюстровано на рисунку (рис. 1).



Рисунк 1 – Порівняння вітамінного складу свіжої та сушеної м'яти

Для пробного випікання м'ята використовувалася у вигляді порошку. Установлено, що оптимальним вмістом добавки є 2-3 % від маси борошна, що склало 7 г на 350 г сировини. Хліб готувався безопарним способом, згідно якого процес бродіння складає 120 хв. Тістова заготовка з вмістом порошку м'яти 3 % дещо швидше піднялася у порівнянні з контрольним зразком. При цьому відмічається покращення формостійкості заготовки. Процес бродіння склав 110 хв, що свідчить про незначну інтенсифікацію даного процесу. Готовий виріб мав слабо виражений аромат м'яти, який не перебивав основний і навіть доповнював його. Запах ментолу наділяє хліб заспокійливою дією та стимулює виділення слини, покращуючи апетит та травлення. Таким чином, використання м'яти у технології хліба є доцільним, оскільки збагачується склад виробу і він отримує лікувальні властивості.

#### Література:

1. Gorach O. Conceptual basis of the formulation of gluten-free products based on the use of domestic plant raw materials / Monografia. Moderní aspekty vědy: XXV. Díl mezinárodní kolektivní monografie / Mezinárodní Ekonomický Institut s.r.o.. Česká republika: Mezinárodní Ekonomický Institut s.r.o., 2022. p. 373-388.

2. Горач О.О. Обґрунтування інноваційних технологій функціональних рецептур. Таврійський науковий вісник. Серія: Технічні науки / Херсонський державний аграрно-економічний університет. Херсон: Видавничий дім «Гельветика», 2022. Вип. 6. С. 52-58.

3. Гродзінський А.М. Лікарські рослини. Енциклопедичний довідник/ за ред. А.М. Гродзінського. Київ. Головна редакція української радянської енциклопедії імені М.П. Бажана, 1991. С. 225-226.

## **ПОЛІМЕРНІ ПЛАСТИЗОЛІ, ЩО МОДИФІКОВАНІ ПОЛІМЕРНИМИ ІОННИМИ РІДИНАМИ**

Свердліковська О.С., Потапчук М.О.

e-mail: o.sverdlikovska@gmail.com

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро*

Останнім часом, в науковому та виробничо-практичному просторі, спостерігається стрімкий ріст зацікавленості у антикорозійних, ущільнювальних, абразивстійких, протишумових та ізоляційних покриттях. Такими покриттями можуть виступати достатньо відомі пластизолі – дисперсії частинок полімерів у рідкому пластифікаторі. Вони стали проблемою, оскільки міграція пластифікаторів з цих прокладок у харчові продукти часто значно перевищує допустимі норми в Європі.

Скляні банки з металевими закручувальними кришками використовуються для широкого спектру продуктів. Кришки прилягають до скляного обідка за допомогою прокладок з пластифікованого полівінілхлориду.

Серед значної кількості різних відомих пластизолей, досить популярними стали такі покриття як пластизолі, що зазвичай містять 25-45% пластифікатора, найчастіше епоксидовану соєву олію і фталати (діізодецилфталат, діізонафталат або ди(2-етилгексил)фталат), а також себакати, ди(2-етилгексил)адипат, епоксидована лляна олія, ацетилтрибутилцитрат і ацетильовані моно-/дигліцериди.

Висока міграція епоксидованої соєвої олію спостерігається для продуктів харчування, консистенція яких дозволяє контактувати з кришками і які містять щонайменше 4% вільної олії або жиру. Міграція може бути високою навіть з меншим вмістом жиру, якщо продукт був сильно нагрітий після наповнення, як це характерно для дитячого харчування (з вмістом жиру 1-2%). Менше 3 мг/кг епоксидованої соєвої олію було виявлено у водних продуктах, таких як джем, мед, спаржа і соління, а також у продуктах, що не контактують з кришкою, таких як гірчиця або твердий майонез.

Крім того, вони містять антифрикційні речовини, зазвичай олеамід і ерукамід, стабілізатори полівінілхлориду, такі як кальцієві/цинкові солі жирних кислот або епоксидовану соєву олію, мастила, такі як силікон або парафінова олія, пігменти (оксид титану) і іноді піноутворювачі, такі як азодикарбонамід або бікарбонат. Але полівінілхлорид-пластизолі мають і недоліки, такі як відносна не екологічність матеріалу, низька теплостійкість, втрата захисних та діелектричних властивостей при низькій та високій температурі відповідно.

Тому питання створення і застосування полімерних пластифікаторів на сьогоднішній момент надзвичайно актуальна, що пояснюється двома

факторами: екологічним і сировинним. Найбільш перспективними в якості модифікаторів є полімерні іонні рідини з прогнозованими властивостями для певних застосувань. Керувати функціональними властивостями дозволяє зміна складу, морфології, надмолекулярної структури і технологія одержання полімерних композиційних матеріалів.

Метою роботи є розробка методів створення пластизолей, що модифіковані полімерними іонними рідинами, з регульованими фізико-механічними та експлуатаційними характеристиками для консервної кришки харчового призначення. Розробка полімерних іонних рідин та іонних рідин іоненового типу з заданими функціональними властивостями дозволяє реалізувати їх корисні якості і здійснити спрямований вплив на процеси структуроутворення і створення якісно нових фізико-механічних та експлуатаційних характеристик полімерних пластизолей, визначення яких є необхідним для науково-обґрунтованого підходу до регулювання параметрів таких полімерних композиційних матеріалів та практичного застосування.

Розроблено технології отримання нових полімерних композиційних матеріалів, встановлено закономірності впливу будови полімерних іонних рідин на експлуатаційні властивості полімерних пластизолей, а також встановлено закономірності технологія–властивості, що дозволяє отримати полімерні композиційні матеріали з прогнозованим складом, фізико-хімічними та функціональними властивостями.

Основні наукові результати, отримані при виконанні роботи та комплексний науково-методичний підхід встановлення кореляційних залежностей між хімічною будовою полімерних іонних рідин та фізико-механічними властивостями полімерних композиційних матеріалів є науковим підґрунтям створення теоретичних і експериментальних основ керованої технології створення полімерних пластизолей із прогнозованою структурою, фізико-механічними та функціональними властивостями, а також визначення можливих шляхів їх практичного застосування є необхідною ланкою у вирішенні питання міграції пластифікатору у продукти харчування та науковим підґрунтям розробки процесів модифікації та створення нових полімерних пластизолей з регульованими властивостями для консервної кришки харчового призначення, що дозволяє сформулювати і доповнити гіпотези і теорії існуючих уявлень наукового напрямку у сфері іонних рідин, композиційних матеріалів на їх основі для отримання нових знань.

## **ВПЛИВ РІЗНИХ ФАКТОРІВ НА МОЛЕКУЛЯРНУ МАСУ ПОЛІМЕРНИХ ІОННИХ РІДИН**

Свердліковська О.С., Вовчук Б., Потапчук М.О.

e-mail: o.sverdlikovska@gmail.com

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро*

Досліджено вплив різних факторів на в'язкість полімерів, таких як концентрація вихідних мономерів, температура і час проведення реакції синтезу полімерних іонних рідин. Це дозволило удосконалити науково-методичний підхід до синтезу полімерних іонних рідин за реакцією взаємодії між одержаними третинними діамінами і дигалогенідами.

Згідно з літературними даними, синтез полііоненів реакцією поліконденсації третинних діамінів можна здійснювати в органічних розчинниках, у сумішах органічний розчинник–вода, органічний розчинник–етанол та органічний розчинник–метанол. Це пов'язано з розчинністю вихідних мономерів, полімерів та впливом розчинника на швидкість реакції утворення полімеру.

Попередні дослідження реакцій утворення полііоненів у різних розчинниках на молекулярну масу синтезованих полімерів суттєво впливає температура, час, реакційна здатність і концентрація вихідного мономеру. Раніше було встановлено, що реакцію великих концентрацій третинних діамінів з дигалогенідами може відбуватися при температурі від 25°C до температур кипіння розчинника, а час реакції коливається в межах 100-1100 годин. Автори цих робіт також пропонують варіювати концентрацію мономерів (залежно від їх будови і реакційної здатності) в діапазоні 0,1–2,5 моль/л для отримання полііоненів з більшою молекулярною масою.

Раніше також було встановлено, що максимальна молекулярна маса полімерних іонних рідин досягається за температури 60°C.

Синтез полімерних іонних рідин було запропоновано проводити за реакцією Меншуткіна у розчиннику змінного складу етанол–вода при початковому співвідношенні 60:40 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 полімерних іонних рідин з аліфатичними радикалами з найбільшою молекулярною масою становила 0,3 моль/л, а для полімерних іонних рідин з алкілароматичними радикалами з найбільшою молекулярною масою – 0,5 моль/л.

## СИНТЕЗ ДИМЕРНИХ ІОННИХ РІДИН ІОНЕНОВОГО ТИПУ

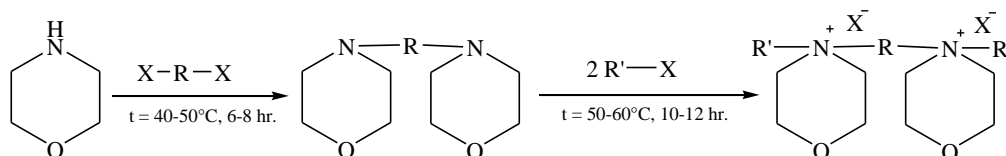
Свердліковська О.С., Черваков О.В., Буркевич Б.В., Панасенко Є.А.

e-mail: o.sverdlikovska@gmail.com

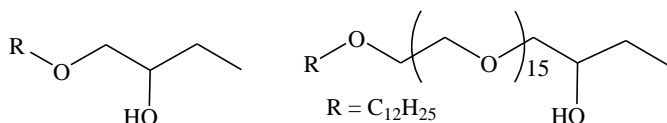
ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро

Раніше встановлено, що введенням алільних і  $\beta$ -гідроксиетильних груп до четвертинного атома нітрогену, наявністю дибензильних фрагментів при катіонному центрі та радикалів алкілароматичної будови можна отримати полімерні іонні рідини іоненового типу з низькою температурою склування та високою іонною провідністю.

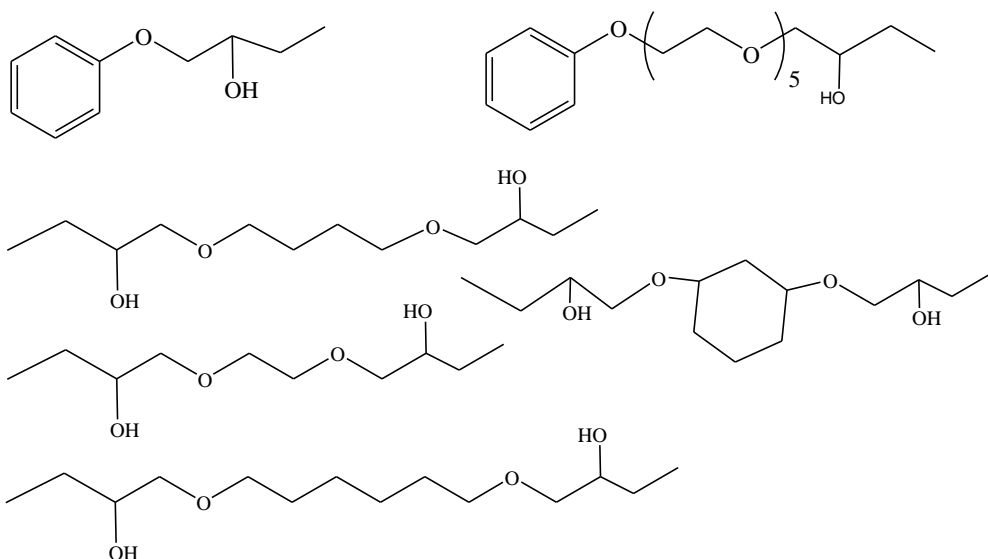
У даній роботі отримано новий тип димерних іонних рідин іоненового типу. Синтез димерних іонних рідин іоненового типу проводили за реакцією Меншуткіна за температури 50-60°C протягом 10 годин за загальною схемою



where  $R' =$



$R = C_{12}H_{25}, C_{13}H_{27}$



$X=Cl$

Отримано низку нових експериментальних даних про вплив будови димерних іонних рідин іоненового типу на їх фізико-хімічні властивості, що є основою методології синтезу високомолекулярних іонних рідин.

## **ВИЗНАЧЕННЯ МЕЖІ СУМІЩЕННЯ АРОМАТИЧНИХ ПОЛІАМІДІВ З ЛІНІЙНИМИ ОЛІГООРГАНОСИЛОКСАНАМИ**

Ситар В.І., Кабат О.С., Кудрявцев Ю.О., Назаренко А. М.

e-mail: v.sytar@ua.fm

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро*

Термостійкі ароматичні поліаміди відрізняються високим рівнем показників механічних та теплофізичних властивостей і являються перспективною основою для розробки композиційних матеріалів конструкційного призначення.

Однак висока в'язкість розплаву створює значні перешкоди для переробки їх у виробі прогресивними методами і обмежується компресійним пресуванням. Модифікації їх кремнійорганічними сполуками сприяє зменшенню в'язкості розплаву майже на порядок.

Уявляє інтерес дослідження впливу природи кремнійорганічних модифікаторів на їх структуру і властивості. В якості останніх вибрані лінійні органосилоксани, що відрізняються хімічною будовою молекул. Проведені дослідження свідчать про те, що введення органосилоксанів у склад ароматичних поліамідів суттєво впливає на їх властивості. Тому особливий інтерес викликає визначення межі сумісності у системі ароматичний поліамід – кремнійорганічний модифікатор.

Термодинамічна теорія суміщення направлена на визначення взаємної розчинності полімерів та параметрів, що кількісно відображають їх спорідненість. Виходячи з цього необхідно здійснювати пошук зв'язку між співвідношенням компонентів і показниками властивостей одно і двохфазних сумішей полімерів. Таким чином, про перехід з одної системи в іншу можна судити по закономірності зміни властивостей в залежності від складу системи.

Проведені дослідження свідчать про те, що введення модифікаторів у склад ароматичних поліамідів сприяє, до певної межі, підвищенню показників властивостей. Максимальні значення вони досягають в області складів, що відповідають межевому співвідношенню компонентів. Подальше збільшення вмісту модифікаторів приводить до розшарування системи і появленню гетерогенної фази в об'ємі полімеру.

Введення модифікаторів у склад ароматичних поліамідів і вивчення характеру суміщення компонентів дозволяє отримати композиційні матеріали з високим рівнем показників міцності і проводить до суттєвого зменшення в'язкості розплаву.



## **ЗАСТОСУВАННЯ ПІРОЛІЗУ ДЛЯ ПЕРЕРОБКИ БІОМАСИ**

Скрипкіна М.Д., Коваль Д. С., Андріянова М.В., Головенко В.О.

e-mail: holovenkovvv@gmail.com

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро*

Листя є одним з найбільш доступних видів біомаси. При цьому, щороку величезна кількість листя осипається з дерев, що створює певні незручності, а саме: великі купи з сухого листя можуть легко займатися, провокуючи пожежонебезпечні ситуації; тривале перебування під впливом опадів здатне підвищувати ризик забруднення навколишнього середовища; затримуючись в пристовбурних кіл дерев, щільні шари листя перетворюються в субстрат для грибкових інфекцій і комах-шкідників.

Піроліз є одним з методів переробки біомаси в енергію та хімічні речовини, може бути використаний для вирішення проблеми накопичення відходів. Наприклад, листя може бути зібране з вулиць та парків та перероблене з використанням процесу піролізу. Це дозволить зменшити кількість відходів та зменшити негативний вплив на довкілля. Під час піролізу біомаси, зазвичай, використовують температуру від 400 до 650°C. Досить велика кількість досліджень проведена по переробці біомаси у рідке паливо та хімікати.

В даній роботі провели піроліз опалого листя в інтервалі температур 350-650°C. Встановлено, що максимальний вихід рідкого продукту спостерігається при температурі 550°C, було отримано наступні продукти: газу піролізу – 25,67% мас., піроконденсат – 35,17% мас. та залишок – 39,16% мас. Подальше підвищення температури призводить до зниження виходу рідкого продукту та збільшенню виходу газу

Отриманий піроконденсат, представляє собою коричневу рідину з характерним запахом, густиною 1037,1 кг/м<sup>3</sup> та молекулярною масою 784,21 г/моль. Продукт досить нестійкий, що пояснюється вмістом ненасичених. Це призводить до його осмолення з часом та підвищення густини до 1037,7 кг/м<sup>3</sup> та молекулярної маси до 983,52 г/моль. Подальша переробка піроконденсату може здійснюватись по технологічним схемам переробки кам'яновугільних смол. Газ що утворюється під час піролізу є горючим, що дає змогу його використовувати як паливо для самого процесу піролізу при проектуванні установок для утилізації опалого листя. Також слід приділити увагу залишку, який утворюється під час піролізу. Дослідження активності вугілля, що утворюється дає підстави для використання його в якості адсорбенту.



## **БІОДЕГРАДАБЕЛЬНИЙ ПОЛІМЕР НА ОСНОВІ ПОЛІВІНІЛОВОГО СПИРТУ ТА КРОХМАЛЮ**

Стельмащук В.М., Кабат О.С.

e-mail:vladstelmaschuk2003@gmail.com, amber\_UDHTU@i.ua

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро*

Проблема захисту навколишнього середовища на сьогодні набуває глобального характеру, зокрема, серйозне занепокоєння викликає швидке й практично некероване зростання споживання синтетичних полімерів у багатьох галузях виробництва, що призводить до різкого збільшення відходів. Як наслідок, питання підвищення якості, надійності та довговічності одержуваних з них виробів, їх утилізації після закінчення терміну експлуатації мають істотне значення. Одним із найприйнятніших способів вирішення таких питань є використання біодеградабельних матеріалів. Отож створення та дослідження нових біодеградабельних полімерних матеріалів - важлива й актуальна задача.

Одним із методів створення біодеградабельних полімерних композиційних матеріалів (ПКМ) є суміщення неорганічних та органічних полімерів. Неорганічний полімер виконує роль матриці, вироби з якої мають високий рівень експлуатаційних властивостей, а органічний є чинником, який пришвидшує їх деструкції та покращує асиміляцію у навколишнє середовище.

В якості неорганічного полімера було обрано полівініловий спирт (ПВС), який добре розчиняється у водному середовищі та має схильність до руйнування під дією мікроорганізмів. Здатність ПВС розкладатися під дією мікроорганізмів різко збільшується при введенні у полімерну матрицю полісахаридів. Тому в якості органічного полімеру нами було обрано полісахарид крохмаль, який здатен покращити фізико-механічні та теплофізичні властивості ПВС.

Суміщення водяного розчину ПВС із крохмалем відбувалося в апараті з механічною швидкохідною мішалкою лопатевого типу. Якість суміщення оцінювали візуально. Отримання плівок із розробленого матеріалу відбувалося наливним способом на скляній поверхні з подальшою обробкою при температурі 60°C у термошафі. Зразки для досліджень мали форму прямокутника з розмірами 10×50 мм. Біодеструкція зразків відбувалася у відкритому ґрунті. Дослідження властивостей зразків після експозиції у ґрунті відбувалося за допомогою візуального (на оптичному мікроскопі МБР-1Е) та фізико-механічного методу (визначення міцності при розтягуванні на розривній машині F-1000). Обробка кукурудзяних зерен розробленим матеріалом відбувалася крапельним шляхом. Їх пророщування та зріст відбувався у кімнатній теплиці ТКР-1 при температурі 25-27°C та відносній вологості 80-90% .

Для подальших досліджень було обрано два напрямки використання розробленого ПКМ: в якості матеріалу для пакувальної тари; в якості матеріалу для обробки зерен сільськогосподарських культур.

#### Матеріал для пакувальної тари

Сучасний матеріал для пакувальної тари повинен задовольняти наступним вимогам: бути дешевим, міцним та легко підлягати деструкції під дією мікроорганізмів. Розроблений матеріал на основі ПВС та крохмалю складається з дешевих та недефіцитних компонентів, виробу з якого отримують по простій технології. По міцністним властивостям він знаходиться на рівні сучасних матеріалів з яких виготовляють пакувальну тару (поліетилен, поліпропілен та інші). Схильність розробленого матеріалу до біодеструкції визначали за результатами міцністних досліджень.

Аналіз отриманих даних свідчить про те, що зі збільшенням терміну експозиції міцність при розтягуванні зразків з розробленого ПКМ зменшується. Це є наслідком протікання деструктивних процесів полімерних плівок під дією мікроорганізмів. Про їх наявність і кількість свідчать дані оптичних досліджень поверхонь зразків після деструкції у ґрунті протягом визначеного терміну експозиції.

#### Матеріал для обробки зерен сільськогосподарських культур

Розроблений матеріал розкладається під дією мікроорганізмів на з'єднання, які здатні виконувати функцію добрив при вирощуванні сільськогосподарської продукції. Для реалізації цього ефекту зерна кукурудзи обробляли ПКМ на основі ПВС та крохмалю. Відповідно до проведених досліджень встановлено, що зерна оброблені розробленим ПКМ швидше проросли та побіги з них більш інтенсивно розвивалися ніж не оброблені.

Розробили біодеградабельний ПКМ на основі ПВС і крохмалю та дослідили два напрямки його використання в якості матеріалу для пакувальної тари та для обробки зерен сільськогосподарських культур. Встановили, що розроблений матеріал по міцністним властивостям не поступається матеріалам з яких виготовляють пакувальну тару (поліетилен, поліпропілен та інші). Встановили, що зерна кукурудзи, оброблені розробленим біодеградабельним ПКМ швидше проростають та дають більш сильні побіги ніж не оброблені.

## **КОМПЛЕКСНА ТЕХНОЛОГІЯ ПЕРЕРОБКИ РІДКИХ ВІДХОДІВ СПИРТОВОГО ВИРОБНИЦТВА**

Стоялівська Д. В., Буденкова Н.М., Корчик Н.М.

e-mail: n.m.budenkova@nuwm.edu.ua

*ВСП «Рівненський технічний фаховий коледж Національного університету водного господарства та природокористування»,  
Україна, Рівне*

Основним відходом спиртового виробництва, який в багато разів перевищує вихід цільового продукту, є мелясна барда, кормова цінність якої складає – 25-30% від кормової цінності того зерна, що застосовується для виробництва етанолу. Натуральна барда не придатна для зберігання з причини її скорого закисання, а також значних витрат на транспортування її до місць споживання. Утилізація барди, особливо в літній період, є серйозною екологічною і економічною проблемою, тому актуальною є задача розробки технологій переробки та утилізації відходів спиртового виробництва, з можливим використанням утворених, в результаті переробки, осадів як цінних агродобавок.

В світовій практиці застосовується, як правило, технологія упарювання барди на випарних станціях. Однак вартість випарних станцій і відповідно всього обладнання для утилізації, досить висока (більше 3 млн євро). Процес випарювання потребує значних енергетичних витрат, а також не повністю вирішує екологічні проблеми. Все це негативно відображається на собівартості готового продукту – сухої барди. Зниження собівартості можна досягнути заміною випарювання, технологією аеробної мікробіологічної переробки барди з одержанням концентрованих кормових дріжджів. Але діючі підприємства, що застосовують дану технологію, мають проблему неефективного обладнання, яке потребує значних енергетичних витрат. Таким чином, основною проблемою для підприємств, плануючих будівництво ліній з переробки барди, є вибір оптимального технологічного процесу. Метою досліджень була розробка технології переробки рідких відходів після спиртового виробництва, з можливістю використання утвореного в результаті оброблення осаду, як цінного добрива.

Для дослідження використовувалась післяспиртова барда складу: ХСК – 62 000 мгО<sub>2</sub>/л, БСК (біохімічне споживання кисню) 35 796 мг О<sub>2</sub>/л, рН 5,5–7, Eh 50 мВ, Cl<sup>-</sup> – 744 мг/л, завислі речовини – 3600 мг/л, Са<sup>2+</sup> – 1400 мг/л, SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> – 1600 мг/л. Для дослідження окисно-відновних параметрів застосований потенціометричний метод аналізу. Для визначення значень ХСК та БСК, хлоридів, кальцію, сульфатів досліджуваних розчинів, застосовувались титриметричні методи аналізу.

В основу запропонованої комплексної технології переробки рідких відходів спиртового виробництва покладено наступні етапи: попередня

підготовка розчину методом центрифугування для укрупнення і відділення основного колоїду від суміші та фільтрування; вилучення масел та інших органічних сполук шляхом утворення колоїду органічно-сульфатних комплексів феруму (III) та їх співоасдження сульфатом кальцію при значенні рН 7,2; вилучення залишкових концентрацій органічних сполук додаванням гашеного вапна до значення рН 8,9-9,5; біологічне очищення.

Фізико-хімічна особливість процесу очищення запропонованої комплексної технології полягає у використанні в якості коагулянту та окислювача спецреагенту, який попереду готується у рохрахунку на 50 л води 5,5 кг  $FeSO_4 \cdot 7H_2O$  та 3,5 кг  $NaClO$ . Активний хлор, що утворюється за реакцією:  $2FeSO_4 + 2NaOCl + 2H_2O \rightarrow 2FeOHSO_4 + Cl_2 + 2NaOH$  окислює органічні речовини барди.

На першому етапі барду направляють на центрифугування для укрупнення і відділення основної зависі. Після фільтрування одержуємо вологий осад (28% від об'єму), який можна направляти на корм тваринам чи застосовувати, як органічне добриво. На другому етапі вилучаються органічні речовини. Для цього на  $1m^3$  барди додавався попередньо одержаний спецреагент [1]. Після перемішування протягом 20-ти хвилин додається 6 кг вапняного молока до значення рН 7,2, при цьому співосаджуються сульфатно-органічні комплекси  $Fe^{3+}$ . Після відстоювання і фільтрування осад (8% за об'ємом), що містить кальцію сульфат, можна утилізувати як органічне добриво, особливо на кислі ґрунти.

На третьому етапі до фільтрату додається вапно до значення рН 8,9-9,5 до повного осадження ферум (III) гідроксиду, далі розчин барботується повітрям до зниження рН до 8 за рахунок утворення гідрогенкарбонатів, після чого прозорий розчин йде на біологічне доочищення. Зменшується собівартість очищення спиртової барди порівняно з традиційною технологією на 40%, є можливість доочищення біологічними методами. Додавання для інтенсифікації процесу силікату натрію різко посилює флокулюючий ефект [2]. У роботі розглянуто та запропоновано технологічну схему для переробки післяспиртової барди з утворенням органічного добрива для кислих ґрунтів. В запропонованої технології для кожного технологічного процесу обґрунтовані оптимальні параметри (значення рН, Eh, співвідношення реагентів).

#### Література:

1. Yatskov M., Korchyk N., Budenkova N., Kyrylyuk S., Prorok O. Development of technology for recycling the liquid iron-containing wastes of steel surface etching. Eastern-European Journal of Enterprise Technologies, 2017, 2/6 (86). P. – 70–77.

2. Спосіб очищення рідких відходів спиртового виробництва (барди). Патент № 87191 С123/10(2007/1), опубл.2009 р.

## **РОЗРОБКА ВИХРОВОГО АБСОРБЕРА ОЧИЩЕННЯ КОКСОВОГО ГАЗУ**

Тимохін Є.С., Маковецький Д.О., Белянська О.Р.

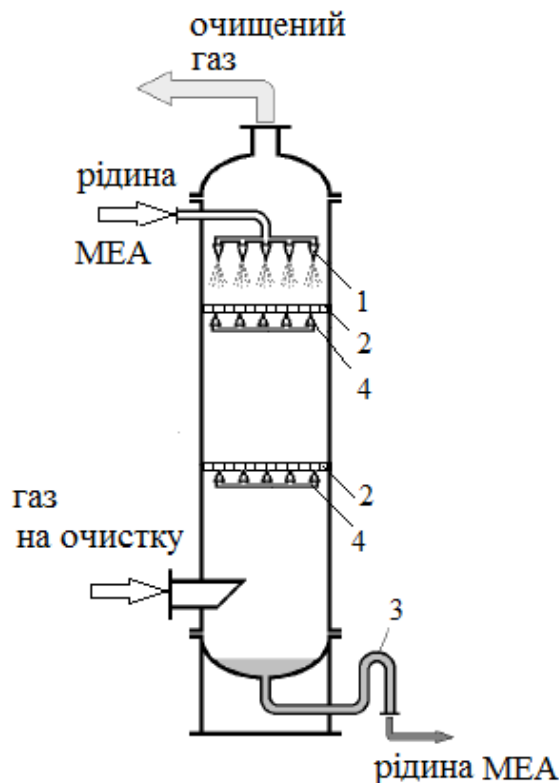
e-mail: belyans@ukr.net

*Дніпровський державний технічний університет,  
Україна, Кам'янське*

Найбільш перспективним способом вдосконалення процесів в газорідних системах є плівковий рух рідини, у якому опір масопереносу зосереджено у рідкій фазі. Це пов'язано з тим, що при високих швидкостях у товщі рідини виникають турбулентні завихрення, що збільшують швидкість масопереносу. Інтенсивність процесу масообміну між газом і рідиною, можна збільшити наданням газорідному потоку гвинтового руху, при якому збільшується швидкість контактування та час перебування рідини в зоні контакту [1,2]. Циркуляція речовини у замкнутому контурі може забезпечити ефективне перемішування, при цьому циркуляційні потоки рідини створюються не тільки по контуру апарату, але і всередині об'єму рідини, що перемішується. На базових підприємствах України, а також на інших споріднених підприємствах як правило у якості абсорбера сірководню із коксового газу використовують тарілчасті, або насадочні апарати [3]. Вони мають відносно високий коефіцієнт масопередачі (абсорбції), але мають суттєвий недолік – високий гідравлічний опір, який складає 200 – 500 мм/вод.ст [3,4]. Гідравлічний опір є майже найважливішим техніко-економічним показником колонних апаратів. Наприклад, для умов базового підприємства, при загальному тиску коксового газу після сульфатного і бензолно-скрубного відділення складає 2000 – 2500 мм/вод.ст. Якщо установити додатковий апарат – абсорбер сірко-очистки тарілчастого або насадочного типу з опором 400 – 500 мм/вод.ст., то кінцевий тиск коксового газу на виході із заводу буде не достатнім для подальшого його транспортування споживачеві.

У технології очищення коксового газу від сірководню пропонується використовувати абсорбер вихрового типу, який має не гірший коефіцієнт масопередачі ніж тарілчастий чи насадочний апарат, але його опір не перевищує 50 мм/вод.ст (рисунок 1). Абсорбер розпилюючий вихровий відноситься до пустотілих апаратів (за виключенням двох трубчатих решіток змонтованих на рівних відстанях в середині апарату). В нижній частині трубчатих решіток, напроти кожної трубки установлюється вихрове сопло, яке дозволяє перерозподіляти стікаючу рідину в фазо-поглинач по перетину апарату. Наведений прийом дозволяє значно збільшити поверхню контакту між рідиною і газовою фазою, при цьому проходження газу через апарат перешкоджають дві трубчасті решітки, які забезпечують опір не більше 25 мм/вод.ст.





1 – форсунки; 2 – трубчаті решітки;  
3 – гідрозатвор; 4 – вихрове сопло  
Рисунок 1 – Загальний вид абсорбера  
полого розпилюючого вихрового

Розраховано абсорбер з наступними розмірами: висота – 20 метрів, діаметр – 3 метри. Визначено допустимий тиск на стінки апарата – 0,52 МПа; критерій Рейнольдса для рідини 810; дифузійний критерій Прандтля для газу 1,210, для рідини 620; критерій Нусельта для газу 6,13, рівномірність зрошення колони по перерізу 6,66.

Вихровий абсорбер конструктивно виконаний простіше ніж тарілчастий або насадочний апарат колонного типу, тому не буде потребувати технічних складнощів при поточному і капітальному ремонтах.

#### Література:

1. Війтенко В.І., Концур І.Ф., Лях М.М., Лютко Т.І., Вацаєв О.В.. Аналіз і модернізація обладнання для експлуатації гуцулівського газового родовища./ Техніка і технології. Розвідка та розробка нафтових і газових родовищ. 2013. № 4(49). С. 18 – 27.

2. XiangFeng Tian, LeMeng Wang, Pan Zhang, Dong Fu, ZhouYao Wang. A high efficient absorbent for the separation of H<sub>2</sub>S from low partial pressure coke oven gas. / Environmental Science and Pollution Research. 2021. P. 28:5822–5832.

3. Редько О.Ф., Чайка Ю.І., Бурда Ю.О. Підвищення ефективності очищення коксового газу від пилу, вуглекислого газу та парів формальдегіду в скруберах насадкового типу / Вентиляція, освітлення та теплогазопостачання. 2017. № 23. С. 39 – 43.  
[http://nbuv.gov.ua/UJRN/votp\\_2017\\_23\\_8](http://nbuv.gov.ua/UJRN/votp_2017_23_8)

4. Slyuzar A.V., Znak Z.O., Kalymon Ya.A., Bukliv R.L. Methods of purification and processing of hydrogen sulfide-containing gases: a review / Voprosy khimii i khimicheskoi tekhnologii. 2019. №3. P.83–97.  
<http://vhht.dp.ua/wp-content/uploads/pdf/2019/3/Slyuzar.pdf>

## **ВИЗНАЧЕННЯ ОПТИМАЛЬНИХ ТЕМПЕРАТУРНО-ЧАСОВИХ РЕЖИМІВ ОТВЕРДЖЕННЯ ТА СКЛАДУ МУЛЬТИДИСПЕРСНОГО СИЛІЦЬ КАРБІДУ ДЛЯ ЗНОСОСТІЙКИХ ЕПОКСИДНИХ КОМПОЗИЦІЙ**

Фандєєв О.В., Полоз О.Ю., Ебіч Ю.Р.

e-mail: ua.apolo@gmail.com

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро*

Полімерні композитні матеріали широко використовуються для захисту обладнання від зношування в різних галузях промисловості – гірничозбагачувальній, хімічній, машинобудівельній та ін. Особливо це характерно для обладнання в гірничозбагачувальній промисловості, що працює під дією потоку твердих частинок різних розмірів в газовому або рідинному середовищі (гідроциклони, насоси, вентиляційні системи та ін.). При цьому в залежності від типу та розміру твердих частинок, швидкості потоку відбувається рівномірне виділення матеріалу з поверхні обладнання або локальне абразивно-ерозійне руйнування.

Серед захисних полімерних композитних матеріалів особливе місце займають композиції на основі епоксидних смол, які мають певну плинність, тиксотропність, добру адгезію до багатьох конструкційних матеріалів, високий рівень фізико-механічних властивостей, що дозволяє їх використовувати не тільки для виготовлення зносостійких деталей та пристроїв, а також для їх відновлення і ремонту.

Значну роль в підвищенні експлуатаційної витривалості зносостійких епоксидних матеріалів відіграють температурно-часові режими їх отвердження для забезпечення оптимальної тривимірної структури, що впливає на комплекс міцносних та експлуатаційних характеристик композитів, а також вибір наповнювачів. Серед значної кількості наповнювачів, що відрізняються хімічною природою, структурою, твердістю, розміром частинок, в зносостійких епоксидних композитах в світовій практиці найбільше використовуються наповнювачі з високою твердістю за шкалою Мооса (8-9 од.) – силіцій та бор карбіди, електрокорунд та ін. самостійно або у сполученні з різного роду дисперсними і волокнистими матеріалами. Зносостійкість епоксидних матеріалів з такими наповнювачами в значній мірі залежить від розміру їх частинок. Причому найбільший ефект зносостійкості досягається при формуванні ущільненої структури наповнювача при застосуванні мультидисперсних наповнювачів, зокрема силіцій карбіду, які вводяться в композити в підвищеній концентрації (до 85% мас.) для формування відповідної ущільненої структури, зв'язаної з епоксидною матрицею. Таким чином, окрім інших чинників епоксидних зносостійких композицій – хімічної будови епоксидних смол, розбавників, отверджувачів,



модифікаторів суттєву роль відіграють температурно-часові режими їх отвердження та мультидисперсний склад наповнювача в формуванні оптимальної структури та властивостей композитів. Доцільно для визначення оптимальних значень цих параметрів застосовувати метод планування експерименту, що дозволяє не тільки скоротити час та матеріальні витрати дослідження, а також отримати математичні залежності основних властивостей епоксидних композитів від ряду параметрів.

При плануванні експерименту застосовували метод Бокса-Уїлсона з використанням дробного факторного експерименту  $2^{4-1}$  з варіюванням чотирьох змінних – температур термообробки 60°, 80°, 100°, 120°C при термінах термообробки: основний рівень 2 год., інтервал варіювання – 1 год. (дослідження температурно-часових режимів отвердження) та кількості (мас.ч. на 100 мас.ч. епоксидної смоли) силіцій карбїду з розмірами частинок від 5-7 мкм до 1800 мкм у складі мультидисперсного силіцій карбїду виробництва ПрАТ «Запорізький абразивний комбінат» з отвердженням за визначеним оптимальним температурно-часовим режимом. Як основний параметр при розробці математичних залежностей використовували зношування композицій  $\Delta V$ , см<sup>3</sup>, яке експериментально визначали із застосуванням відцентрового прискорювача (ЦУК) твердих частинок (річний пісок з розміром 0,5-0,9 мкм) при швидкості потоку 76 м/с, інші параметри – в якості накладання обмежень.

Встановлено оптимальний режим термообробки епоксидних композитів з поступовим підвищенням температури від 80° до 100°C, що забезпечував високу зносостійкість та комплекс фізико-механічних властивостей. Найбільш оптимальне упорядкування структури епоксидних композитів і найменше їх зношування досягається при використанні мультидисперсного силіцій карбїду з розмірами частинок: 5-7 мкм + 125-200 мкм + 400-500 мкм + 1600-1800 мкм з отвердженням за визначеним оптимальним режимом термообробки: 80°C x 2,4 год. + 100°C x 2,2 год.

Отримано рівняння залежностей міцності при розтягуванні, стисненні, згинанні, ударної в'язкості за Шарпі, теплостійкості за Мартенсом епоксидних композитів від концентрації мультидисперсного силіцій карбїду. Визначено структуру зношеного поверхневого шару епоксидних композитів, термооброблених за різними режимами при температурах 60°-120°C та з різною концентрацією мультидисперсного силіцій карбїду, в залежності від кута атаки абразиву (15-90°). Показано, що найбільше зношування ненаповнених епоксидних композицій відбувається при куті атаки абразиву 45°, наповнених – при куті 90°. Зношений поверхневий шар епоксидних композитів характеризується наявністю ерозійних каверн різного розміру та глибини.

**ДОСЛІДЖЕННЯ ЗМІНИ КОНЦЕНТРАЦІЇ РОДАНІДІВ У  
АБСОРБЦІЙНОМУ ЦИКЛІ РОЗЧИНУ МЕА УСТАНОВКИ  
ОЧИЩЕННЯ КОКСОВОГО ГАЗУ**

Фортунов В. О., Буркова О.В., Белянська О.Р.

e-mail: belyans@ukr.net

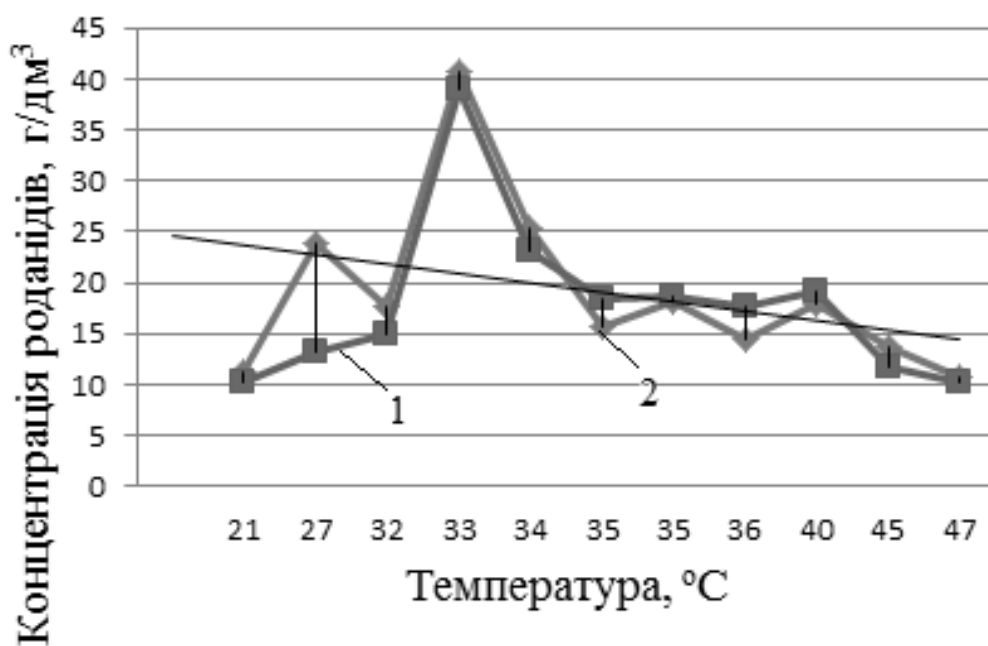
*Дніпровський державний технічний університет,  
Україна, Кам'янське*

До основних джерел забруднення атмосфери та водоймищ належать викиди коксохімічних підприємств хімічної промисловості. У процесі термічної обробки вугілля (коксування) утворюється кокс та коксовий газ, який містить леткі продукти коксування. Одним з найшкідливіших компонентів коксового газу є сірка. Близько 95% всіх сірчистих сполук складає сірководень, а решту 5% складають органічні сірчисті сполуки [1,2]. Наявність у коксовому газі сірчистих сполук викликає корозію трубопроводів і апаратури, погіршення якості поглинального масла, забруднення повітря. При використанні коксового газу як енергетичного палива в атмосферне повітря потрапляють сполуки сірки у вигляді SO<sub>2</sub>, SO<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>S і інші, які зумовлюють можливість випадання "кислотних дощів". Очищення від сірководню коксового газу є необхідним технологічним процесом і актуальною проблемою пов'язаною з охороною довкілля [3].

Процес очищення коксового газу від сірководню та інших супутніх домішок забезпечує одержання вторинної сировини заданого складу та якості, створює сприятливі умови для надійної роботи обладнання цеху вловлення хімічних продуктів коксування. Абсорбційний (мокрый) метод очищення коксового газу дає змогу зменшити викиди шкідливих речовин у навколишнє середовище. Водночас, ціаністий водень є основною причиною забруднення розчину МЕА. Під час абсорбції сірководню утворюються термостабільні солі, що є нерегенеруємими (роданіди, тіосульфати, сульфати). Під час тривалого використання моноетаноламінового розчину погіршуються абсорбційні його властивості.

У промислових умовах на підприємстві ПрАТ "КАМЕТ-СТАЛЬ" (м.Кам'янське) було проведено дослідження збільшення температури у конденсаторі-холодильнику з 38-41<sup>0</sup>С до 42-45<sup>0</sup>С із наступним виведенням розчину МЕА на вакуум-розгонку в залежності від вмісту роданідів в коксовому газі. Зміна концентрації роданідів у абсорбційному циклі розчину МЕА в залежності від температури конденсатора-холодильника наведено на рисунку 1.

В насиченому і в регенованому розчині МЕА концентрація не регенованих сполук майже однакова. Підтримування температури на границі 45<sup>0</sup>С дозволяє збільшувати якість абсорбційної очистки за рахунок зменшення вмісту термостабільних домішок у розчині МЕА.



1 – регенований МЕА; 2 – насичений МЕА

Рисунок 1 – Зміна концентрації роданідів у абсорбційному циклі розчину МЕА в залежності від температури конденсатора-холодильника

Отже, рекомендований режим абсорбції є ефективним до промислового впровадження.

Література:

1. Тишук В.Ю., Ковальова І.Б. Розробка засобу очистки коксових газів від сірководню./ Збірник наукових праць Національного гірничого університету. Екологічна безпека та охорона праці. 2018. № 55. С. 384-390. Спосіб доступу: [http://nbuv.gov.ua/UJRN/znpngu\\_2018\\_55\\_40](http://nbuv.gov.ua/UJRN/znpngu_2018_55_40)

2. Редько О.Ф., Чайка Ю.І., Бурда Ю.О. Підвищення ефективності очищення коксового газу від пилу, вуглекислого газу та парів формальдегіду в скруберах насадкового типу / Вентиляція, освітлення та теплогазопостачання. 2017. №23. С.39-43. Спосіб доступу: [http://nbuv.gov.ua/UJRN/votp\\_2017238](http://nbuv.gov.ua/UJRN/votp_2017238)

3. Slyuzar A.V., Znak Z.O., Kalymon Ya.A., Bukliv R.L. Methods of purification and processing of hydrogen sulfide-containing gases: a review/ Voprosy khimii i khimicheskoi tekhnologii. 2019. №3. P.83-97. Спосіб доступу: <http://vhht.dp.ua/wp-content/uploads/pdf/2019/3/Slyuzar.pdf>

## **ПІДВИЩЕННЯ ПОТУЖНОСТІ ПІДПРИЄМСТВА ШЛЯХОМ ОПТИМІЗАЦІЇ РОБОТИ ЕКСТРУДЕРА**

Хохлова Т.В., Третьяков А.О., Федан В.В.

e-mail: thohlova@ukr.net

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро*

Інтерес у світі до виробів із полімерів росте. Це пов'язане з їх легкою вагою, хімічною інертністю, гарними ізоляційними властивостями, ударотривкістю і зносостійкістю, низькою теплопровідністю, гарною прозорістю і технологією формування.

Тому підприємства, які випускають полімерну продукцію, зацікавлені в збільшенні потужності виробництва, підвищенні її якості, економічності виробничих процесів.

Ефективна робота екструдерів, які виробляють якісну продукцію, досягається шляхом обов'язкового контролю та оптимізації різних параметрів технологічного процесу.

Одним з факторів, які впливають на ефективність процесу екструзії є продуктивність лінії. Однак підвищення її роботи з метою збільшення кількості виробів, які виготовляються за одиницю часу, позначається негативно на якість продукції [1,2].

Таким чином, необхідно вибрати таку швидкість обертання шнека, щоб розплавлення та екструзія не виходили за межі встановлених показників. Крім того, потужність обладнання, споживання енергії також можуть діяти на швидкість обертання шнека.

Для забезпечення оптимальної продуктивності екструдера розроблена модельна програма, яка дозволяє прогнозувати, як будуть впливати конструкційні параметри шнека і властивості матеріалу, що переробляється, на продуктивність екструдера. Такий прогноз дозволяє не тільки врахувати особливості роботи обладнання, але і уникнути проблем, які можуть виникнути при організації виробництва нових виробів.

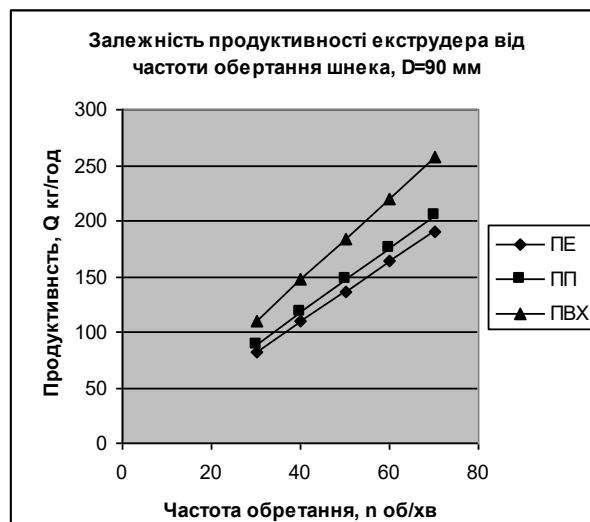
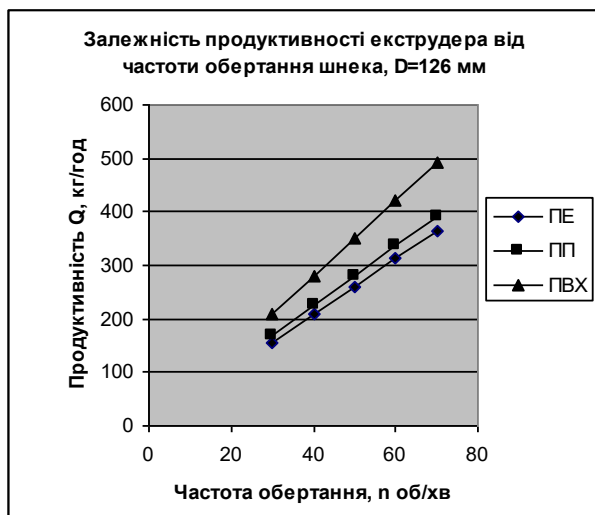
Розроблені модельні програми для оптимізації роботи одно- і двошнекових екструдерів. На моделі досліджені та проаналізовані наступні залежності: вплив на продуктивність екструдера діаметра шнека, кута нахилу гвинтової лінії, глибини спірального каналу по зонах, ступеню ущільнення матеріалу від частоти його обертання в діапазоні від 30 – 70 об/хв для перероблення поліетилену, поліпропілену, полівінілхлориду.

Програма дає можливість в умовах проведення експерименту підібрати оптимальні значення роботи обладнання, заощадити матеріальні та енергетичні ресурси.

При розрахунках продуктивності, потужності екструдера використано стандартний алгоритм, а для одержання поточної інформації досить змінити вихідні дані по виробу та матеріалу.

$$Q = \frac{\alpha \cdot K \cdot n}{K + \beta + \gamma}$$

де  $Q$  – об'ємна продуктивність,  $\text{см}^3/\text{с}$ ;  
 $\alpha, \beta, \gamma$  – постійні потоків прямого, зворотного, витоку, відповідно;  
 $K$  – коефіцієнт геометричної форми екструзійної головки,  $\text{см}^3$ ;  
 $n$  – частота обертання шнека,  $\text{с}^{-1}$ ;  
На графіках нижче наведені отримані залежності.



#### Література:

1. Chris Rauwendaal. Understanding Extrusion.– Hanser Publishers, Munich, 2023.– 233p. <https://doi.org/10.3139/9781569906996.fm>
2. Chamil Abeykoon, Kang Li, Peter J. Martin and Adrian L. Kelly. Modelling of Melt Pressure Development in Polymer Extrusion: Effects of Process Settings and Screw Geometry.– Proceedings of 2011 International Conference on Modelling, Identification and Control, Shanghai, China, June 26-29, 2011.–P.197-202.

## **ВПЛИВ ПЕРЕБІГУ ТВЕРДОФАЗНОЇ ПОЛІКОНДЕНСАЦІЇ ВТОРИННОГО ПОЛІЕТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТУ НА ЗМІНУ ЙОГО РЕОЛОГІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ**

Черваков Д. О., Федан В. В.

e-mail:dchervakov@ukr.net

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»,  
Україна, Дніпро*

Серед полімерних відходів значну частку займає саме поліетилентерефталат (ПЕТ), однак, його повторне використання не задовольняє підвищення рівня технічних вимог серійного виробництва завдяки процесу деструкції як зниження ряду властивостей. Практична реалізація процесів використання вторинного ПЕТ ускладнена через низки явищ, які виникають при його вторинній переробці: недостатньо відомостей про вплив вмісту вологи на зміну його структури, про формування комплексу фізико-механічних властивостей. Саме тому проблема вторинної переробки ПЕТ повністю не вирішена ні в одній країні світу [1].

З метою збільшення молекулярної маси вторинної сировини з ПЕТ, яка може значно вплинути на властивості полімеру – вивчено процес твердофазної поліконденсації (ТПК). Збільшення молекулярної маси дозволяє повторно переробляти ПЕТ у готові вироби та значною мірою зменшити кількість продуктів, що утворились в ході гідролітичної, термоокислювальної та термо-механічної деструкції.

ТПК починається одразу після переходу полімеру з склоподібного у високо-еластичний стан та йде до переходу ПЕТ у в'язкотекучий стан. Чим вища температура та тривалість перебігу ТПК, тим якісніше він відбувається.

Твердофазну поліконденсацію ПЕТ проводять або у кристалічному стані або у розплаві. Процес ТПК у кристалічному стані застосовують при підготовці матеріалів до переробки, а у розплаві в процесі синтезу ПЕТ (з видаленням летких продуктів поліконденсації за допомогою вакуумної дегазації). Слід відзначити, що і перший і другий процес ТПК можуть проводити для обох операцій [2,3].

У ході експериментів було виявлено, що розмір гранул вторинного ПЕТ, температура та час проведення процесу ТФПК значною мірою впливає на його перебіг. Зазначено, що чим менше розмір гранул, тим вища температура та час проведення процесу ТФПК і тим якісніше та швидше він відбувається.

Вплив розміру гранул порошку ПЕТ на зміну молекулярної маси пояснюється за рахунок збільшеної площі контакту між частками, що в свою чергу призводить кращої теплопередачі між ними.



Також широко відомо, що показник текучості розплаву (ПТР) є характеристикою, яка не тільки якісно вказує на здатність полімерів до течії під дією навантаження, але ще й може характеризувати матеріали за середнім молекулярно-масовим розподілом. Зазвичай, чим більший ПТР, тим менша молекулярна маса і навпаки. Встановлено, що в ході проведення ТФПК при ідеальних умовах молекулярну масу вдалося збільшити з 10000 до 18000 та значно зменшити вміст олігомерних похідних ПЕТ з гідроксильними та карбоксильними групами.

Встановлено, що температура та час проведення процесу ТПК значною мірою впливає на його перебіг. Визначені ефективні температури для проведення ТПК які становлять 130-160°C при сушінні більше 3-х годин, а також доведено припущення того, що ПТР є характеристикою що може характеризувати матеріали за середнім молекулярно-масовим розподілом та повністю залежить від кількості отриманих експериментальних даних.

Розроблені математичні моделі зміни ПТР для вторинного ПЕТ в залежності від часу та температури сушіння полімеру не протирічять експериментальним даним.

#### Література:

1. Solid-state polymerization of poly(ethylene terephthalate): [Електронний ресурс]. URL: <https://doi.org/10.1002/app.1983.070281023> (дата звернення: 09.11.23)
2. Solid-phase polycondensation of polyethylene terephthalate with technologies of its reactive extrusion: [Електронний ресурс]. URL: <https://www.mmscience.eu/journal/issues/october-2023/articles/solid-phase-polycondensation-of-polyethylene-terephthalate-with-technologies-of-its-reactive-extrusion/download> (дата звернення: 11.11.23)
3. A modern understanding of polyethyleneterephthalate the degradation processes: [Електронний ресурс]. URL: <http://chemistry.dnu.dp.ua/article/download/285240/283496> (дата звернення: 12.11.23)

## **ВПЛИВ СУМІШЕВОГО ДИЗЕЛЬНОГО ПАЛИВА НА МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ЕЛАСТОМЕРІВ**

Шевченко О.Б., Попитайленко Д.В.

e-mail: darinaropu@gmail.com

*ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»*

*Україна, Дніпро*

Проблеми виснаження викопного палива та погіршення навколишнього середовища спонукають до пошуку альтернативних видів палива. Метиллові естери жирних кислот (МЕЖК) є перспективними та відіграють важливу екологічну роль. Однак однією з основних проблем, пов'язаних із використанням сумішевого дизельного палива є сумісність з конструкційними матеріалами паливних систем, оскільки МЕЖК можуть спричинити руйнування еластомерів.

Ключові фактори, які впливають на руйнування еластомерів, включають наявність розчиненого кисню, вологи, гліцеридів, ступінь ненасиченості молекул тощо [1].

МЕЖК може викликати зміну механічних та фізичних властивостей еластомерів, зокрема зміна маси, об'єму, твердості, умовної міцності на розрив. Зменшення умовної міцності на розрив вказує на більшу втрату поперечних зв'язків між елементами полімеру під час контакту із сумішевим паливом. Відносно невелике розчинення компонентів еластомеру може призвести до незначного зниження міцності на розрив, тоді як механічні характеристики погіршуються в більшій мірі [2].

Це дослідження спрямоване на визначення впливу сумішевого дизельного палива з добавкою 30% МЕЖК з соняшникової олії на зміну умовної міцності про розриві еластомерів з різним часом занурення (10 та 30 діб). В роботі використовувалися наступні еластомери: поліуретан, полісечовина, СКН-26 та поліхлорпрен. Для випробування було виготовлено зразки еластомерів у формі двосторонніх лопаток. Підготовлені зразки витримувалися в пробірках з паливом за температури 25°C. Результати дослідження стійкості еластомерів в різних видах палив наведені на рисунку 1.

З рисунку видно, що усі зразки після витримання в сумішевому паливі, яке містить 30% МЕЖК, виявили тенденцію до зниження умовної міцності на розрив. Найбільш стійким до впливу сумішевого палива виявився зразок гуми СКН-26, найменш стійким – поліуретан (зниження умовної міцності на розрив після 10 днів випробування 9% та 67% відповідно, після 30 днів 9,3% та 70% відповідно). Тенденція до сповільнення зменшення умовної міцності на розрив також є загальною для всіх зразків еластомерів. Результати показали несумісність еластомерів та МЕЖК, що спричинило значну втрату еластомерних властивостей і втрату фіксуєної здатності.

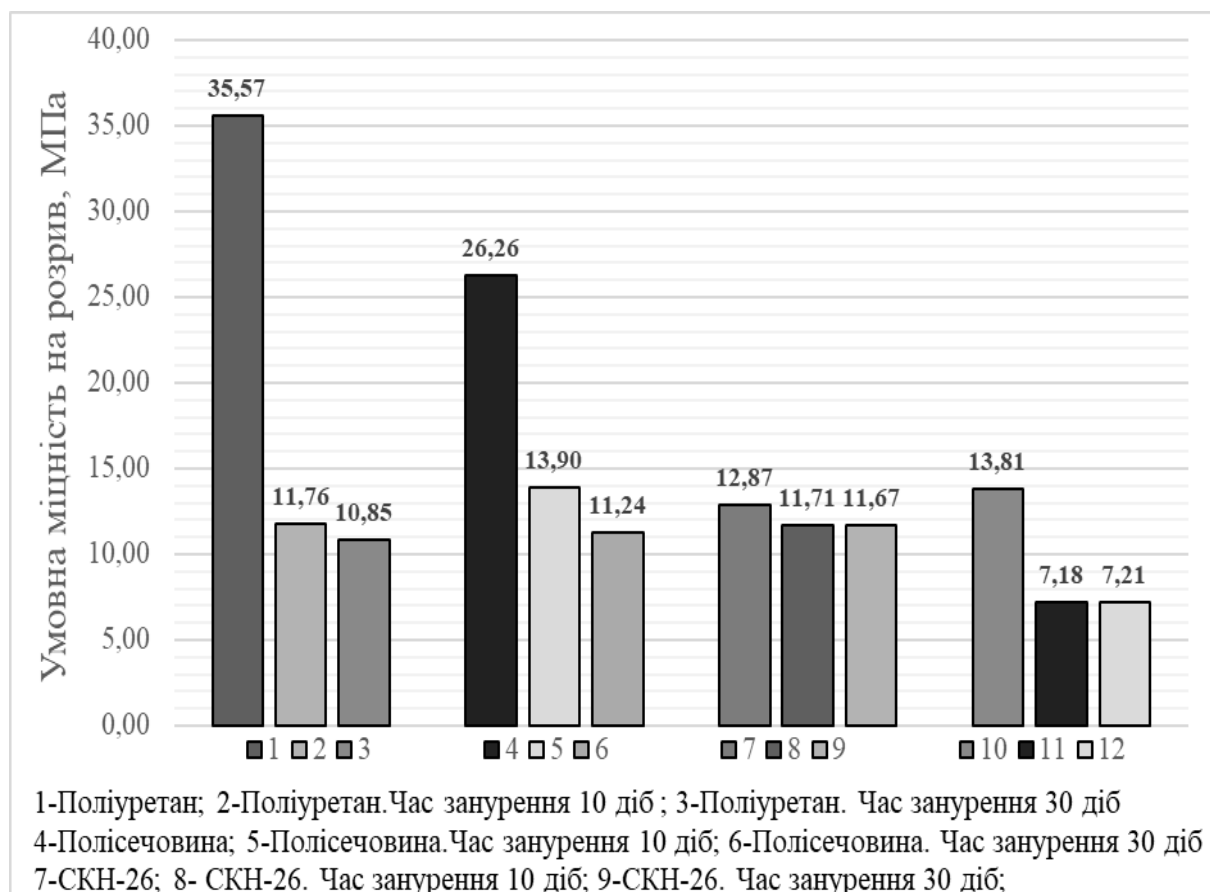


Рисунок 1 – Умовна міцність при розриві еластомерів в сумішевому дизельному паливі, МПа

Таку поведінку еластомерів можна пояснити руйнуванням більшої частки міжмолекулярних зшивок протягом 10 днів, при цьому початкова кількість таких зшивок зменшується в ряду поліуритан-полісечовина-поліхлоропрен-(СКН-26), про що свідчить початкове значення умовної міцності на розрив даних еластомерів. Метиллові естери жирних кислот легше поглинаються еластомерами, які мають подібну полярність.

Експеримент проводився в статичних умовах при постійній температурі. Дослідження стійкості еластомерів при підвищеній температурі потребує подальшого вивчення.

#### Література:

1. Fazal M. A., Rubaiee S., Al-Zahrani A. Overview of the interactions between automotive materials and biodiesel obtained from different feedstocks. – Fuel Processing Technology, 2019. –196 – P. 1–23.
2. Veza I., Zainuddin Z., Tamaldin N., Idris M., Irianto I., Fattah I.M.R. Effect of palm oil biodiesel blends (B10 and B20) on physical and mechanical properties of nitrile rubber elastomer – Results in Engineering, 2022. –16 – P. 1–13.

## Наукове видання

II том збірника тез доповідей XI Міжнародної науково-практичної інтернет-конференції здобувачів вищої освіти та молодих учених «**Хімія і сучасні технології**», що відбувалась 06-07 грудня 2023 р.

Набір здійснено з готових оригіналів-макетів, які були надані авторами доповідей в електронному вигляді. Відповідальність за зміст окремих публікацій, їх орфографію та якість рисунків несуть автори тез.

Оригінал-макет виготовлений РВВ ДВНЗ УДХТУ

Відповідальний секретар виконавчого комітету: Величко О.В., к.х.н., доцент кафедри неорганічної хімії, голова ради молодих учених ДВНЗ УДХТУ

Технічне редагування О.В. Величко  
Комп'ютерна верстка Т.М. Кіжло

Редакційно-видавничий відділ ДВНЗ УДХТУ  
49005, Дніпро, пр. Гагаріна, 8  
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК №5026 від 16.12.2015 р.

Підписано до друку 04.12.2023. Формат 60x84 1/16. Папір офсетний № 1.  
Друк різнограф. Гарнітура Times New Roman.  
Облік.-видавн. арк. 6,91.  
Тираж 300 прим. Зам. № 143.