

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ



ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ
УНІВЕРСИТЕТ імені В. Н. КАРАЗІНА

ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ



XVI Всеукраїнська наукова
конференція студентів та аспірантів

ХІМІЧНІ КАРАЗІНСЬКІ ЧИТАННЯ – 2024

30 квітня 2024 р.

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

Харків – 2024

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет
імені В. Н. Каразіна
Хімічний факультет

**XVI Всеукраїнська наукова
конференція студентів та аспірантів
"Хімічні Каразінські читання - 2024"
(ХКЧ'24)**

Тези доповідей

30 квітня 2024 року

Харків
2024

УДК 54 (063)
Х 46

Реєстраційне посвідчення у ДНУ «УкрІНТЕІ» МОН України (№ 569 від 7 грудня 2023 р.)

Затверджено до друку рішенням науково-методичної ради Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна (протокол № 2 від 16.04.2024р.)

Тези доповідей представлені за теоретичними та практичними результатами наукових досліджень, виконаних студентами та аспірантами вищих навчальних закладів і науково-дослідницьких установ України.

Для науковців та студентів ВНЗ та НДІ України.

Тези доповідей подаються в авторській редакції.

ISBN 978-966-285-637-8

© Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, 2024



ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ
УНІВЕРСИТЕТ імені В. Н. КАРАЗІНА

Науковий комітет конференції:

- Калугін О. М. – голова комітету, декан хімічного факультету, кандидат хімічних наук, професор
- Колосов М.О. – заступник декана з наукової роботи, кандидат хімічних наук, доцент
- Мчедлов-Петросян М. О. – завідувач кафедри фізичної хімії, доктор хімічних наук, професор
- Волобуєв М.М. – в.о. завідувача кафедри неорганічної хімії, кандидат хімічних наук, доцент
- Юрченко О. І. – завідувач кафедри хімічної метрології, доктор хімічних наук, професор
- Дорошенко А. О. – завідувач кафедри органічної хімії, доктор хімічних наук, професор
- Коробов О.І. – завідувач кафедри хімічного матеріалознавства, доктор хімічних наук, професор
- Чебанов В.А. – завідувач кафедри прикладної хімії, доктор хімічних наук, професор

Організаційний комітет конференції:

- Калугін О. М. – голова комітету, декан хімічного факультету, кандидат хімічних наук, професор
- Колосов М.О. – заступник голови, заступник декана з наукової роботи, кандидат хімічних наук, доцент
- Леонова Н.О. – доцент кафедри хімічної метрології, кандидат хімічних наук
- Колесник Я.В. – доцент кафедри неорганічної хімії, кандидат хімічних наук
- Батрак А.С. – інженер кафедри неорганічної хімії
- Марфунін М.О. – аспірант кафедри фізичної хімії
- Харченко Д.В. – аспірант кафедри фізичної хімії
- Іванова А.М. – студент 3 курсу денної форми навчання

ПРОГРАМА КОНФЕРЕНЦІЇ

Урочисте відкриття конференції: 15⁰⁰–15¹⁵

Тема: Хімічні Каразінські читання - 2024 (ХКЧ'24) - Відкриття конференції

Час: 30 квітня 2024 15:00

Підключитися до конференції Zoom

<https://us04web.zoom.us/j/3724633938?pwd=VXI2blVsZUVGTXdWc3pRKzdaVlIRUT09>

Ідентифікатор конференції: 372 463 3938 Код доступу: 1KzJuD

Відповідальний: доцент Леонова Наталія Олександрівна

Контакти. Телефон/Viber/Telegram: 0500455247

Робота в секціях: 15²⁰–17⁴⁰

Секція "Неорганічна та Фізична хімія"

Тема: Хімічні Каразінські читання-2024 (ХКЧ'24) - Секція "Неорганічна та Фізична хімія"

Час: 30 квітня 2024, 15.20

Підключитися до конференції Zoom

<https://us05web.zoom.us/j/83853683430?pwd=MkF0YWg2N3hCbWNQQnVidU1nZ08yZz09>

Ідентифікатор конференції: 838 5368 3430

Код доступу: 03CUxW

Відповідальний за роботу в секції: доцент Христенко Інна Василівна

Контакти:Телефон/Viber/Telegram: 0679512740

Секція «Органічна хімія»

Тема: Хімічні Каразінські читання - 2024 (ХКЧ'24) - Секція «Органічна хімія»

Час: 30 квітня 2024, 15:20

Підключитися до конференції Zoom

<https://us02web.zoom.us/j/9235505889?pwd=ZzlJdkt4SIE1SkxLNjVhdG9Mc1VEUT09>

Ідентифікатор конференції: 923 550 5889 Код доступу: Hwnk2NSL

Відповідальний за роботу секції: професор Дорошенко Андрій Олегович

Контакти. Телефон/Viber/Telegram: 0957408641

Секція «Аналітична хімія»

Тема: Хімічні Каразінські читання - 2024 (ХКЧ'24) - Секція «Аналітична хімія»

Час: 30 квітня 2024, 15:20

Підключитися до конференції Zoom

<https://us02web.zoom.us/j/4019330765?pwd=OTlHbDBZT1FTSUhCa3crZmI1RUptUT09>

Ідентифікатор конференції: 401 933 0765 Пароль: 5y4NPW

Відповідальний за роботу секції: доцент Нікітіна Наталія Олександрівна

Контакти. Телефон/Viber/Telegram: 0996092743

СЕКЦІЇ

Фізична та Неорганічна хімія

<i>Anokhin D. O., Ivanov V. V.</i> L ₁ -regularization in QSAR classification problem	10
<i>Hrytsenko B. Y., Sébastien Fiorucci.</i> Odorant-OBP binding free energy calculations by molecular dynamics	12
<i>Hutsul K. R., Ivanenko I. M., Patrylak L. K.</i> Photocatalytic activity of ZnO/HY Zeolite composite in circulation conditions	14
<i>Klimenkov O. M., Ivanenko I. M.</i> ZnO/bentonite/Ag heterojunction photocatalyst for malachite green dye degradation.....	17
<i>Lohachova K. O., Kyrychenko A. V., Kalugin O. N.</i> Force field benchmarking for molecular dynamics simulations of main protease of coronavirus SARS-COV-2	19
<i>Prud M. V., Blazhynska M. M., Kyrychenko A. V., Kalugin O. N.</i> Computer-aided design of hybrid organic-inorganic nanomaterials.....	21
<i>Апалькова В. Є., Пилипенко О. І.</i> Поляризаційні дослідження анодної поведінки титану VT1-0 у змішаному органічно-водному фторидвмісному електроліті	23
<i>Батрак А. С., Калугін О. М.</i> В'язкість сумішей на основі VmimOAc та VmimBF ₄ з диметилсульфоксидом в широкому інтервалі температур.....	27
<i>Боровик А. В., Колесник Я. В., Калугін О. М.</i> Структура та транспортні властивості розчинів NaPF ₆ у сумішах етиленкарбонату з диметилкарбонатом для натрій-іонних акумуляторів: МД моделювання	28
<i>Бут Т. О., Мірошниченко А. А., Борщевич Л. В., Варгалюк В. Ф.</i> Електроосадження кобальту з перхлоратних електролітів з добавками органічних кислот різної природи	30
<i>Галайчак С. А., Данильчук М. В.</i> Електрохімічні покриття системи Ni-Mo-V....	32
<i>Дікарева К. С., Коверга В., Калугін О. М.</i> Сольватна структура LiFSI та LiTFSI в сумішах етиленкарбонату з диметилкарбонатом.....	34
<i>Заболотній Є. В., Зажигалов В. О., Котинська Л. Й., Курмач М. М.</i> Вплив розмірів частинок TiO ₂ та ZnO на фотокаталітичну активність композитів TiO ₂ /SiO ₂ та ZnO/SiO ₂	36
<i>Козлова А. О., Єльцов С. В., Рощина К. В.</i> Особливості впливу цетилтриметіламоній броміду на швидкість лужного знебарвлення бромфенолового синього в міцелярних розчинах.....	38
<i>Колесников Д. І., Бердник М. І., Іванов В. В.</i> Проблема зовнішнього тестування регресійних моделей QSAR.....	40
<i>Новосельцев І. М., Батрак А. С., Калугін О. М.</i> Міжчастинкові взаємодії в сумішах VmimBF ₄ з диметилсульфоксидом за даними інфрачервоної спектроскопії.....	42
<i>Піскунов І. І., Калугін О. М.</i> Етиламоній формиат чи суміш етиламоніаку та мурашиної ксилоти: челендж для МД моделювання	43

<u>Разапова М. С., Єфімов П. В.</u> Аналіз волюмометричних властивостей сумішей неелектролітів.....	45
<u>Руденко Р. Ю., Черножук Т.В., Калугін О. М.</u> Сольватація іонів Li ⁺ та Na ⁺ в γ -бутиралактоні: молекулярно-динамічне моделювання.....	46
<u>Селезень А., Піскач Л., Хижун О.</u> Електронні властивості сполуки Tl ₂ CdGeSe ₄	47
<u>Сободош Н. Й., Корній С.А.</u> Інгібування корозії алюмінієвого сплаву екологічно безпечною композицією на основі натрію альгінату та цинку ацетату в 0,1% розчині NaCl.....	49
<u>Хирна І. О., Панченко В. Г., Калугін О. М.</u> Ідентифікація іонних трійників у розчинах натрій йодиду та літій броміду в октан-1-олі за результатами кондуктометричного експерименту.....	51
<u>Шафорост І. Г., Єльцов С. В.</u> Дослідження сольового ефекту в кінетиці реакції йодного годинника між йодат та сульфат іонами в кислому середовищі.....	54

Аналітична хімія

<u>Бакуменко О. В., Замлілий В. О. Коновалова О. Ю.</u> Оптимізація розділення ряду синтетичних харчових барвників методом тонкошарової хроматографії.....	57
<u>Лісова М. Р., Юрченко О. І.</u> Атомно – абсорбційне визначення кадмію та цинку в лікувальних сольових сумішах з використанням ультразвуку, пар та стандартних зразків складу на основі ацетилацетонатів металів.....	59
<u>Сабодашко Н. Д., Нікітіна Н. О.</u> Виділення нарингіну зі шкірки грейпфруту методом препаративної високоефективної рідинної хроматографії.....	61
<u>Скрипнік Д. А., Решетняк О. О., Жолудов Ю. Т.</u> Нові 4-заміщені похідні 2'-гідроксихалкону як потенційні люмінофори для ЕХЛ-аналізу.....	63
<u>Тамадаєва В. О., Нікітіна Н. О.</u> Вплив кислотності середовища на активність та показники функціональності біологічного матеріалу.....	65
<u>Шевченко А. О., Буніна З. Ю., Беліков К. М.</u> Мас-спектрометричне з індуктивно зв'язаною плазмою визначення вмісту As, Cd, Hg, Pb, Tl та Se у волоссі людини.....	67
<u>Шевченко І. Р., Юрченко О. І.</u> Атомно-абсорбційне та атомно-емісійне з індуктивно зв'язаною плазмою визначення заліза та марганцю в лікувально-сольових сумішах.....	69

Органічна хімія

<u>Geleverya A. O., Kovaříček P., Kovalenko S. M.</u> Synthesis of pyridines, pyrimidines and triazoles: closing the gap between clicking and synthesizing	72
--	----

<i>Korobka A., Chebanov V., Eckstein A.</i> Synthesis of dithieno[3,2-b:2',3'-d]pyrrole based monomers for further electropolymerization	74
<i>Курпа М. О., Коваленко С. М., Іванов В. В.</i> Classyfing problem of mesoionic systems	76
<i>Барабаш О. В., Остап'юк М. Ю., Остап'юк Ю. В.</i> Дослідження синтетичного потенціалу етил 2 ціано 2 (2 арилгідразиніліден)ацетатів у синтезі 4 аміно 1 арилпіразолів	78
<i>Ващенко А. П., Татарець А. Л., Кривошей О. І.</i> Синтез та дослідження гідрофільного піридилоксазольного барвника для флуоресцентного мічення протеїнів	80
<i>Циганков О. В., Верещак В. О., Савлук Т. О., Анан'єва В. В., Чебанов В. А.</i> Бісаміди Угї на основі піроліл- β -хлорвінілальдегіду та їх незвичайні трансформації.....	82
<i>Гончаров В. О., Сахно Я. І., Чебанов В. А.</i> Реакція Угї та послідовна комбінація реакцій Угї/Аза-Віттіга на основі α -кетоглутарової кислоти.....	85
<i>Дробот Д. Р., Сабєров В. Ш.</i> Циклічні сульфамідати як універсальні реагенти отримання похідних арилетиламінів	87
<i>Киричок О. О., Єгорова Т. В., Михайлюк П. К.</i> Синтез нових поліфункціональних похідних 1-азаспіро[3.3]гептану та їх застосування в медичній хімії.....	89
<i>Куля Д. Ю., Кут Д. Ж., Кут М. М, Онисько М. Ю.</i> Дослідження регіоселективності електрофільної гетероциклізації 3-аліл-2-алкенілтіохіназолін-4-онів.....	91
<i>Ломинога Є. Р., Задорожній П. В., Кисельов В. В., Харченко О. В.</i> Оптимізація методу синтезу похідних 1Н-перимідин-2-амінів на основі N-(2,2,2-трихлор-1-ізотіоціанатоетил)карбоксамідів.....	93
<i>Мосіна А. О., Іванов В. В.</i> Аналіз та пошук нових біологічно активних сполук для LSD1	94
<i>Павлова В. В., Задорожній П. В., Харченко О. В.</i> Синтез N-(2,2,2-трихлор-1-((5-(феніламіно)-1,3,4-тіадіазол-2-іл)аміно)етил)карбоксамідів	96
<i>Рашевський А. С., Чебанов В. А., Тімохін О. С., Кучер О. В.</i> Синтез оптично активних 2-гетарилетаноламінів	97
<i>Свояков Р. П., Говор І. В., Татарець А. Л., Кулик О. Г.</i> Синтез та дослідження чутливих до мікрооточення сенсорів на основі гемісквараїнових барвників.....	99
<i>Сніжско А. Д., Чепелева Л. В., Гладков Є. С., Рошаль О. Д., Кириченко О. В.</i> Синтез та спектрально-флуоресцентні властивості нових гідрофобно-модифікованих похідних 3-гідроксифлавону.....	101
<i>Файзієв О. О., Колодяжна А. О., Колодяжний О. І.</i> Енантіомерночисті фторвмісні 3-гетероарилалканові кислоти	103
<i>Циганкова В. А., Копіч В. М., Андрусевич Я. В., Волощук І. В., Пільо С. Г., Броварець В. С.</i> Вплив похідних піридину та піримідину на біосинтез фотосинтетичних пігментів в рослинах сорго	105

<i>Черних А. В., Черних А. В., Радченко Д. С., Русанов Е., Волочнюк Д. М., Григоренко О. О., Комаров І. В.</i> Бібліотека конформаційно обмежених аналогів глютамінової кислоти на основі спіро[3.3]гептану	107
<i>Шипов Р. Г., Гладков Є. С., Чепелева Л. В., Кириченко О. В.</i> Синтез та спектрально-флуоресцентні властивості неприродних амінокислот аналогів триптофану	108
<i>Юрков К. Ю., Сахно Я. І., Чебанов В. А.</i> Особливості багатокomпонентних реакцій 5-аміно-3-метилгіо-1,2,4-триазолу з саліциловими альдегідами та піровиноградною кислотою.....	110

ДОСЛІДЖЕННЯ РЕГІОСЕЛЕКТИВНОСТІ ЕЛЕКТРОФІЛЬНОЇ ГЕТЕРОЦИКЛІЗАЦІЇ 3-АЛІЛ-2-АЛКЕНІЛТІОХІАЗОЛІН-4-ОНІВ

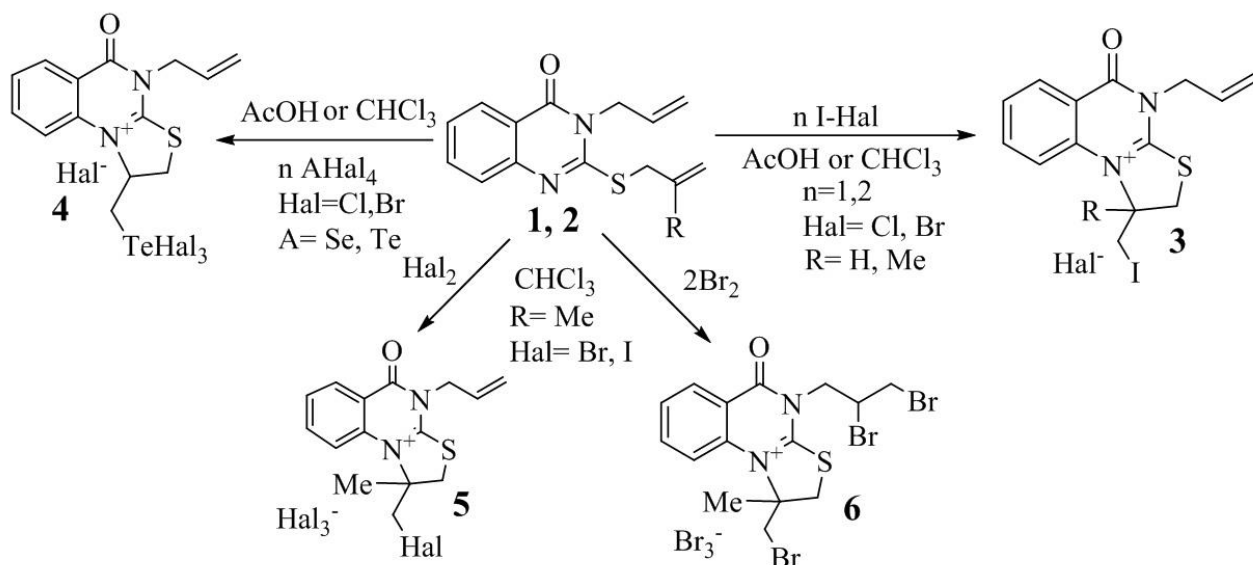
Куля Д. Ю., Кут Д. Ж., Кут М. М., Онисько М. Ю.

ДВНЗ «Ужгородський національний університет»

kulia.diana@student.uzhnu.edu.ua

Реакції електрофільної внутрішньомолекулярної гетероциклізації є одними із важливих методів одержання біоперспективних конденсованих похідних хіназоліну. Процес гетероанелювання додаткового циклу залежить від багатьох факторів: поляризація кратного зв'язку, природа нуклеофільного центру, наявність стеричних факторів у молекулі субстрату, природа електрофільного реагенту та полярність розчинника. Метою нашого дослідження є вивчення регіоселективності та напрямленості реакцій електрофільної внутрішньомолекулярної гетероциклізації 3-аліл-2-аліл(металіл)тіохіназолін-4(3*H*)-ону під дією різних за природою галогеновмісних електрофільних реагентів.

Вихідними субстратами для наших досліджень слугували тіоестери **1**, **2**, які містять в своїй структурі два алкенільні фрагменти та два нуклеофільні центри — атом нітрогену N¹ хіназоліну та атом оксигену карбонільної групи, які можуть брати участь в анелюванні додаткового циклу. Встановлено, що взаємодія 3-алкеніл-2-алкенілтіохіназолін-4(3*H*)-онів **1**, **2** з гібридними галогенами чи тетрагалогенідами халькогенідів не залежно від співвідношення реагентів в хлороформі або льодяній оцтовій кислоті відбувається регіоселективно за участю N¹ атома з утворенням ангулярних моногалогенідних солей **3**, **4**. У випадку дії бромі (1:1), йоду (1:1, 1:2) на металільний тіоестер **2** утворюються ангулярні тригалогеніди **5**, натомість, використання двократного надлишку бромі приводить до циклізації тіоалільного фрагмента та приєднання електрофілу до кратного C=C зв'язку алільного фрагменту біля N³ атома хіназоліну.



Таким чином, у даному дослідженні встановлені закономірності перебігу електрофільної гетероциклізації 3-аліл-2-алкенілтіохіназолін-4-ону під дією різних за природою електрофільних агентів і розроблено керований метод анелювання тіазольного циклу до остову хіназоліну.

АВТОРСЬКИЙ ПОКАЖЧИК

Anokhin D. O.	10	Дробот Д. Р.	87
Blazhynska M. M.	21	Єгорова Т. В.	89
Chebanov V.	74	Єльцов С. В.	38, 54
Eckstein A.	74	Єфімов П. В.	45
Geleverya A. O.	72	Жолудов Ю. Т.	63
Hrytsenko B. Y.	12	Заболотній Є. В.	36
Hutsul K. R.	14	Задорожній П. В.	93, 96
Ivanenko I. M.	14, 17	Зажигалов В. О.	36
Ivanov V. V.	10, 76	Замлілий В. О.	57
Kalugin O. N.	19, 21	Іванов В. В.	40, 94
Klimenkov O. M.	17	Калугін О. М.	27, 28, 34, 42
Korobka A.	74		43, 46, 51
Kovalenko S. M.	72, 76	Кириченко О. В.	101, 108
Kovaříček P.	72	Киричок О. О.	89
Курпа М. О.	76	Кисельов В. В.	93
Курьченко А. В.	19, 21	Коверга В.	34
Lohachova K. O.	19	Козлова А. О.	38
Patrylak L. K.	14	Колесник Я. В.	28
Prud M. V.	21	Колесников Д. І.	40
Sébastien Fiorucci.	12	Колодяжна А. О.	103
Анан'єва В. В.	82	Колодяжний О. І.	103
Андрусевич Я. В. .	105	Комаров І. В.	107
Апалькова В. Є.	23	Коновалова О. Ю.	57
Бакуменко О. В.	57	Копіч В. М. .	105
Барабаш О. В.	78	Корній С.А	49
Батрак А. С.	27, 42	Котинська Л. Й.	36
Бердник М. І.	40	Кривошей О. І.	80
Беліков К. М.	67	Кулик О. Г.	99
Боровик А. В.	28	Куля Д. Ю.	91
Борщевич Л. В.	30	Курмач М. М.	36
Броварець В. С.	105	Кут Д. Ж.	91
Буніна З. Ю.	67	Кут М. М.	91
Бут Т. О.	30	Кучер О. В.	97
Варгалюк В. Ф.	30	Лісова М. Р.	59
Ващенко А. П.	80	Ломинога Є. Р.	93
Верещак В. О.	82	Михайлюк П. К.	89
Волочнюк Д. М.	107	Мірошниченко А. А.	30
Волощук І. В. .	105	Мосіна А. О.	96
Галайчак С. А.	32	Нікітіна Н. О.	61, 65
Гладков Є. С.	108, 101	Новосельцев І. М.	42
Говор І. В.	99	Онисько М. Ю.	91
Гончаров В. О.	85	Остап'юк М. Ю.	78
Григоренко О. О.	107	Остап'юк Ю. В.	78
Данильчук М. В.	32	Павлова В. В.	96
Дікареєва К. С.	34	Панченко В. Г.	51

Пилипенко О. І.	23
Пільо С. Г. .	105
Піскач Л.	47
Піскунов І. І.	43
Радченко Д. С.	107
Разапова М. С.	45
Рашевський А. С.	97
Решетняк О. О.	63
Рошаль О. Д.	101
Рощина К. В.	38
Руденко Р. Ю.	46
Русанов Е.	107
Сабєров В. Ш.	87
Сабодашко Н. Д.	61
Савлук Т. О.	82
Сахно Я. І.	85, 110
Свояков Р. П.	99
Селезень А.	47
Скрипнік Д. А.	63
Сніжко А. Д.	101
Сободош Н. Й.	49
Тамадаєва В. О.	65
Татарець А. Л.	80, 99
Тімохін О. С.	97
Файзієв О. О.	103
Харченко О. В.	93, 96
Хижун О.	47
Хирна І. О.	51
Циганков О. В.	82
Циганкова В. А. .	105
Чебанов В. А.	82, 85, 97, 110
Чепелева Л. В.	101, 108
Черних А. В.	107
Черних А. В.	107
Черножук Т. В.	46
Шафорост І. Г.	54
Шевченко А. О.	67
Шевченко І. Р.	69
Шипов Р. Г.	108
Юрков К. Ю.	110
Юрченко О. І.	59, 69

ЗМІСТ

Програма конференції.....	4
Фізична та Неорганічна хімія	9
Аналітична хімія	56
Органічна хімія	71
Авторський покажчик.....	112

НАУКОВЕ ВИДАННЯ

XVI Всеукраїнська наукова
конференція студентів та аспірантів
"Хімічні Каразінські читання - 2024"
(ХКЧ'24)
(30 квітня 2024 року, м. Харків)

Тези доповідей
Українською, англійською мовами

Відповідальні за випуск *Н. О. Леонова*

Комп'ютерне верстання *Я. В. Колесник*

Підписано до друку ХХ.04.24

Папір офсетний

Друк. арк –

Зам. №131/20

Обл.-вид. арк. –

Формат 60x84/16

Друк різнограф

Наклад 20 прим.

Ціна договірна

Видавець і виготовлювач

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна,

61022, м. Харків, майд. Свободи, 4.

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 3367 від 13.01.2009

Видавництво ХНУ імені В.Н. Каразіна

Тел. : 707-24-32