

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ,  
МОЛОДІ ТА СПОРТУ УКРАЇНИ**  
**ДОНЕЦЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**  
**ІНСТИТУТ ФІЗИКО-ОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ І ВУГЛЕХІМІЇ**  
**ім. Л.М. ЛИТВИНЕНКА НАНУ**

**ХІМІЧНІ  
ПРОБЛЕМИ  
СЬОГОДЕННЯ**

*Сьома Всеукраїнська наукова конференція  
студентів, аспірантів і молодих учених  
з міжнародною участю*

**ЗБІРКА ТЕЗ ДОПОВІДЕЙ**



*11-14 березня*

**Донецьк – 2013**

**Хімічні проблеми сьогодення:** тези доповідей Сьомої Всеукраїнської наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених з міжнародною участю. / Донецький національний університет; редколегія: О.М. Шендрик (відп.ред.) [та ін.]. – Донецьк, 2013. – 206 с.

З 11 по 14 березня 2013 року в Донецькому національному університеті відбулася Сьома Всеукраїнська наукова конференція студентів, аспірантів і молодих учених з міжнародною участю «Хімічні проблеми сьогодення».

В збірці опубліковані наукові результати досліджень, які виконані в навчальних закладах, наукових установах й інститутах Національної академії наук України, Російської Федерації, Азербайджану та Франції у галузях хімії неорганічних та органічних сполук, аналітичних методів в хімії, кінетики та каталізу, хімії ВМС і матеріалів, моделювання в хімії, хімічної технології, біохімії та сучасної хімічної освіти.

***Підтримка конференції:***

ТОВ «Українські аерозолі» (<http://ukraerosol.com>)

Науково-сервісна фірма «ОТАВА» (м. Київ)

Журнал біоорганічної та медичної хімії «Ukrainica Bioorganica Acta»

Провідний український лабораторний портал [labprice.ua](http://labprice.ua)

Редакційна колегія: О.М. Шендрик, проф. (відп. ред.)

А.С. Алемасова, проф.

Є.І. Гетьман, проф.

В.М. Михальчук, проф.

С.Л. Богза, проф.

В.І. Мельниченко, доц.

Є.О. Калініченко

Адреса редколегії: 83001, м. Донецьк, вул. Університетська, 24,  
хімічний факультет.

© Донецький національний університет, 2013

© Колектив авторів, 2013

© О.М. Шендрик (відп. ред.), 2013

ISBN 978-966-1571-72-2 © «Ноулідж», 2013

## ПРОГРАМНИЙ КОМІТЕТ

*Шендрик Олександр Миколайович* – голова оргкомітету, д.х.н., проф., декан хімічного факультету ДонНУ

*Мельниченко Василь Іванович* – заступник голови, к.х.н., доцент, заступник декана хімічного факультету ДонНУ з наукової роботи

*Алемасова Антоніна Сергіївна* – д.х.н., проф., зав. кафедри аналітичної хімії ДонНУ

*Богза Сергій Леонідович* – д.х.н., проф., зав. кафедри органічної хімії ДонНУ

*Борзенко Берта Георгіївна* – д.б.н., проф., зав. кафедри біохімії ДонНМУ ім. М. Горького

*Гетьман Євген Іванович* – д.х.н., проф., ДонНУ

*Лобачов Володимир Леонідович* – д.х.н., проф., ДонНУ

*Михальчук Володимир Михайлович* – д.х.н., проф., зав. кафедри фізичної хімії ДонНУ

*Олійник Микола Максимович* – д.х.н., проф., ДонНУ

*Опейда Йосип Олексійович* – д.х.н., проф., заступник директора ІнФОВ НАНУ

*Розанцев Георгій Михайлович* – к.х.н., доц., в.о. зав. кафедри неорганічної хімії ДонНУ

*Шпанько Ігор Васильович* – д.х.н., проф., ДонНУ

*Яблочкова Наталія Василівна* – к.х.н., доц. кафедри неорганічної хімії ДонНУ

## ОРГАНІЗАЦІЙНИЙ КОМІТЕТ

*Шендрик Олександр Миколайович* – голова, д.х.н., проф., декан хімічного факультету ДонНУ

*Ігнатів Олексій Володимирович* – заступник голови, к.х.н., доцент, ДонНУ

*Ковальова Анастасія Вадимівна* – секретар оргкомітету, аспірант, ДонНУ

*Ананьєва Дар'я Юріївна* – студент, ДонНУ

*Жильцова Світлана Віталіївна* – к.х.н., старший викладач, ДонНУ

*Калініченко Євген Олександрович* – співробітник АТ «Люкс», м. Донецьк

*Компанець Михайло Олександрович* – к.х.н., н.с., голова ради молодих учених ІнФОВ НАНУ

*Лебедкова Ольга Сергіївна* – асистент, ДонНУ

*Леонова Наталя Геннадіївна* – співробітник кафедри фізичної хімії, ДонНУ

*Одарюк Вікторія Валентинівна* – м.н.с., ДонНУ

*Раєнко Геннадій Федорович* – к.х.н., с.н.с., вчений секретар ІнФОВ НАНУ

*Цяпало Олександр Степанович* – м.н.с., ДонНУ

## INVESTIGATION OF THE $\text{AgInS}_2\text{-Ag}_9\text{GaS}_6$ SYSTEM BY USING X-RAY AND DIFFERENTIAL-THERMAL ANALYSIS

Ivashchenko I. A., Olekseyuk I. D., *Danylyuk I.V.*

East-European National University

[danylyuk.iryana@gmail.com](mailto:danylyuk.iryana@gmail.com)

Quasiternary system  $\text{Ag}_2\text{S-Ga}_2\text{S}_3\text{-In}_2\text{S}_3$  is an interesting subject for studying, because large homogeneity regions based on binary and ternary chalcogenides can be formed in this system and a necessary step in the investigation of the  $\text{Ag}_2\text{S-Ga}_2\text{S}_3\text{-In}_2\text{S}_3$  is studying the  $\text{AgInS}_2\text{-Ag}_9\text{GaS}_6$  system.

By direct single-temperature method, 11 alloys were synthesized from high-purity elements (Ag – 99.99 wt. %; Ga – 99.999 wt. %; In – 99.999 wt. %; S – 99.9999 wt. %) in evacuated quartz ampoules at maximum temperature 1200 K. The samples were annealed at 820 K for 300 hours and then quenched into cold water. X-ray phase analysis (XRD) of the alloys was performed using DRON 4-13 diffractometer with  $\text{CuK}_\alpha$  radiation (step  $0.05^\circ$ , exposure time 2 s). Differential-thermal (DTA) curves were recorded using Pt/Pt-Rh thermocouples on a combination Thermodent regulated-heating furnace and H307-1 two-coordinate recorder set.

Based on the XRD and DTA results, the polythermal section of the  $\text{AgInS}_2\text{-Ag}_9\text{GaS}_6$  system was constructed (Fig. 1). Liquidus of the section consists of curves of primary crystallization of  $\alpha$ -solid solutions based on  $\text{AgIn}_5\text{S}_8$ ,  $\beta$ -solid solutions based on  $\text{AgInS}_2$  and  $\gamma$ -solid solutions based on  $\text{Ag}_9\text{GaS}_6$ . Solidus of the system is represented by curves of the end of crystallization of  $\beta$ -,  $\gamma$ -solid solutions and eutectic horizontal line, on which nonvariant process  $L_E \leftrightarrow \gamma + \beta$  takes place, with coordinates of eutectic point: 60 mol. %  $\text{Ag}_9\text{GaS}_6$ , 965 K. The process of secondary crystallization  $L + \alpha + \beta$  takes place in the range of temperature 1160-1140 K. The extent of the  $\beta$ -solid solution is 30 mol. %  $\text{Ag}_9\text{GaS}_6$  at 965 K and decreases to 21 mol. %  $\text{Ag}_9\text{GaS}_6$  at 820 K.

The lattice parameters in the solid solution range change from  $a=0.5876(2)$  nm,  $c=1.1201(6)$  nm for the  $\text{AgInS}_2$  (S. G. I-42d) to  $a=0.5847(5)$  nm,  $c=1.1407(5)$  nm for the sample of composition 70 mol. %  $\text{AgInS}_2$  – 30 mol. %  $\text{Ag}_9\text{GaS}_6$ . The extent of the  $\gamma$ -solid solution range at 965 K is 20 mol. %  $\text{AgInS}_2$  and decreases to 12 mol. %  $\text{AgInS}_2$  at 820 K. The lattice parameters in the solid solution range change from  $a=1.1031(2)$  nm for the  $\text{Ag}_9\text{GaS}_6$  (S. G. F-43m) to  $a=1.0953(2)$  nm for the sample of composition 20 mol. %  $\text{AgInS}_2$  – 80 mol. %  $\text{Ag}_9\text{GaS}_6$ .

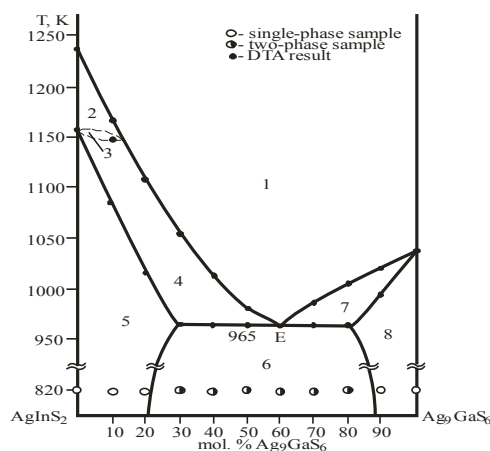


Fig. 1. Polythermal section of the  $\text{AgInS}_2\text{-Ag}_9\text{GaS}_6$  system: (1) L; (2)  $L+\alpha$ ; (3)  $L+\alpha+\beta$ ; (4)  $L+\beta$ ; (5)  $\beta$ ; (6)  $\gamma+\beta$ ; (7)  $L+\gamma$ ; (8)  $\gamma$ .

## ПОЛУЧЕНИЕ ТЕТРАЦИКЛОФОСФАТА БАРИЯ

*Бойко М.М., Давискиба В.В., Лисак Т.В.*

Уманский национальный университет садоводства

*[boiko.mira@yandex.ua](mailto:boiko.mira@yandex.ua)*

В данной работе описан способ получения тетрациклофосфата бария.

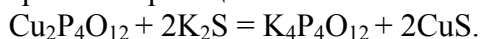
Согласно современной классификации, конденсированные или молекулярно-дегидратированные фосфаты (название, получившее международное признание, связано с их получением путем анионной конденсации при обезвоживании ортофосфатов) построены из отдельных структурных единиц - тетраэдров  $PO_4$ . В зависимости от способа соединения этих единиц различают три структурные группы:

1) линейные (полифосфаты) - цепочки из тетраэдров  $PO_4$ , связанных между собой атомами кислорода, общими для двух соседних тетраэдров;

2) циклические (метафосфаты) - кольца из тетраэдров  $PO_4$ , связанных между собой как и в предыдущем случае;

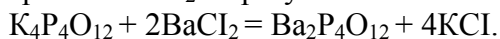
3) разветвленные (изополи-, изомета- и ультрафосфаты) - кроме цепочек и колец, содержат так называемые точки разветвления, т. е. тетраэдры  $PO_4$ , в которых три атома кислорода являются общими с соседними тетраэдрами.

Тетрациклофосфат калия  $K_4P_4O_{12}$  получали при взаимодействии тетрациклофосфата меди(II) с концентрированным раствором сульфида калия  $K_2S$ . При этом протекает реакция:

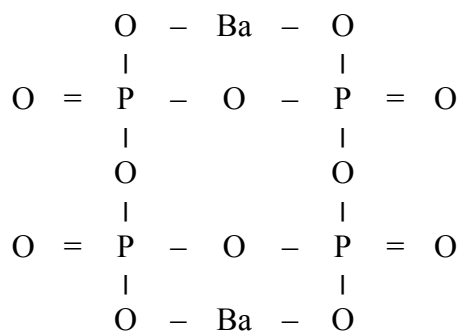


К концентрированному раствору, содержащему  $K_4P_4O_{12}$ , медленно прибавляли этанол, в результате чего тетрациклофосфат калия выпадал в осадок, который фильтровали и высушивали на воздухе. Сульфид меди(II), образовавшийся в результате реакции, отфильтровывали на фильтре Нуча.

Затем к тетрациклофосфату калия прибавляли при постоянном перемешивании раствор соли  $BaCl_2$ . В результате был получен осадок  $Ba_2P_4O_{12}$ :



Структурная формула вещества следующая:



Тетрациклофосфат бария, как и  $K_4P_4O_{12}$ , отделяли фильтрованием и сушили на воздухе. Высушенный  $Ba_2P_4O_{12}$  исследовали на содержание кристаллизационной воды. Для этого навеску  $Ba_2P_4O_{12}$  помещали в муфельную печь и выдерживали при температуре  $200^{\circ}C$  на протяжении двух часов, потом охлаждали и взвешивали. По результатам взвешивания определена формула кристаллогидрата тетрациклофосфата бария:  $Ba_2P_4O_{12} \cdot 2H_2O$ .

## ПОЛУЧЕНИЕ МИКРО- И НАНОЧАСТИЦ ZnS ИЗ ТИОМОЧЕВИННЫХ РАСТВОРОВ

*Булгакова А.В., Софронов Д.С.*

ГНУ НТК «Институт монокристаллов» НАН Украины, г. Харьков

[bulgakova.alena.vladimirovna@gmail.com](mailto:bulgakova.alena.vladimirovna@gmail.com)

ZnS – широкозонный полупроводник с  $E_g=3,6$  эВ – является одним из перспективных материалов для применения в оптике, электронике, лазерной технике, солнечной энергетике и др. Электролюминофоры на основе сульфида цинка обладают высокой яркостью свечения и используются в электролюминесцентных источниках света. Функциональные свойства материалов во многом определяются размером и формой частиц, поэтому большое внимание уделяется получению частиц ZnS с заданными морфологическими характеристиками.

Наиболее простой способ синтеза – осаждение из водных растворов. В качестве сульфидирующего реагента, как правило, используют тиомочевину, которая при нагревании в водном растворе легко гидролизуеться с образованием  $S^{2-}$ ,  $CO_3^{2-}$  и  $NH_3$ . Образовавшиеся ионы  $S^{2-}$  взаимодействуют с катионами металлов с образованием соответствующих сульфидов. Варьирование условий процесса осаждения оказывает влияние на процесс зародышеобразования и роста частиц сульфидов металлов.

В работе исследовано влияние pH раствора и микроволнового (МВ) излучения на морфологические характеристики частиц ZnS. Осаждение проводили из 0,1-1 М растворов нитрата цинка тиомочевинной. pH растворов варьировали от 8 до 12 добавлением водного раствора аммиака. Температура осаждения составляла 100°C. МВ синтез проводили на МВ установке MARS (GEM Corporation Matthews, USA).

При осаждении из растворов  $Zn(NO_3)_2$ , независимо от условий осаждения, наблюдается формирование сульфида цинка со структурой вюрцита. По данным рентгенофазового анализа для порошков, синтезированных при pH менее 10, фиксируется присутствие примесной фазы оксида цинка.

При pH 8.1 и соотношении  $c(Zn^{2+}):c((NH_2)_2CS)$  1:1 образуется рыхлый мелкодисперсный порошок, сформированный сферическими частицами (менее 0,1 мкм). Увеличение содержания тиомочевины не приводит к существенному изменению морфологии частиц. Повышение pH осаждения более 11 способствует формированию сферических частиц, размер которых варьируется в пределах 0.3-1 мкм. Увеличение соотношения  $c(Zn^{2+}):c((NH_2)_2CS)$  приводит к уменьшению частиц до 0,1-0,3 мкм.

Проведение осаждения частиц ZnS в условиях МВ активации при 90 °C способствует формированию сферических частиц с размером 0,5-1 мкм. Увеличение концентрации тиомочевины при этом не оказывает существенного влияния на форму и размер частиц. Однако, в случае повышения температуры осаждения до 150°C, увеличение концентрации тиомочевины способствует укрупнению частиц до 1-1,5 мкм.

КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ  $WOCl_4$  И  $WO_2Cl_2$ С  $\beta$ -ДИКЕТОНАМИ В НЕВОДНЫХ СРЕДАХ

Войнова Е.В., Осипенко О.С., Абраменко В.Л.

Восточноукраинский национальный университет имени Владимира Даля, г.Луганск

[abramenko@lds.net.ua](mailto:abramenko@lds.net.ua)

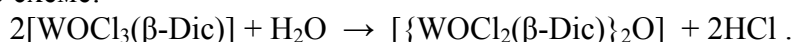
Кето-енольная таутомерия  $\beta$ -дикетонов ( $\beta$ -DicH) открывает возможности синтеза на их основе комплексных соединений двух типов – молекулярных комплексов (МК) с полностью сохраненной лигандной системой  $\beta$ -DicH и внутрикислотных соединений (ВКС), содержащих депротонированные лиганды  $\beta$ -Dic<sup>-</sup>. Сведения о  $\beta$ -дикетонатах вольфрама(VI) немногочисленны и относятся в основном к ВКС типа  $WO_2(\beta$ -Dic)<sub>2</sub>, охарактеризованных методом ИК спектроскопии. Взаимодействие  $WOCl_4$  с жидким ацетилацетоном приводит к образованию комплекса  $[WO_2Cl_2(Асac)]^-(Z^+)$  ( $Z^+ = 2,4,6$ -триметил-3-ацетилпирилий), строение которого установлено методом РСА.

В данной работе приведены результаты исследования комплексообразования  $WOCl_4$  и  $WO_2Cl_2$  с серией  $\beta$ -дикетонов  $RC(O)CH_2C(O)R^1$  в среде неполярных и малополярных растворителей, обсуждаются ИК спектры выделенных комплексов.

**$\beta$ -DicH:** R = CF<sub>3</sub>, R<sup>1</sup> = Ph (I); R = Me, R<sup>1</sup> = Me (II); R = Me, R<sup>1</sup> = Ph (III);

R = Me, R<sup>1</sup> = OEt (IV); R = 4-OMeC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, R<sup>1</sup> = 4-OMeC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (V); R = CF<sub>3</sub>, R<sup>1</sup> = Me (VI)

Согласно данным элементного анализа, нефторированные  $\beta$ -дикетоны II-V образуют мономерные ВКС  $[WOCl_3(\beta$ -Dic)]<sub>2</sub>, а фторированные аналоги I, VI – димерные комплексы  $[{\{WOCl_2(\beta$ -Dic)\}\_2O]. Учитывая высокую гигроскопичность мономерных ВКС, можно предположить, что димерные комплексы получают через стадию образования мономерного продукта с последующим его гидролизом под действием небольших количеств воды, содержащихся в не полностью осушенных растворителях, по схеме:



В ИК спектрах свободных лигандов в области 1750 – 1500 см<sup>-1</sup> наблюдается серия интенсивных, иногда перекрывающихся полос, относимых к суперпозиции частот колебаний связей C-C, C=C, C=O кетонной и енольной таутомерных форм лигандов. При образовании комплексов лиганды I – VI фиксируются в енольной форме и в спектрах исчезают характерные для кетонной формы коротковолновые полосы поглощения. Вместо них в спектрах комплексов вольфрама появляются интенсивные полосы в области 1570-1612 и 1508-1535 см<sup>-1</sup>, обусловленные комбинацией частот  $\nu$ (C-C) и  $\nu$ (C-O), аналогичной для  $\beta$ -дикетонатов других металлов. В спектрах комплексов отмечается кроме того высокочастотное смещение полос колебаний скелета молекул лигандов (700 – 1460 см<sup>-1</sup>) в среднем на 20 - 40 см<sup>-1</sup>. Сильные полосы в области 974 - 995 см<sup>-1</sup> отвечают валентным колебаниям связи W=O мономеров, а уширенные интенсивные полосы в области 790-850 см<sup>-1</sup> - валентным колебаниям связей в мостиковом фрагменте W-O-W.

Таким образом, можно предположить, что в ВКС обоих типов – мономерном и димерном – связи между центральным атомом и  $\beta$ -дикетонами осуществляются через два атома кислорода депротонированного лиганда в енольной форме, а атом вольфрама имеет октаэдрическую координацию. Это предположение подтверждено результатами РСА мономерных и димерных комплексов с лигандами I, IV и VI.

Взаимодействием  $WO_2Cl_2$  с  $\beta$ -DicH получены ВКС  $[WO_2(\beta$ -Dic)<sub>2</sub>], которые по данным ИК спектроскопии имеют цис-октаэдрическое строение, а лиганды координированы центральным атомом в енольной форме через два атома кислорода.

## ВПЛИВ МЕТОДІВ СИНТЕЗУ НА ВЛАСТИВОСТІ СИСТЕМИ



*Войтенко Т.А.*, Дегтярьова К.В., Неділько С.А., Неділько С.Г., Чукова О.В.,  
Щербацький В.П.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

[voitana@ukr.net](mailto:voitana@ukr.net)

Сполуки на основі ортованадатів рідкісноземельних елементів широко використовуються в різних галузях науки і техніки. Відомо, що властивості складних оксидів в більшості випадків суттєво залежать від методу синтезу. Вибір того чи іншого способу одержання дозволяє впливати на структурні, морфологічні характеристики (ступінь кристалічності, пористість, розміри зерен), оптичні, електричні властивості. Тому метою даної роботи є вивчення впливу методу синтезу, зокрема, твердофазного методу і методу співосадження, на структурні, морфологічні та люмінесцентні властивості сполук складу  $\text{La}_{1-x}\text{Eu}_x\text{VO}_4$ .

Фазовий склад та параметри кристалічних ґраток визначали на приладах ДРОН-3М ( $\text{Cu}_{\text{K}\alpha}$ -випромінювання з Ni-фільтром) та Shimadzu LabX XRD-6000 ( $\text{Cu}_{\text{K}\alpha}$ -випромінювання, діапазон кутів  $10 < 2\theta < 90^\circ$ , зразки у вигляді порошків). Зйомку проводили зі швидкістю 2 град./хв.

Мікроструктуру одержаних сполук вивчали за допомогою скануючого електронного мікроскопа Hitachi S – 2400.

Зразки складу  $\text{La}_{1-x}\text{Eu}_x\text{VO}_4$  було синтезовано твердофазним методом та методом сумісного осадження компонентів.

Фазову індивідуальність сполук системи  $\text{La}_{1-x}\text{Eu}_x\text{VO}_4$   $0 \leq x \leq 0,3$  характеризували за допомогою РФА. Було встановлено, що зразки, одержані і твердофазним методом, і методом сумісного осадження компонентів є однофазними. Симетрія чистого ортованадату лантану відповідає структурному типу монациту  $\text{P2}_1/\text{n}$ . В обох випадках, при збільшенні концентрації Європію при заміщенні лантану на Європій відбувається перехід від моноклінної до тетрагональної структури (просторова група  $\text{I41}/\text{amd}$ ).

Морфологію та розміри часточок, що можуть складатися з одного або кількох кристалітів, а також можуть містити аморфну частину, було досліджено методом скануючої електронної мікроскопії. Показано, що поверхня кристалітів у випадку методу співосадження компонентів є більш рихлою і пористою. Розміри частинок при цьому, в порівнянні з твердофазним методом, зменшуються приблизно в 4 рази. На СЕМ-фотографіях об'єктів видно часточки різної форми і середніми розмірами, зокрема, 2 мкм для твердо фазного методу та 0,5 мкм для методу сумісного осадження компонентів. Таким чином, використовуючи метод сумісного осадження компонентів вдається одержувати матеріал з меншим розміром полікристалітів (приблизно сотні нанометрів), що в подальшому, можливо, матиме вплив на люмінесцентні властивості одержаних сполук.

Для сполук  $\text{La}_{1-x}\text{Eu}_x\text{VO}_4$  також були зняті спектри люмінесценції. Показано, що люмінесценція іонів  $\text{Eu}^{3+}$  у твердих розчинах  $\text{La}_{1-x}\text{Eu}_x\text{VO}_4$  може бути викликана безпосередньо внутрішніми переходами в домішкових йонах. Має місце і енергетичний перехід від кристалічної матриці до  $\text{Eu}^{3+}$ -іонів. Ефективність передачі енергії від матриці до  $\text{Eu}^{3+}$ -іонів залежить від методу синтезу і концентрації іонів  $\text{Eu}^{3+}$ .

СОЛИ ГОЛЬМИЯ И ГАДОЛИНИЯ С ГЕТЕРОПОЛИАНИОНОМ  
СТРУКТУРЫ АНДЕРСОНА

Гумерова Н.И., Пилипенко А. О., Розанцев Г.М., Радио С. В.

Донецкий национальный университет

[n.gumerova@donnu.edu.ua](mailto:n.gumerova@donnu.edu.ua)

Гетерополисоединения (ГПС) – большой класс необычных координационных соединений, в которых полиоксометаллатная сфера выступает в качестве лиганда по отношению к одному, иногда нескольким гетероатомам (ГА). Анионы в ГПС построены из искаженных металл–кислородных октаэдров  $MO_6$  (где  $M - V, Nb, Ta, Mo, W$ ), которые соединяются между собой вершинами или ребрами и образуют координационную сферу ГА. Одним из типов ГПА являются анионы со структурой Андерсона типа  $[H_xXM_6O_{24}]^{n-}$ , в которых вокруг ГА образуется незамкнутая комплексная система, но замкнутая цепочка октаэдров  $MO_6$ , которые соединены ребрами. Главным отличием ГПА этого типа является то, что октаэдры  $MO_6$  имеют два концевых атома кислорода, находящихся в цис-положении. Существует ряд соединений, в которых в качестве аниона выступает анион со структурой Андерсона, а в качестве катиона – катион лантанида.

Целью представленной научной работы является установление условий синтеза гетерополигексавольфрамоникелатов (II) гольмия и гадолиния, физико-химический анализ полученных солей. В результате выполнения работы получены следующие результаты.

Установлено, что гетерополигексавольфрамоникелаты (II) гольмия и гадолиния  $Ln_4[Ni(OH)_6W_6O_{18}]_3 \cdot nH_2O$  можно синтезировать как по прямой реакции в системе  $Ln^{3+} - Ni^{2+} - WO_4^{2-} - H^+ - H_2O$  ( $v(Ln^{3+}) : v(Ni^{2+}) : v(WO_4^{2-}) : v(H^+) = 1,33 : 1 : 6 : 6$ ), так и по обменной реакции стехиометрических количеств  $Ln^{3+}$  и  $Na_4[Ni(OH)_6W_6O_{18}] \cdot 16H_2O$ . Методом ИК-спектроскопического анализа показано, что анионы в выделенных солях относятся к структуре Андерсона  $[Ni(OH)_6W_6O_{18}]^{4-}$ . Методом ТГА охарактеризована природа воды в синтезированных соединениях. Методом сканирующей электронной микроскопии исследована морфология поверхности (рис. 1) полученных солей и установлено, что способ получения влияет на размер зерен: 100-250 нм в случае прямой реакции, 200-400 нм в случае обменной реакции. Однофазность полученных солей подтверждена равномерным контрастом поверхности в режиме обратно рассеянных электронов.

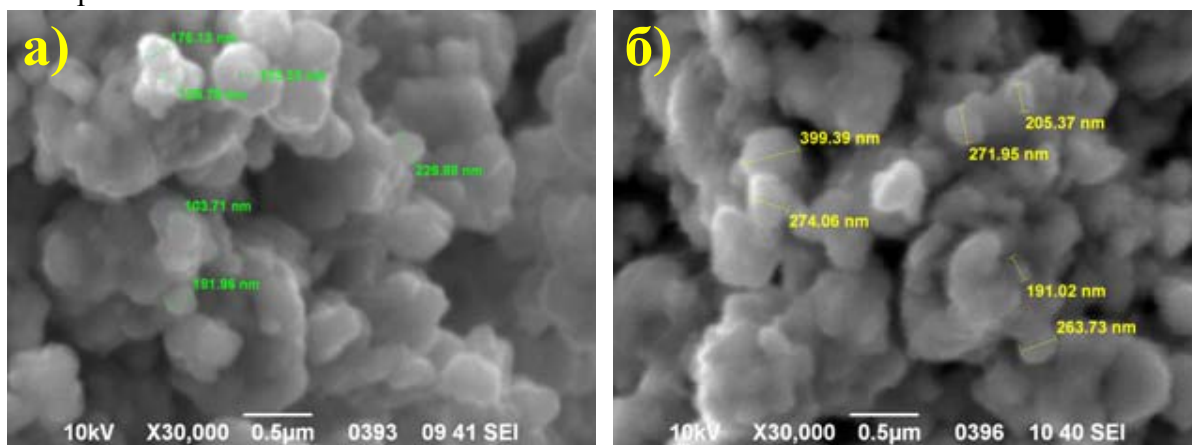


Рис. 1. SEM-изображение поверхности порошка  $Gd_4[Ni(OH)_6W_6O_{18}]_3 \cdot nH_2O$ : а) получен по прямой реакции ( $n = 45$ ); б) получен по обменной реакции ( $n = 42$ ).

**СИНТЕЗ И ИК СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ  
МОНОМЕРНОГО КОМПЛЕКСА W(VI) С ТЕНОИЛТРИФТОРАЦЕТОНОМ***Еманова О.С., Федирко С.О., Жарский Н.И., Абраменко В.Л.*Восточноукраинский национальный университет имени Владимира Даля, г.Луганск  
[abramenko@lds.net.ua](mailto:abramenko@lds.net.ua)

Ранее было установлено экспериментально и подтверждено методом РСА, что при взаимодействии  $WOCl_4$  с фторсодержащими  $\beta$ -дикетонами – 1,1,1-трифторацетил-или бензоилацетоном – в кипящей смеси гексан-бензол (10:1) образуются димерные внутрикомплексные соединения (ВКС)  $[\{WOCl_2(\beta-Dic)\}_2O]$ , в структуре которых атомы вольфрама по углам октаэдра координируют атомы кислорода  $O_k$  кратной связи  $W=O$ , два атома кислорода  $O_{Dic}$  депротонированной молекулы  $\beta$ -дикетона и два атома хлора. Шестое координационное место занимает атом кислорода  $O_m$  мостикового фрагмента  $W-O-W$ . В тех же условиях с нефторированными  $\beta$ -дикетонами получены как мономерные, так и димерные ВКС.

В данном сообщении приведены результаты синтеза и ИК спектроскопического исследования мономерного комплекса оксовольфрама(VI) с теноилтрифторацетоном состава  $[WOCl_3(\beta-Dic)]$ . Комплекс получали взаимодействием  $WOCl_4$  с  $\beta$ -дикетоном в среде кипящего гексана. При охлаждении соединение кристаллизуется виде темных, почти черных игл, темно-коричневых при растирании, хорошо растворимых в ДМФА, ДМСО и ацетоне, хуже в метаноле, нерастворимых в неполярных растворителях. Т. пл. 113-114 °С.

В ИК спектре лиганда происходят следующие изменения при образовании комплекса  $[WOCl_3(\beta-Dic)]$ . В области 1750-1500  $cm^{-1}$  в спектре теноилтрифторацетона наблюдается серия перекрывающихся полос (1700 пл., 1670, 1660, 1654, 1640, 1597, 1560, 1520  $cm^{-1}$ ), относимых к колебания сложной системы сопряженных связей  $C=O$ ,  $C=C$ ,  $C-C$  кетонной и енольной таутомерных форм лиганда. В результате комплексообразования исчезают высокочастотные полосы и появляются две очень интенсивные полосы при 1610 и 1512  $cm^{-1}$ . В области частот колебаний скелета молекул (1350-1200  $cm^{-1}$ ) наблюдается заметное гипсохромное смещение полос на 20-40  $cm^{-1}$ . Небольшие смещения полос отмечаются и в области 1200-1000  $cm^{-1}$ . Весьма интенсивная полоса при 987  $cm^{-1}$  в спектре комплекса отвечает валентным колебаниям кратной связи  $W=O$ . В области низких частот следует отметить новые полосы при 625 и 526  $cm^{-1}$ , основной вклад в которые вносят, по-видимому, валентные колебания связи  $W-O_{Dic}$ .

Таким образом, результаты элементного анализа и ИК спектроскопического исследования в сопоставлении с литературными данными позволяют сделать вывод, что полученный мономерный комплекс имеет октаэдрическое строение с координацией лиганда в депротонированной енольной форме через атомы кислорода  $O_{Dic}$ . Остальные координационные места в молекуле комплекса занимают концевой оксолиганд и три атома хлора. По аналогии с другими  $\beta$ -дикетонатами оксовольфрама(VI) можно предположить, что в *транс*-положении к оксоатому находится атом O теноильной группы, а не ионизированный атом O трифторацетила.

## СИНТЕЗ Ln(III)-СОДЕРЖАЩИХ (Ln = Ce, Pr, Dy, Ho, Er) ПОЛИОКСОВОЛЬФРАМАТОВ

Каплюк Т.А., *Иванцова Э.С.*, Стельмашук О.К., Радио С.В.

Донецкий национальный университет

[radio@donnu.edu.ua](mailto:radio@donnu.edu.ua)

Полиоксометаллаты – большой класс металл-кислородных соединений с уникальным структурным разнообразием и интересными физико-химическими свойствами, которые находят применение в катализе, медицине и материаловедении. Катионы лантаноидов способны координироваться к лакунарным полиоксометаллатам, образуя при этом новые соединения/материалы с уникальными люминесцентными, магнитными и каталитическими свойствами.

Цель работы состояла в установлении условий синтеза лантаноидсодержащих полиоксовольфраматов (гетерополисоединений с анионом со структурой Пикока-Уикли, изополисоединений с паравольфрамат Б-, гептавольфрамат- и метавольфрамат-анионом) из водных растворов  $\text{Ln}^{3+} - \text{WO}_4^{2-} - \text{H}^+ - \text{H}_2\text{O}$  (Ln = Ce, Pr, Dy, Ho, Er) с различной кислотностью  $Z = \nu(\text{H}^+)/\nu(\text{WO}_4^{2-}) = 0.80, 1.17, 1.29, 1.50$ . А также исследование выделенных солей методами ИК-спектроскопии (FTIR "Spectrum BXII"), рентгенофазового анализа ("ДРОН-3"), сканирующей электронной микроскопии (JSM-6490LV). Основные итоги работы, которые будут представлены в докладе:

1. Разработана новые методики синтеза кристаллических гетерополидекавольфрамоцерата (IV) натрия  $\text{Na}_6\text{H}_2[\text{Ce}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 30\text{H}_2\text{O}$  и гетерополидекавольфрамолантанидатов (III) натрия  $\text{Na}_9[\text{Pr}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 16\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Na}_9[\text{Dy}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 29\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Na}_9[\text{Ho}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 23\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Na}_9[\text{Er}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 17\text{H}_2\text{O}$  с анионом со структурой Пикока-Уикли из водно-органической среды при  $Z = 0.80$ . Методом СЭМ показано, что размер зерен гетерополисоединений находится в пределах 200-400 нм.

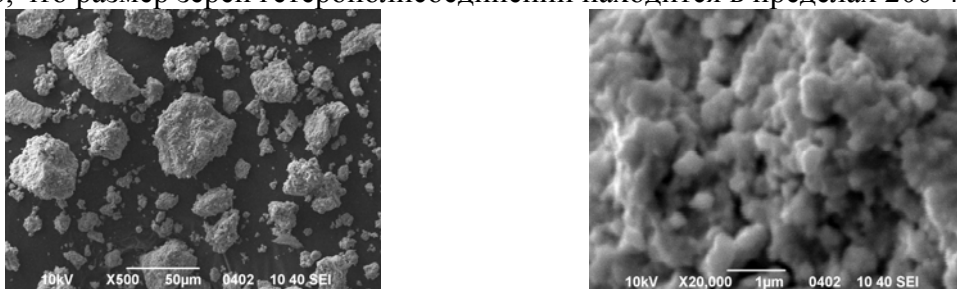


Рис. 1. SEM-изображение поверхности порошка  $\text{Na}_9[\text{Ho}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 23\text{H}_2\text{O}$ :

слева — увеличение в 500 раз; справа — увеличение в 20000 раз.

2. Установлены условия синтеза паравольфраматов Б гольмия и церия  $\text{Ho}_{10}[\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]_3 \cdot 54\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{Ce}_{10}[\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]_3 \cdot 94\text{H}_2\text{O}$  в результате обменной реакции из паравольфрамата Б натрия  $\text{Na}_{10}[\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]_3 \cdot 27\text{H}_2\text{O}$ . Методом СЭМ показано, что размер зерен изополивольфраматов находится в пределах 200-450 нм.

3. Установлены условия синтеза гидрогептавольфраматов  $\text{Ce}_5[\text{HW}_7\text{O}_{24}]_3 \cdot 56\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Pr}_5[\text{HW}_7\text{O}_{24}]_3 \cdot 49\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{Ho}_5[\text{HW}_7\text{O}_{24}]_3 \cdot 49\text{H}_2\text{O}$  при  $Z = 1.29$ .

4. Определены условия синтеза ундекавольфраматов  $\text{Na}_2\text{Ce}_2[\text{Ce}_2(\text{H}_2\text{O})_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{72}(\text{OH})_2] \cdot 35\text{H}_2\text{O}$   $\text{Na}_2\text{Pr}_2[\text{Pr}_2(\text{H}_2\text{O})_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{72}(\text{OH})_2] \cdot 37\text{H}_2\text{O}$   $\text{Na}_2\text{Ho}_2[\text{Ho}_2(\text{H}_2\text{O})_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{72}(\text{OH})_2] \cdot 46\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{Er}_2[\text{Er}_2(\text{H}_2\text{O})_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{72}(\text{OH})_4] \cdot 38\text{H}_2\text{O}$  с лакунарным метавольфрамат-анионом со структурой Кеггина при  $Z = 1.50$ .

5. Однофазность полученных солей подтверждена равномерным контрастом поверхности в режиме обратно рассеянных электронов и равномерным распределением Ln, Na, W, O без сегрегаций и ликваций при сканировании поверхности в характеристическом рентгеновском излучении. Методом РФА проведена идентификация фаз термолитизированных солей.

## СИНТЕЗ ТА МІКРОСТРУКТУРА ВАНАДАТУ СВИНЦЮ-НАТРІЮ

*Каракай Л., Яблочкова Н.В., Гавва М.М.*

Донецький національний університет

[lilek\\_dallas@mail.ru](mailto:lilek_dallas@mail.ru)

В останні роки зацікавленість дослідників до сполук зі структурою апатиту не слабшає. По-перше, їм притаманний комплекс практично значимих властивостей, тому вони можуть бути використані, наприклад, в якості твердих стабільних форм для утилізації радіоактивних відходів, сорбентів, у якості твердих електролітів, каталізаторів, люмінофорів, лазерних матеріалів і в багатьох інших випадках. По-друге, для них характерний широкий спектр ізоморфних заміщень, що дозволяє шляхом введення ізоморфних компонентів регулювати їх властивості. Зокрема, шляхом часткового заміщення в структурі апатиту іонів двовалентних елементів на іони рідкісноземельних та інших елементів одержують люмінісцентні й лазерні матеріали.

Не останнє місце серед цих сполук займає ванадієвий апатит свинцю  $Pb_{10}(VO_4)_6(OH)_2$ . При модифікуванні рідкісноземельними елементами він може стати люмінофором, лужними металами - твердим електролітом з більш високою іонною провідністю, ніж  $Pb_8Na_2(PO_4)_6$ .

Однак, на відміну від апатитів лужноземельних елементів, в апатиті свинцю, заміщення за схемою  $Pb^{2+} + OH^- \rightarrow Ln^{3+} + \frac{1}{2}O^{2-}$  не реалізується, тому що в каналах структури, куди повинні йти аніони кисню, розташовані не тільки аніони  $OH^-$ , але й активні електронні пари свинцю. При частковій заміні свинцю на натрій за схемою  $Pb^{2+} + OH^- \rightarrow Na^+ + \square$ , сполука зберігає структуру апатиту і має склад  $Pb_8Na_2(VO_4)_6$ , але в каналах структури будуть відсутні аніони  $OH^-$ , а активних електронних пар стане менше. В цьому випадку сполуку  $Pb_8Na_2(VO_4)_6$  можна модифікувати РЗЕ за схемою  $Pb^{2+} + \frac{1}{2}\square \rightarrow Ln^{3+} + \frac{1}{2}O^{2-}$ .

В роботі були синтезовані зразки складу  $Pb_8Na_2(VO_4)_6$  двома методами: керамічним та з розчинів. В якості вихідних сполук використовували  $PbO$ ,  $NH_4VO_3$  та  $Na_2CO_3$ . Початкова температура синтезу складала  $500^\circ C$ , кінцева -  $700^\circ C$ .

Фазовий склад образців вивчали за допомогою рентгенофазового аналізу на апараті ДРОН-3 з використанням відфільтрованного  $CuK_\alpha$ -випромінення. Параметри елементарної комірки а і с розраховували по рентгенівським даним методом найменших квадратів. Ідентифікація сполук проводилась з використанням програми Match і бази даних PDF-2 (ICCD) (International Centre for Diffraction Data).

Оцінку розмірів зерен, напівкількісний хімічний аналіз (похибка до 3%) і визначення рівномірності розподілу елементів по поверхні частинок проводили методом растрової електронної мікроскопії з застосуванням рентгенівського мікроаналізу на растровому електронному мікроскопі JSM-6490LV (JEOL, Японія) за допомогою енергодисперсійного спектрометра INCA Penta FETx3 (OXFORD Instruments, Англія).

Методом РФА встановлено, що однофазну сполуку складу  $Pb_8Na_2(VO_4)_6$  зі структурою апатиту можна синтезувати керамічним методом при температурі  $600^\circ C$ , а з розчинів - при  $500^\circ C$ .  $Pb_8Na_2(VO_4)_6$  є термічно нестійкою сполукою, починаючи з температури  $650^\circ C$ , тому що прожарювання при цій температурі веде до появи в образці малої кількості домішки фази, яку можна віднести до ортованадату свинцю, при  $700^\circ C$  інтенсивність цієї фази ще більше зростає.

**ГИДРОТЕРМАЛЬНЫЙ СИНТЕЗ ЦЕОЛИТА ТИПА ЛОМОНТИТА В ПРИРОДНОЙ СИСТЕМЕ ГАЛЛУАЗИТ-ДОЛОМИТ-ОБСИДИАН***Мамедова Г.А.*

Нахчыванское Отделение Национальной Академии Наук Азербайджана,  
Институт Природных Ресурсов  
[chinashka89@yahoo.com](mailto:chinashka89@yahoo.com)

Нами впервые в системе галлуазит(Г)-доломит(Д)-обсидиан(О) был получен цеолит типа ломонтита. Ломонтит относится к W-каркасам. Ломонтитовый каркас легко возникает при конденсации ксонотлитовых, то есть сдвоенных волластонитовых лент. Характеристика W-структур заключается в том, что все эти каркасы характеризуются двумя основными особенностями: период и идентичности цепочек будет одним из периодов каркаса и число тетраэдров в элементарной ячейке каркаса равняется  $3n$ , где  $n$ - число цепочек.

Эксперименты по гидротермальному синтезу намеченного цеолита проводили в автоклавах типа «Мори» с объемом  $30 \text{ см}^3$  при температуре  $220^\circ\text{C}$ . Концентрация термального раствора NaOH составлял 1,0 N, соотношение исходных компонентов Г:Д:О= 1:3:1.

Фазовый и химический состав исходных, промежуточных и конечных продуктов определяли рентгенографическим (ДРОН-3,5;  $\text{CuK}_\alpha$  – излучение, Ni - фильтр), термографическим (дериватограф Q-1500D) и рентгеноспектральным (СРМ-18) методами анализа.

В качестве исходного сырья для гидротермального синтеза выбраны вулканическое стекло – обсидиан, минералы доломит –  $\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$  и галлуазит -  $\text{Al}_2[\text{Si}_2\text{O}_5](\text{OH})_8$ . Этот цеолит кристаллизуется в моноклинной сингонии с параметрами элементарной ячейки  $a=14.90 \text{ \AA}$ ;  $b=13.17 \text{ \AA}$ ;  $c=7.50 \text{ \AA}$ ,  $\beta=111^\circ 30'$ .

Цеолитный характер полученного образца определен вычислением кислородного объема ( $V_0$ ), изучением де- и регидратационной, а также катионообменной способности. Как известно, общее содержание воды в цеолитах определяется объемом каркасных пустот, доступных для молекул воды. Поэтому представляет интерес вычисление кислородного объема  $V_0$  (объем на один кислород в  $\text{ \AA}$ ).

Графическая зависимость молекулярного объема  $V_m$  от числа кислородов ( $2p+q$ ) носит линейный характер для цеолитов, по которой  $V_0$  приблизительно составляет  $21,66 \text{ \AA}$ . Вычисленное значение  $V_0$  для полученного впервые в данной системе ломонтита составляет  $V_0= 21,98 \text{ \AA}$ , что хорошо согласуется с постоянной величиной  $V_0= 21,66 \text{ \AA}$ , характерной для цеолитов. Цеолитный характер полученного ломонтита установлен и ожидаемыми ионообменными свойствами. Проводили эксперименты по ионному обмену исходных катионов на катионы  $\text{Sr}^{2+}$ ,  $\text{Ce}^{3+}$  и  $\text{Cd}^{3+}$  из растворов, соответствующих солей с концентрациями 1,0-2,0 N при температуре  $90-100^\circ\text{C}$ . Обмен катионов проводили в течение до 15 суток.

Данная работа выполнена при финансовой поддержке Фонда Развития Науки при Президенте Азербайджанской Республики – Грант № EIF/GAM-1-2011-2(4)-26/20/4.

## **СЕЛЕН В ЖИВОМ ВЕЩЕСТВЕ**

*Оникова Ю.Г.* Григорьева А.А.

Восточноукраинский национальный университет имени Владимира Даля

[oniksa93@mail.ru](mailto:oniksa93@mail.ru)

На протяжении многих лет, при изучении содержания токсичных элементов в биосфере, внимание ученых было сосредоточено на тяжелых металлах, список которых начинался с Hg, Pb, Cd, в то время как уровни концентраций селена в экосистемах оставались малоизвестными.

Сера и селен – химически электронные аналоги. Селен, так же как и сера существует в кристаллической и аморфной модификациях и образует соединения сходного состава. В живых организмах он может замещать серу, которая является необходимым биогенным элементом.

Селен мало распространен в природе. Он содержится в небольших количествах в рудах тяжелых металлов. Так как селен энергично мигрирует в биосфере, существуют биогеохимические провинции селена.

В тканях большинства живых существ селен составляет от 0,01 до 1 мг/кг. Концентрируют его некоторые микроорганизмы, грибы, морские обитатели и растения (бобовые, сложноцветные, мареновые, и др.)

В 1952г. селен обнаружили в сетчатке глаза животных и установили совпадение спектральной чувствительности человеческого глаза и элементарного селена, применяемого в фотоэлементах. Была выявлена прямая зависимость между остротой зрения и содержанием селена в глазах. Так, зоркость орла в 100 раз больше зоркости человека, т.к. глаз человека содержит около 7 мкг селена, а глаз орла – 780мг.

Еще в 1967г. было доказано, что селенит натрия  $\text{Na}_2\text{SeO}_3$  может быть очень полезным в ветеринарии и животноводстве, так как он оказался надежнейшим профилактическим средством против некроза печени.

Установлено, что наличие селена защищает организм от накопления продуктов перекисного окисления липидов, способствующих в первую очередь окислительной деструкции клеточных и органоидных мембран, и входит в состав активных центров ферментов: формиатдегидрогеназы, глутатионредуктазы и глутатионпероксидазы.

Однако при содержании селена в рационе более 2 мг/кг у животных возникают острые и хронические формы отравлений, вызывает облысение овец и болезнь копыт, выпадение перьев у птиц.

В заключение можно сделать вывод, что изучение свойств селена, который может выступать как помощником здоровью, так и вредителем, является актуальной задачей. Поэтому на кафедре химии ВНУ им. В.Даля ведутся работы по синтезу селеносодержащих производных гидрохинолинов, некоторые из которых обладают высокой биологической активностью.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КОМПЛЕКСНОЙ ПЕРЕРАБОТКИ И УТИЛИЗАЦИИ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ КОНЦЕНТРИРОВАННОЙ НИТРАТНОЙ КИСЛОТЫ

*Пономарев В.А., Гринь Г.И.*

Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт»  
[ponomaryov@orghim.com.ua](mailto:ponomaryov@orghim.com.ua)

Несмотря на принятые правительством Украины меры по ликвидации запасов систем на основе концентрированной нитратной кислоты типа  $\text{HNO}_3\text{-N}_2\text{O}_4\text{-H}_2\text{O-HF-H}_3\text{PO}_4$  проблема окончательно не решена. Более того длительное хранение последних на складах, как нашего государства так и соседей по постсоветскому блоку добавляет ей остроту.

Нами был проведен комплекс работ по созданию технологии комплексной переработки подобного рода систем.

Неотъемлемой частью схемы переработки HF – содержащих систем, является первоочередное извлечение фтора и выведение его из технологической цепочки.

Экспериментальными исследованиями были установлены технологические и гидродинамические параметры процесса поглощения фтористого водорода кальцийсодержащими реагентами, позволяющие достичь полного поглощения и нейтрализации HF. Показано, что оптимальными параметрами процесса являются следующие значения: линейная скорость газов –  $0,1 \div 0,2$  м/с; плотность орошения –  $18000 \div 22000$  кг/(м<sup>2</sup>·ч); температура 293 – 303К, а в качестве реагента целесообразно использовать карбонат кальция.

Установлена зависимость степени поглощения фтористого водорода водными суспензиями карбоната и гидроксида кальция и показано, что она повышается с увеличением температуры и времени процесса абсорбции HF. Выведены эмпирические уравнения кинетики взаимодействия реагентов для определения времени, необходимого для полного поглощения фтористого водорода.

Определены условия термического разложения водных растворов нитратной кислоты с концентрацией 10 – 40 % масс. Выведены кинетические уравнения и показано, что распад  $\text{HNO}_3$  протекает по уравнению второго порядка. Найдена температурная зависимость константы разложения нитратной кислоты и рассчитаны энергия активации реакции разложения  $\text{HNO}_3$ , которая с увеличением концентрации нитратной кислоты понижается.

Определено влияние состава жидкой фазы на состав газовой фазы в системе  $\text{HNO}_3\text{-H}_2\text{O-HF-H}_3\text{PO}_4\text{-N}_2\text{O}_4$  – под атмосферным давлением и температурах 293 - 323К. На основании фазового равновесия жидкость-газ рассчитано число единиц переноса продувочной колонны

Реализация технологии позволяет достичь практически полной переработки некондиционных систем типа  $\text{HNO}_3\text{-N}_2\text{O}_4\text{-H}_2\text{O-HF-H}_3\text{PO}_4$

**РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ЖИДКИХ И СУСПЕНЗИОННЫХ УДОБРЕНИЙ**

*Привалова Г.С., Савенков А.С., Белогур И.С.*

Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт»

[galyabovx@gmail.com](mailto:galyabovx@gmail.com)

Применение жидких комплексных удобрений (ЖКУ) и биоминеральных удобрений (ЖБМУ) является одним из наиболее перспективных направлений интенсификации сельскохозяйственного производства. Преимуществами жидких по сравнению с гранулированными удобрениями являются меньшие капитальные и эксплуатационные расходы, возможность регулирования в широких пределах соотношения питательных элементов  $N:P_2O_5:K_2O$ , более равномерное внесение в почву. Для повышения эффективности использования в состав могут быть введены микроэлементы, пестициды, стимуляторы роста растений.

В настоящее время применение удобрений под сельскохозяйственные культуры осложняется высокими ценами на минеральные удобрения и большими транспортными расходами при внесении органических удобрений. Поэтому актуальным является изучение удобрений органоминеральных, полученных на основе гуминовых кислот и их соединений с добавлением комплекса макро- и микроэлементов. Эти удобрения применяются в небольших дозировках, поэтому их применение удешевляет производство растениеводческой продукции, в то же время эффективность такого рода удобрений может быть достаточно высокой. Они повышают устойчивость растений к неблагоприятным почвенно-климатическим условиям, повышают всхожесть семян, активизируют процессы обмена веществ, повышают устойчивость растений к стрессовым факторам в различные вегетационные периоды, снижают угнетающее действие химических средств на растения, увеличивают урожайность.

На кафедре ХТНВ, К и Э НТУ «ХПИ» ведутся работы по получению новых видов суспензионных и жидких удобрений.

В ходе исследований разработана технология ЖБМУ с применением гумата калия и разрабатывается методика получения ЖКУ на основе аммиачной воды и фосфорных кислот. Также получены следующие данные по получению новых удобрений:

1. Растворение суперфосфата происходит на 30%, т.е. в нерастворенном осадке остается 70 % этого удобрения;

2. Использование карбамида ограничивается растворимостью, которая зависит от его концентрации и температуры приготовленной смеси (температура должна быть не ниже 10°C);

3. Применение нитроаммофоски показало, что 10-20% питательных элементов остаются в нерастворенной части.

4. Образцы удобрения характеризуются невысокой биогенностью, в них отсутствуют микроорганизмы, мобилизирующие органические фосфаты, грибы. В составе микрофлоры преобладают микробные группировки, которые усваивают органические и минеральные формы азота, что обеспечивает благоприятные условия для интенсификации процессов трансформации азота, при внесении данного удобрения в почву.

5. УФИ незначительно влияет на химический состав и оказывает положительное влияние на проявление фитотоксичных свойств образцов удобрения, примененных в высокой концентрации: всхожесть повышается на 17-42 % по сравнению с необлученными образцами. Данные получены институтом почвоведения и агрохимии им. А.Н. Соколовского.

СИНТЕЗ, КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И ИССЛЕДОВАНИЕ  
ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ СОСТАВА

*Саванкова Т.М.*, Игнатов А.В., Олексюк Е.В., Постоянкіна В.А.

Донецкий национальный университет

[stm\\_88@mail.ru](mailto:stm_88@mail.ru)

Соединения со структурой апатита общей формулой  $M_{10}(\text{EO}_4)_6(\text{Z})_2$  (где  $M=\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Sr}^{2+}$ ,  $\text{Ba}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$ ,  $\text{Eu}^{3+}$ ,  $\text{Y}^{3+}$ ,  $\text{La}^{3+}$  и др.,  $E=\text{Si}^{4+}$ ,  $\text{Ge}^{4+}$ ,  $\text{P}^{5+}$ ,  $\text{V}^{5+}$ ,  $\text{As}^{5+}$ ,  $\text{S}^{6+}$ ,  $\text{Cr}^{6+}$  и др.,  $Z=\text{OH}^-$ ,  $\text{F}^-$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Br}^-$ ,  $\text{I}^-$ ,  $\text{O}^{2-}$  и вакансии  $\square$ ) являются классическим объектом исследования изоморфного замещения как в катионной, так и в анионной подрешетках. Введение изоморфных компонентов в структуру апатита позволяют регулировать свойства получаемых соединений, в том числе ионопроводящие, что позволяет значительно расширить их область применения. Апатиты, модифицированные редкоземельными элементами, используют в качестве люминесцентных и лазерных материалов, стабильных форм для утилизации радиоактивных отходов, катализаторов и т.д. Соединения свинца со структурой апатита за счет анионной проводимости находят применение в качестве твердых электролитов и проводников. Таким образом, возможно получать соединения на основе апатитов с ценными физико-механическими свойствами.

Целью данного исследования являлось изучение электрофизических свойств твердых растворов, образованных вследствие замещения свинца на неодим в ванадате свинца-натрия по схеме:  $\text{Pb}^{2+} + \square \rightarrow \text{Nd}^{3+} + \text{O}^{2-}$ . Образцы состава  $\text{Pb}_{8-x}\text{Na}_2\text{Nd}_x(\text{VO}_4)_6\text{O}_{x/2}$  ( $0 \leq x \leq 0.6$ ) синтезировали методом твердофазного синтеза при температуре  $600^\circ\text{C}$ . Полученные образцы исследовали методами рентгенофазового анализа, рентгеноструктурного анализа порошка, ИК-спектроскопии, сканирующей электронной микроскопии. Методом рентгенофазового анализа установлено, что замещение свинца на неодим происходит в пределах  $0 \leq x \leq 0.25$ , а параметры  $a$  и  $c$  гексагональной элементарной ячейки апатита в однофазной области незначительно уменьшаются с увеличением значения  $x$ . Некоторые особенности кристаллической структуры полученных образцов уточняли с использованием алгоритма Ритвельда. В результате уточнения определены координаты атомов и преимущественная заселенность ионов неодима в позиции Pb(1) структуры, а также были рассчитаны межатомные расстояния. Электрофизические свойства образцов исследовали на таблетках диаметром 0.8 см, спрессованных при давлении 120 МПа. Спекание таблеток проводили при температуре  $600^\circ\text{C}$  на протяжении 70 часов, серебро использовали в качестве электродов. Измерения проводили на измерителе параметров LCR DE-5000 при переменном токе на частотах от 100 Гц до 100 кГц. Определено изменение удельной проводимости твердых растворов при различных температурах от состава и рассчитана энергия активации проводимости для каждого состава.

## СВИНЕЦ В ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЕ

*Сибилева С.Ю., Григорьева А.А.*

Восточноукраинский Национальный Университет имени Владимира Даля

[lanochka\\_\\_@mail.ru](mailto:lanochka__@mail.ru), [graa07@mail.ru](mailto:graa07@mail.ru)

Свинец (Pb) является одним из весьма распространенных в окружающей среде токсичных элементов. Из всех тяжелых металлов он наиболее изученный, поскольку довольно широко используется, и содержание его в окружающей среде постоянно возрастает. Он включен в списки приоритетных загрязнителей международными организациями, в том числе ВОЗ, ЮНЕП, Американским агентством контроля токсичных веществ и заболеваний и др.

По степени воздействия на живые организмы свинец отнесен к классу высокоопасных веществ наряду с мышьяком, кадмием, ртутью, селеном, цинком, фтором. Опасность свинца для человека и животных определяется его способностью к накоплению. В организме человека содержится около 120 мг свинца. Он поступает с продуктами питания (от 40 до 70%), остальное с питьевой водой и атмосферным воздухом. Безопасный суточный уровень поступления свинца для человека 0,2-2 мг.

Свинец влияет на нервную систему человека, что приводит к снижению интеллектуального развития, вызывает изменение физической активности, координации слуха, воздействует на сердечно-сосудистую систему, приводя к заболеванию сердца. Он оказывает негативное влияние на здоровье детей, которые более восприимчивы к свинцовым отравлениям. Наиболее частыми формами отравления свинцом являются свинцовая анемия, свинцовые колики, плеврит, гепатит, свинцовый псевдопаралич.

Содержание свинца в земной коре  $1,6 \cdot 10^{-3}\%$  по массе. В земной коре  $\frac{2}{3}$  свинца образовалось в результате выплавки из вещества мантии и  $\frac{1}{3}$  в результате распада изотопов урана и тория ( $^{238}\text{U}$ ,  $^{235}\text{U}$ ,  $^{232}\text{Th}$ ).

В биологический круговорот на суше вовлекается 210 тысяч т/год свинца. Около 110 тыс. т/год мигрирует в океане через фотосинтезирующие организмы.

Содержание свинца в атмосфере -  $1,8 \cdot 10^4$  т. Средние значения его концентрации в атмосфере 0,01-0,5 мкг/м<sup>3</sup>. ПДК - 0,3 мкг/м<sup>3</sup> (I класс опасности). Отметим высокое техногенное рассеивание свинца в атмосфере.

Почвы содержат  $4,8 \cdot 10^9$  т свинца. Увеличение его в почве, ведет к его накоплению растениями. Исследование почв Украины показало, что содержание свинца в некоторых населенных пунктах, превышает ПДК почти в два раза. (ПДК<sub>п</sub> = 20мг/кг).

В природных водах свинец находится в растворенном и взвешенном состоянии. Содержание его в морской воде -  $10^{-8}\%$ , в пресной -  $2 \cdot 10^{-6}\%$ . Для большинства водных объектов его концентрация - 1,5-6,5 мкг/л, что не превышает ПДК<sub>в</sub> = 0,1мг/л.

Загрязнение окружающей среды свинцом происходит только в результате деятельности человека. Основная доля выбросов свинца приходится на цветную металлургию (98%). Большое воздействие оказало использование автотранспортом этилированного бензина, при сжигании которого в атмосферу поступало ежегодно до 260 тыс. тонн свинца. Кроме того, значительные его количества попадают в окружающую среду благодаря использованию свинцовых оболочек кабелей, свинцовых кислотных аккумуляторов и свинцовых красок и глазурей.

Предотвращение и снижение уровня свинцового загрязнения рассматривается во всех развитых странах на правительственном и общенародном уровне, в качестве важнейших задач экологической политики. Опыт многих стран свидетельствует, что снижение свинцового загрязнения окружающей среды позволяет улучшить экологическую обстановку и сохранить здоровье будущим поколениям.

## СЕЗОННА ДИНАМІКА КОНЦЕНТРАЦІЇ АЗОТОВМІСНИХ СПОЛУКУ СТІЧНИХ ВОДАХ

Дорошенко Т.Ф., *Сокурєнко К.А.*

Донбаська національна академія будівництва і архітектури  
[tatyana-f@ukr.net](mailto:tatyana-f@ukr.net)

Під час оцінки стічних вод, що скидаються у водойми, велика увага приділяється концентрації забруднюючих речовин, зокрема, азотовмісних сполук.

У господарсько-побутових стічних водах до їх очищення азот в окислених формах - нітрити та нітрати - як правило, відсутній. Денітрифікація домішок стічної води пояснюється процесами анаеробіоза при транспортуванні стічних вод по системі водовідведення, дією бактерій, які денітрифікують окислені форми азоту до молекулярної форми. Вони з'являються після біологічного очищення стічних вод, засвідчуючи про повну завершеність процесу.

Азот служить живильним середовищем для багатьох мікроорганізмів, які застосовуються при біологічному очищенні в аеротенках і є необхідним для нормальної роботи біологічної плівки очисних каналізаційних споруд. У разі його надмірної концентрації в стічних водах, а також після біологічної очистки та розведення у водоймі його вміст збільшується, посилюється розростання синьо-зелених водоростей ("цвітіння води"), що часто спостерігається в літній період.

Амонійний азот у великій кількості утворюється при гідролізі сечовини - продукту життєдіяльності людини. Процес амоніфікації білкових сполук призводить до утворення амонію. Отже, в теплу пору року в стічні води надходить більша кількість фекалій, в тому числі, з вигрібних ям.

У досліджуваних зразках стічних вод азот представлений, в основному, у вигляді мінеральної ( $\text{NH}_4^+$ ,  $\text{NO}_2^-$ ,  $\text{NO}_3^-$ ) та органічної (амінокислоти та інші органічні сполуки) складових (табл.1.).

Таблиця 1 – Вміст азоту в стічних водах, мг/дм<sup>3</sup>

Показник	Пори року				ГДК
	Зима	Весна	Літо	Осінь	
Азот амонійний	0,51±0,03	0,80±0,01	0,88±0,05	0,56±0,02	0,40
Нітрити	0,18±0,02	0,27±0,01	0,41±0,03	0,28±0,02	0,08
Нітрати	12,96±0,92	20,64±0,85	21,27±0,79	11,04±0,67	40,00

Згідно даних таблиці 1, найбільше надходження азоту амонійного спостерігалось влітку ( $0,88 \pm 0,13$  мг/дм<sup>3</sup>), в інші періоди року воно знижувалося: восени - в 1,57 разів, навесні - на 10 %, взимку - в 1,57 разів. У першому кварталі року значення цього показника було найменшим і перевищувало ГДК на 7,5 %, тоді як восени воно перевищувало ГДК на 27,5 %; навесні - в 2 рази; влітку - в 2,2 рази.

Вміст нітратів у стічних водах у всі досліджувані періоди знаходився в межах нормативних значень (тах значення влітку, а min - взимку).

Концентрація нітритів протягом усього року перевищувала ГДК: взимку - в 1,8; навесні - в 2,9; влітку - в 4; восени - в 2,8 рази, що є ознакою промислових забруднень стоків каналізації.

Отже при аналізі сезонної динаміки вмісту різних форм азотовмісних сполук у стічних водах системи каналізації встановлено, що найбільший рівень їх зареєстрований влітку.

## **ДИСПЕРСНО-АРМИРОВАННЫЕ БЕТОНЫ НИЗКИХ КЛАССОВ**

*Гимченко Я.О., Мартыненко Т.В., Саламаха Л.В., Деревянко В.Н.*

ГВУЗ «Приднепровская государственная академия строительства и архитектуры»

В общем случае фибробетоном называют композиционный материал, состоящий из цементной (плотной или поризованной, с заполнителем или без него) матрицы с равномерным или заданным распределением по ее объему ориентированных или хаотично расположенных дискретных волокон (фибр) различного происхождения. Волокна обеспечивают трехмерное укрепление бетона в сравнении с традиционной арматурой, которая обеспечивает двухмерное укрепление.

При производстве таких конструкций, как например трехслойные стеновые панели трудоемкость изготовления очень велика из-за большого количества работ связанных с укладкой, сборкой арматурных каркасов каждого из бетонных слоев изделия (при формировании одной стеновой панели 2/3 затрачиваемого времени приходится на сборку арматурных каркасов). В этом случае фиброармирование было бы актуально с целью уменьшения расхода распределительной арматуры и бетона в тонкослойных элементах, в которых большая часть армирования назначается из конструктивных соображений, а защитный слой бетона составляет значительную часть толщины элемента.

По данным многолетних исследований НДБК, долговечность грубого базальтового волокна в среде цементного камня составляет не менее ста лет. Поэтому предлагается выполнить частичную или полную замену арматурных элементов трехслойных стеновых панелей дисперсно-армированным бетоном. Для чего в лаборатории строительных материалов ПГАСА проводились исследования по изучению влияния базальтовых волокон на свойства бетонов и бетонных смесей. Испытания проводились для бетона класса В20. При проведении исследований применялся песок с  $M_k=2,1$ , соответствующий ДСТУ Б.В.2.7-32-95; портландцемент ПЦ П/Б-Ш-400 производства ПАТ «Хайдельберг Цемент Украина»; щебень, соответствующий ДСТУ Б.В.2.7-75-98; базальтовое волокно (ВМБ) без замасливателя ТУ УВ.2.7.-26.8-32673353-001:2007, производства ЗАТ «Минерал 7» Украина. Содержание волокна варьировалось от 0,1-3% от массы цемента. Длина волокна составляла 5-10 мм, а диаметр 20-40 мкм. Испытания проводились на образцах кубах (10x10x10 мм) в возрасте 7 и 28 суток, твердеющих в нормальных условиях. Исследования проводились с применением полнофакторного эксперимента  $2^3$ .

Проведенные исследования по определению влияния базальтового волокна на свойства бетона класса В20 показали, что прирост прочностных показателей составил 30-40% по отношению к контрольному составу. Максимальные прочностные показатели имеют составы содержащие волокно диаметром 40 мкм. При диаметре волокна более 30 мкм, увеличение длины волокна приводит к увеличению прочности при сжатии бетона. У составов содержащих волокно диаметром менее 30 мкм, увеличение длины волокна приводит к снижению прочностных показателей бетонов. При этом введение базальтовых волокон увеличивает водоцементное отношение. В случае применения пластифицирующих добавок снижение водоцементного отношения составит дополнительный резерв для дальнейшего повышения прочностных показателей.

**СОСТОЯНИЕ ИЗОПОЛИВОЛЬФРАМАТ-АНИОНОВ  
В ВОДНО-ДИМЕТИЛФОРМАМИДНОЙ СРЕДЕ**Пойманова О.Ю., Розанцев Г.М., *Хаустов Д.В.*

Донецкий национальный университет

[helen.zagalskaya@rambler.ru](mailto:helen.zagalskaya@rambler.ru)

Изополивольфрамат-анионы используются в качестве селективных катализаторов окисления в реакциях органического синтеза, что связано с легкостью обратимого перехода между окисленными и восстановленными формами под действием электромагнитного излучения.

Различные по составу и свойствам изополианионы образуются при подкислении растворов вольфрамата натрия. Известно, что некоторые из изополианионов значительно более устойчивы в водно-органических растворах. К ним относятся декавольфрамат-, гепта- и гексавольфрамат-анион. Поэтому изучение состояния полиоксвольфрамат-анионов в смешанных растворителях интересно с точки зрения определения областей существования и устойчивости анионов в зависимости присутствия растворителя.

Для изучения образования и взаимодействий ионов в системах использовано рН-потенциометрическое титрование. Полученные данные обработаны с помощью программы CLINP 2.1 с целью определения моделей, включающих образующиеся частицы. На основе информации об анионах в растворах проведен синтез солей для установления соответствия между жидкой и твердой фазой. Для определения формул полученных солей проведены ИК-спектроскопический, химический и дифференциально-термический анализы.

Объектами исследования выступают системы  $\text{Na}_2\text{WO}_4\text{-HCl-NaCl-DMFA-H}_2\text{O}$ . Исходная концентрация натрия вольфрамата составляла  $10^{-2}$  моль/л, соляной кислоты  $5 \cdot 10^{-2}$  М. Титрования проведены в интервале ионных сил от 0,1 до 0,5 М, для поддержания постоянной ионной силы использован хлорид натрия. Содержание органического растворителя в системе обусловлено максимально возможной концентрацией ортовольфрамат-аниона в водно-органических растворах.

В результате моделирования предложены модели, включающие в себя частицы, образующиеся при подкислении водно-DMFA растворов с различным содержанием органического растворителя. Отмечено, что увеличение доли органического растворителя оказывает стабилизирующее действие на декавольфрамат-анион, выделение которого из водных растворов вызывает трудности.

Синтез солей с катионами тетрабутиламмония и тетраметиламмония проводился из растворов с 40%-ным содержанием DMFA. ИК-спектры полученных соединений подобны спектрам известных декавольфрамат-анионов, что позволяет считать полосы в области вольфрам-кислородных колебаний характеристическими и использовать их для идентификации декавольфрамат-аниона. На основании химического анализа дифференциально-термического анализа солей предложены брутто-формулы веществ.

При различных рН исходных растворов с объемным содержанием DMFA 40% были синтезированы соли обнаружено, что декавольфраматы образуются при рН от 2,1 до 5,9, а при рН больше 7,4 паравольфраматы. Отнесения по типам анионов сделаны на основе ИК-спектров солей.

Дальнейшие исследования необходимо проводить с целью уточнения границ образования изополианионов с подтверждением на примере получения твердой фазы.

## ИССЛЕДОВАНИЕ САМОРАСПРОСТРАНЯЮЩЕГОСЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СИСТЕМЕ $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3\text{--CoSO}_4\text{--NaO}_2$

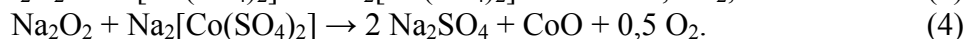
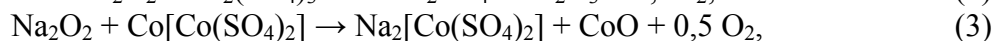
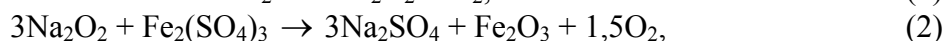
*Цанко А.А.*

Донецкий национальный технический университет

[alina865@yandex.ru](mailto:alina865@yandex.ru)



Ранее было обнаружено, что в результате самораспространяющегося взаимодействия (СРВ) в системах  $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3\text{--MeSO}_4\text{--NaO}_2$  (где  $\text{Me} - \text{Zn}^{2+}, \text{Ni}^{2+}$ ) получают оксиды железа и цинка (никеля) повышенной активности, способные реагировать с образованием  $\text{MeFe}_2\text{O}_4$ . Достаточно высокая температура, которая образуется во фронте СРВ, достигающая несколько сот градусов, перестройка кристаллических решеток реагирующих веществ, образование новых кристаллических структур, а также выделение кислорода способствуют образованию этих оксидов в весьма реакционном состоянии с малыми размерами частиц. Исходя из этого, была предложена схема протекания реакций, с учетом изученного взаимодействия  $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3 - \text{NaO}_2$  и  $\text{CoSO}_4 - \text{NaO}_2$ :



Согласно результатам термических исследований, взаимодействие в смеси  $\text{CoSO}_4 - \text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3 - \text{NaO}_2$  протекает в две основные стадии. Первая стадия объясняется эндотермическим разложением  $\text{NaO}_2$  до  $\text{Na}_2\text{O}_2$ . В процессе этой стадии образец постепенно теряет массу. Выше температуры эндотермического эффекта ( $250 - 260 \text{ }^\circ\text{C}$ ) наступает полное разложение  $\text{NaO}_2$ .

Вторая стадия при  $260 \text{ }^\circ\text{C}$  фиксируется на кривой ДТА в виде сильного экзотермического эффекта, поскольку взаимодействие между компонентами начинается после начала термического распада  $\text{NaO}_2$ .

Последующее нагревание со скоростью  $15 \text{ град/мин}$  вплоть до  $400 \text{ }^\circ\text{C}$ , судя по кривым ДТА, не вызывает какие либо превращения в смесях.

В условиях эксперимента скорость распространения фронта СРВ в системе  $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3 - \text{NaO}_2$  составляет  $127 \text{ мм/мин}$ . При добавлении в систему  $\text{CoSO}_4$  скорость уменьшается. Как было установлено ранее реакции  $\text{MeO} + \text{Fe}_2\text{O}_3$  не оказывают влияния на скорость процесса. Для подтверждения этого был выполнен расчет скорости распространения фронта СРВ при разных соотношениях исходных веществ в предположении, что реакция (5) не оказывает влияния на скорость процесса.

С помощью ИК-спектроскопии было определено, что в продуктах взаимодействия системы присутствует сульфат натрия.

Для более полного установления состава продуктов взаимодействия в данной системе был использован рентгенофазовый анализ. Данные РФА продуктов СРВ, отмытых от сульфата натрия водой, показывают, что наиболее интенсивные рефлексы соответствуют  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$ . В продуктах присутствует  $\alpha$ - и  $\gamma$ - $\text{Fe}_2\text{O}_3$  и оксид кобальта, а также некоторые не идентифицированные нами фазы.

## ВИВЧЕННЯ СТАНУ АНІОНІВ В ВАНАДОМОЛІБДАТНІЙ СИСТЕМІ



Сазонова О.І., Чернишова В.В., Соловійова Н.В.

Донецький національний університет

[o.sazonova@donnu.edu.ua](mailto:o.sazonova@donnu.edu.ua)

В наш час властивості та стан іонів в розчинах ванадатомолібдатних комплексів недостатньо вивчені. Аналіз літературних даних показав, що про змішані ванадатомолібдати шостого ряду складу  $\text{H}_a\text{V}_x\text{Mo}_{6-x}\text{O}_{19}^{((2+x)-a)-}$  ( $x=3$ ,  $a=1-5$ ) практично нічого невідомо. Відомо лише про синтез гетерополісполук молібдену дванадцятого ряду з такими металами як галій, алюміній, хром тощо [1, 2]. Такі сполуки мають унікальну структуру та фізико-хімічні властивості, знаходять широке застосування в різних областях науки та техніки, наприклад, в якості каталізаторів органічного синтезу. Проводяться розробки нетоксичних препаратів, ефективних при лікуванні СНІДу та раку [3]. Широке застосування аніонів у складі різноманітних нових матеріалів, а особливо медичного призначення, пред'являє до них високі вимоги до стехіометричного складу сполук. Але, до цього часу залишається невирішеним питання щодо зон існування ванадатомолібдатних аніонів при різних концентраціях і співвідношеннях ванадію (V) та молібдену (VI) у розчинах, про ступінь поліконденсації аніонів та їх кількісних характеристиках. Незрозуміло, з яких форм (мономерних чи полімерних) ванадію (V) та молібдену (VI) відбувається утворення змішаних форм, а також чи можливе одночасне існування у розчинах індивідуальних і змішаних форм аніонів.

Вивчення стану індивідуальних і змішаних ванадатомолібдатів у водному розчині проводили методом рН-потенціометричного титрування при температурі  $25 \pm 0,1^\circ\text{C}$  на іономірі рН-150МІ (точність 0,05 одиниць рН) із скляним електродом при загальній концентрації d-елементів  $\text{C}_x^0 = 10^{-2}$  М в індивідуальних розчинах та у змішаному розчині  $\text{C}_x^0 = 2 \cdot 10^{-2}$  М при співвідношенні V:Mo=3:3. У розчинах підтримували постійну іонну силу додаванням розрахованої кількості нітрату натрію, до концентрації 0,1 М. Дані, отримані в результаті досліджень, використовувались для математичного моделювання за допомогою програми CLINP [4]. Запропоновано моделі процесів поліконденсації в підкислених розчинах, які містять іони  $\text{VO}_4^{3-}$  та  $\text{MoO}_4^{2-}$  і адекватно описують результати титрування в індивідуальних розчинах ванадію (V) та молібдену (VI) та в змішаному розчині при співвідношенні V:Mo=3:3. Шляхом математичного моделювання розраховано концентраційні константи утворення іонів, побудовано діаграми розподілу аніонних форм у розчинах. Показано, що в змішаному розчині іде утворення протонованого ізополіванадатомолібдату 6-го ряду з полімерних форм ванадію (V) та молібдену (VI), який зберігає задане вихідне співвідношення V:Mo=3:3. Це дозволило зробити висновки, які дозволяють визначити оптимальні умови синтезу відповідних сполук з таких водних розчинів.

1. Орешкина А.В., Казиев Г.З., Глазунова Т.Ю. // Журн. неорг. химии. – 2008. – Т.53, №10. – С. 1662-1666.

2. Орешкина А.В., Казиев Г.З., S. Holguin Quinones, Глазунова Т.Ю., Трипольская Т.А. // Журн. неорг. химии. – 2007. – Т. 52, №9. – С. 1487-1490.

3. Jeffrey T. Rhule, Craig L. Hill, Deborah A. Judd and Raymond F. Schinazi // Chem. Rev. – 1998. – P. 98 (1). – S. 327-358.

4. Холин Ю.В. Количественный физико-химический анализ комплексобразования в растворах и на поверхности химически модифицированных кремнеземов: содержательные модели, математические методы и их приложения. – Харьков: Фолио, 2000. – 288 с.

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА СПОЛУКИ  $Y_3CuSnSe_7$ 

*Шемер В.Я.*, Артюхова Т.Ф., Вербицька Н.О.  
 Луцький національний технічний університет  
[shemet5@i.ua](mailto:shemet5@i.ua)

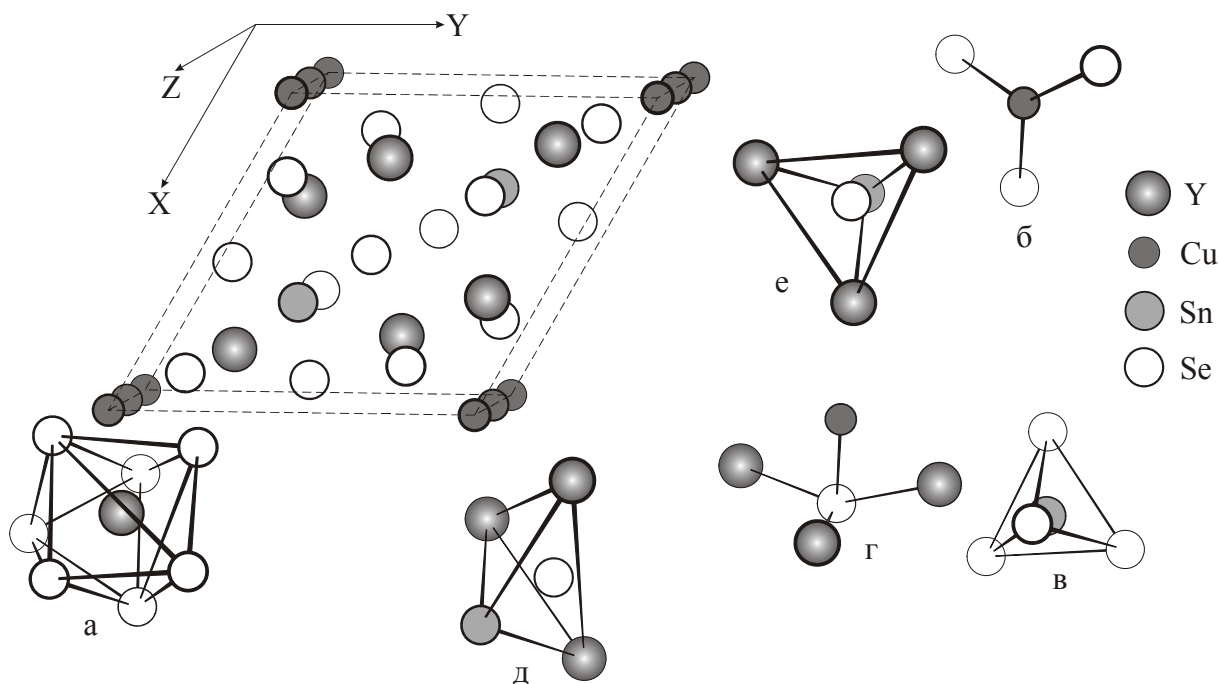
При аналізі фазових рівноваг у системі  $Y_2Se_3-Cu_2Se-SnSe_2$  виявлено існування сполуки  $Y_3CuSnSe_7$ . Синтез зразка проводився з використанням високо чистих вихідних компонентів. Розраховані кількості компонентів запаювались у вакуумовані кварцеві ампули. Синтез проводився в печі шахтного типу при швидкості нагріву 20 К/год. Максимальна температура синтезу становила 1420 К. При цій температурі зразок витримували 4 години. Після чого охолоджували до 870 К із швидкістю 10 К/год. Гомогенізаційний відпал проводився при температурі 870 К протягом 240 годин. Після відпалу ампулу зі зразком загартовували в холодній воді.

Дифрактограма зразка  $Y_3CuSnSe_7$  для обрахунку кристалічної структури отримувалась з допомогою дифрактометра ДРОН-4-13 ( $CuK_\alpha$  випромінювання,  $10^\circ \leq 2\theta \leq 100^\circ$ , крок зйомки  $0.05^\circ$ , час відліку в точці – 20 с.).

Визначення кристалічної структури сполуки  $Y_3CuSnSe_7$  проводили з використанням програми DBWS-9411.

Сполука  $Y_3CuSnSe_7$  кристалізується у структурному типі  $La_3CuSi_7$ , (просторова група  $P6_3$ ):  $a=1,01270(4)$  нм,  $c=0,63951(1)$  нм). Усі кристалографічні положення в структурі сполуки зайняті повністю.

Елементарна комірка і координаційні числа атомів Y (а), Cu (б), Sn (в), Se1 (г), Se2 (д) і Se3 (е) в структурі сполуки  $Y_3CuSnSe_7$  наведені на рисунку. Атоми Y є оточені 7 атомами Se. Для атомів Sn, Se2 і Se3 існує тетраедричне оточення. Три атоми Se оточують атом Cu. Чотири катіони оточують атоми Se1.



## DETERMINATION OF NITROGEN-CONTAINING COMPOUNDS IN THE WATER

*Dyuzheva A.I., Zhuk L.P., Chmilenko F.A.*Dnipropetrovsk National University named by Oles Honchar  
a\_dzh@i.ua

The main problem is water pollution by nitrogen-containing compounds. Considerable part of nitrogen-containing organic compounds flows into the natural water during the extinction of organisms, mostly phytoplankton, and the destruction of their cells to hexamethyltetraamine (HM) (urotropin). The sources of nitrogen compounds are precipitation. The concentration of nitrogen-containing organic compounds remains the same in surface waters.

In acidic medium Puro Flock 920 (PF) forms the ionic associate (IA) with Magneson IREA. Comparing the range of the azo dye MG to the PF-MG, the maximum of the absorption band of the last one is bathochromic shifted ( $\Delta\lambda = 35$  nm). This interaction is stable and inhibits the dissociation of the dye  $\Delta\text{pH } \frac{1}{2} = 2,37$ . In the range of pH 3-5  $\text{H}_2\text{R}^{2-}$  form of the dye forms IA with the maximum of the absorption band at 520 nm. With increasing of pH the interaction becomes more distinct ( $\Delta\lambda = 76$  nm) and pH  $\frac{1}{2} = 6,18$  and 7.52. This fact proves the influence of PF on the tautomeric equilibrium of dye ( $\text{pK} = 8,62$ ).

The interaction of nitrogen-containing compound hexamethyltetraamine (urotropin) with the azo dye in the presence of PF was studied. According to hygiene and sanitary standards content of hexamethyltetraamine (urotropin) (MPC) amounts 0.5 mg / L in the water.

In the system PF-MG-UR forms adduct at pH 3 (Fig.), the absorption spectrum is shifted hypsochromic ( $\Delta\lambda = 100$  nm), relative to the spectrum of the dye and its IA MG-PF. Visually the color changes from orange to red. Stable polyelectrolyte complex, in which the ratio of MG:HM is 100:1, is formed. This effect of the concentration is stipulated by immobilization of interacting particles on the polymer chain.

The reaction of cationic flocculant Puro Flock 920 with azo dye Magneson IPEA and hexamethyltetraamine can be used for the determination of nitrogen-containing HM in the water at pH 3. The optical density was measured by spectrophotometer Specord M-40 (Germany).

The concentration range of hexamethyltetraamine is 0,014 to 0,112 mg/L, where Beer law is observed and is considerably lower than the MPC. Pyridine and its derivatives do not prevent the analysis in these conditions.

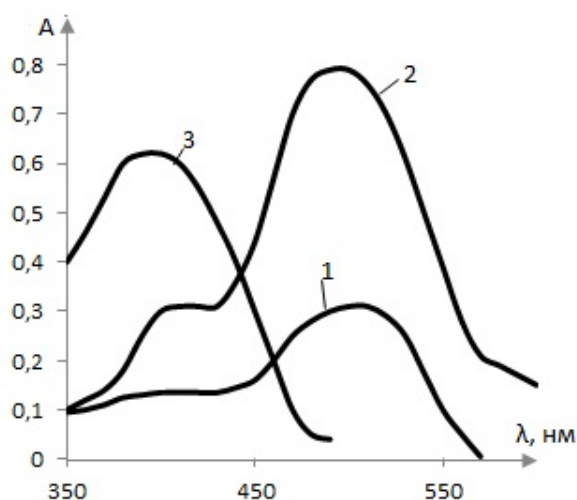


Fig. Absorption Spectrum of MG (1), MG-PF (2), MG-PF-HM (3) at pH 3;  $C_{\text{MG}}=2,6 \cdot 10^{-5}$  mol/L,  $C_{\text{PF}}=1,6 \cdot 10^{-6}$  mol/L,  $C_{\text{HM}}=0,8 \cdot 10^{-6}$  mol/L,  $l=1,0$  cm, Specord M-40

**ELECTRODE-ACTIVE PROPERTIES OF TRIPLE METAL-POLYMERIC  
COMPLEX WITH MOLYBDENUM (VI)**

*Vatichuk O.V., Chmilenko T.S., Matorina K.V., Chmilenko F.A.*

Dnepropetrovsk National University named by Oles Honchar

analyticdnu@mail.ru

Molybdenum is an essential trace mineral that the body gets from food, water, molybdenum drugs and biologically active additives to food. Intoxication by molybdenum available in a production environment. Its excess leads to: increased levels of uric acid, gout, irritation of mucous membranes, anemia and weight loss. The toxic dose for humans is 5 mg. One day the human body gets 75-250 mg, 50% of which is absorbed into the bloodstream and then transported throughout the body. Soluble molybdenum compounds are excreted in the urine. Molybdenum content should be monitored.

The series of PVC-membranes synthesized with the following EAS: polyvinylpyrrolidone (PVP,  $M_r = 8 \cdot 10^3$ ), bromopyrogallol red (BPR), associate BPR - PVP, triple metal-polymeric complex BPR-PVP-Mo (VI) to select the membrane with optimal electrode-active characteristics (Table 1).

Table 1 – The properties of molybdate-selective electrode

EAS	Conditions of EAS formation (m; pH; ratio of components)	Range of linearity, mol·L <sup>-1</sup>	S, mV/pC	C <sub>min</sub> , mol·L <sup>-1</sup>	Note
PVP	0,0050 g	10 <sup>-7</sup> - 10 <sup>-9</sup>	20	8·10 <sup>-6</sup>	Not reproducible data, membrane is homogeneous
BPR	0,0050 g	10 <sup>-2</sup> - 10 <sup>-4</sup>	27	5·10 <sup>-5</sup>	Determining is possible at the high concentrations, EAS is soluble in DBF*
BPR-PVP	0,0050 g; pH5,4; 3:2	10 <sup>-2</sup> - 10 <sup>-5</sup>	26	4·10 <sup>-6</sup>	Membrane is heterogeneous
BPR-PVP-Mo(VI)	0,0050 g; pH 6,0 6:3:1	10 <sup>-2</sup> - 10 <sup>-6</sup>	25	2·10 <sup>-7</sup>	Optimal characteristics

Note: internal solution is C(Mo(VI))=10<sup>-4</sup> M, \*DBF – dibutylphthalate.

Response time of membranes is 120 s for the low concentrations (10<sup>-6</sup> - 10<sup>-7</sup> M). Drift of potential is 5 mV/day. Background membrane (without EAP) has some sieve effect, causing ions give feedback on MoO<sub>4</sub><sup>2-</sup> - ions, but electrode function not has interval of linearity. Dependence of EMF of proposed molybdate -selective electrode with EAS: BPR-PVP-Mo(VI) of the MoO<sub>4</sub><sup>2-</sup> - ion concentration logarithm is described by the equation:  $E = 341 - 45 \cdot \lg C$ ,  $R^2 = 0,953$ .

The proposed molybdate-selective electrode based on triple metal – polymeric complex BPR-PVP-Mo(VI) can be used for the determination of molybdenum in aqueous solutions and human urine.

**ПІДВИЩЕННЯ ЕКСПРЕСНОСТІ ТА СЕЛЕКТИВНОСТІ  
ВИЗНАЧЕННЯ РТУТІ В НАФТОПРОДУКТАХ***Андреева А.М., Куражнов Є. С., Рокун А.М.*

Донецький національний університет

[rokun502@donnu.edu.ua](mailto:rokun502@donnu.edu.ua)

Ртуть є високотоксичною речовиною, її вміст суворо лімітується у всіх компонентах доквілля. У нафті міститься значна кількість ртуті. При переробці нафти спостерігається емісія ртуті в повітря. Частина ртуті залишається в нафтопродуктах, в тому числі в бензині, дизельному паливі та інш. При згорянні нафтопродуктів ртуть потрапляє в атмосферне повітря. Після викиду ртуть залишається в навколишньому середовищі, де вона в різних формах циркулює між повітрям, водою, ґрунтом, тваринними та рослинними організмами. Форма існування неорганічної ртуті може змінитися (за допомогою мікробів) на метилртуть, особливо небезпечну форму, яка концентрується в харчових ланцюжках, особливо у водному харчовому ланцюжку.

Організації, що спеціалізуються на захисті навколишнього середовища, закликають до дій, спрямованих на запобігання глобального забруднення ртуттю. Тому необхідно контролювати вміст ртуті в нафті та нафтопродуктах.

На сьогоднішній день немає доступної методики визначення ртуті в нафті та нафтопродуктах.

Складна органічна матриця нафти та широкий діапазон вмісту ртуті роблять нафту одним з найбільш важких об'єктів для кількісного визначення ртуті. Практично всі методи визначення ртуті в нафті включають етап розкладання нафти кислотами, що збільшує час проведення аналізу, збільшує межу визначення і є основним джерелом похибок.

Міжнародні стандарти з визначення ртуті в сирій нафті включають спалювання проб, концентрування на золотому амальгаматорі і подальше визначення ртуті атомно-абсорбційним методом «холодного пару» з зеємановською корекцією фону. Ці стандарти потребують дорогого обладнання, мають обмеження за масою аналітичної проби, а, відповідно, і за межею виявлення, потребують очищення амальгаматора через кожні 10 циклів та інші недоліки.

Тому нами була розроблена нова методика пробопідготовки нафти та нафтопродуктів, яка включає створення мікроемulsії проби з поверхнево-активними речовинами при кімнатній температурі. Для усунення заважаючого впливу ароматичних вуглеводнів, що містяться в нафті та нафтопродуктах нами запропоновано попереднє хемосорбційне виділення ртуті з проби нафтопродукту в поглинальний розчин  $\text{KMnO}_4$ . В якості відновлювача сполук ртуті використовували боргидрид натрію, який переводить ртуть в атомний пар із всіх його сполук, в тому числі з найбільш стійких ртутьорганічних сполук. На основі проведених досліджень розроблено методику визначення ртуті в нафті та нафтопродуктах, яка відрізняється від міжнародних стандартів кращою експресністю, доступністю обладнання та зниженням межі визначення більше ніж в 10 разів. Доведено правильність розробленої методики. Методика впроваджена в лабораторії з аналізу нафтопродуктів.

## РОЗРОБКА ФОТОМЕТРИЧНОЇ МЕТОДИКИ ВИЗНАЧЕННЯ СОРБІТУ (ХАРЧОВА ДОБАВКА Е-420) В ХАРЧОВІЙ ПРОДУКЦІЇ

*Бабалік Ю.В., Пашинова О.В., Ткач В.І.*

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет», м.Дніпропетровськ  
[olga\\_pashinova@mail.ru](mailto:olga_pashinova@mail.ru)

Сорбіт або глюцит (харчова добавка Е-420) – шестиатомний сахароспирт, що використовується в харчовій промисловості як загущувач, комплексоутворювач, добавка для створення структури продукту, агент, що поглинає надлишкову вологу. Але частіш за все він використовується як природний замінник цукру. Сорбіт в два рази менш солодкий, ніж цукор, але це не знижує його калорійності. Крім того, сорбіт, як і цукор можна використовувати при виготовленні випічки та інших гарячих страв за рахунок його термостабільності. Як замінник цукру він може використовуватись при виготовленні продуктів діабетичного харчування, в раціоні людей, що мають надлишкову вагу та страждають на ожиріння. До продуктів, що містять сорбіт належать різноманітне печиво, цукерки, мармелади, джеми, конфітюри та ін.

З літературних джерел відомі наступні методи кількісного визначення сорбіту в субстанції та промисловій продукції: високоефективна рідинна хроматографія, спектрофотометричне визначення, що засноване на окисленні сорбіту йодатом натрію до формальдегіду та подальшою взаємодією останнього з ацетилацетоном з утворенням забарвленого комплексу. Крім того, розроблена методика потенціометричного титрування сорбіту розчином лугу з використанням як індикаторного, скляного електроду. Описані методики мають високу чутливість та селективність (крім потенціометрії), а також дають відтворювані результати.

Метою нашого дослідження є розробка фотометричної методики визначення сорбіту через забарвлені комплекси. Відомо, що сорбіт утворює забарвлений комплекс при взаємодії з сульфатом заліза (II) в лужному середовищі та катехолом в середовищі сірчаної кислоти. Нами було знято УФ-спектри досліджуваних сполук (сорбіт, сульфат заліза (II) та катехол) та їх комплексів в діапазоні довжин хвиль 200 – 320 нм. Отримані дані підтверджують утворення комплексних сполук при взаємодії натурального підсолоджувача сорбіт з вказаними речовинами. Крім того, було вивчено УФ-спектри сорбіту в залежності від рН середовища та встановлено, що при зміщенні рН в лужне середовище спостерігається батохромний зсув максимуму поглинання. Подальшою метою дослідження є встановлення складу отриманих комплексних сполук та розробка методики визначення сорбіту в субстанції та харчовій продукції методом калібрувального графіка.

## ВИЗНАЧЕННЯ КАДМІЮ В ТОНКИХ ПЛІВКАХ CdSe ІНВЕРСІЙНО-ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧНИМ МЕТОДОМ

*Гумінілович Р.Р., Шаповал П.Й., Ятчишин Й.Й.*

Національний університет «Львівська політехніка»,

[guminilovych@gmail.com](mailto:guminilovych@gmail.com)

Тонкі плівки кадмій селеніду (CdSe) відносять до напівпровідників типу A<sup>II</sup>B<sup>VI</sup>. Селенід кадмію має ширину забороненої зони (1,74 – 2,0 eV) з високим коефіцієнтом поглинання поблизу краю зони і володіє унікальними оптико-електронними властивостями у видимому діапазоні, що дозволяє використовувати його у сонячних елементах.

Одержано плівки методом хімічного поверхневого осадження (ХПО), який полягає у використанні різноманітних комбінацій вихідних речовин і дозволяє отримувати суцільні тонкі плівки.

Для одержання тонких плівок кадмій селеніду використовували свіжоприготовлені розчини кадмій сульфату (CdSO<sub>4</sub> • 8/3H<sub>2</sub>O) та натрій селеносульфату (Na<sub>2</sub>SeSO<sub>3</sub>). Молярна концентрація вихідної кадмій-вмісної солі змінювалася в межах від 0,01 М до 0,02 М, натрій селеносульфату становила 0,1 М. Час осадження варіювали від 3 до 12 хв. Температуру процесу підтримували сталою (70 °С).

Хімічне поверхнєве осадження проводили на попередньо підготовлені і термостатовані однорідні скляні пластини площею 3,96 см<sup>2</sup>. Дозоване нанесення робочого розчину забезпечувало рівномірність покриття поверхні пластинки і, відповідно, рівномірне осадження плівок CdSe.

Вміст іонів кадмію визначали методом інверсійної вольтамперометрії за допомогою аналізатора важких металів АКВ-07МК ("НВО Аквілон", Росія). Для проведення вольтамперометричних досліджень плівки CdSe розчиняли в 10,00 см<sup>3</sup> 0,2 М розчину хлоридної кислоти і методом добавок визначали концентрацію іонів Cd<sup>2+</sup> за допомогою прикладної програми Polar 4.1. В таблиці 1 наведені дані по вмісту іонів кадмію в одержаних покриттях, визначені інверсійно-вольтамперометричним методом.

Таблиця 1

Концентрація солі кадмій сульфату, моль/л	Вміст іонів кадмію			
	Час осадження, хв			
	3	6	9	12
	Вміст іонів кадмію Cd <sup>2+</sup> , мг/дм <sup>3</sup>			
0,01	0,7039	2,2360	3,8854	6,6709
0,02	1,3903	2,2090	3,6710	6,8271

З таблиці 1 видно, що збільшення концентрації вихідної солі веде до збільшення вмісту іонів кадмію лише на початкових стадіях. Тому, для подальших досліджень рентабельно використовувати 0,01 М розчини солей, оскільки збільшення концентрації не дає приросту товщини плівок. Проведені дослідження дозволили оптимізувати параметри одержання тонких суцільних плівок CdSe методом ХПО і встановити залежності вмісту іонів кадмію від тривалості осадження та концентрації вихідної кадмій-вмісної солі.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ОКЛЕЙКИ ВИНОГРАДНЫХ ВИН МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ ИМПЕДАНСА

*Дедикова Т.А., Першина Е.Д., Толстенко Д.П.*

Таврический национальный университет имени В.И.Вернадского

[tatyana\\_dedikova@mail.ru](mailto:tatyana_dedikova@mail.ru)

Одним из необходимых показателей качества вина является стойкая прозрачность, не изменяющаяся при выдержке, хранении, розливе и транспортировке. Разработан ряд технологических приемов и способов обработки и осветления виноматериалов с целью стабилизации их против различных видов помутнений. К сожалению, выбор как схемы обработки, так и оклеивающих веществ зачастую носит эмпирический характер, поэтому требуются новые подходы к анализу процессов стабилизации. В последнее время значительно возрос интерес к применению различных электрохимических методов для исследования винодельческой продукции. Это связано с высокой чувствительностью, быстротой анализа данной группы методов и отсутствием влияния окраски образцов на результаты анализа. Одним из таких методов является спектроскопия импеданса, играющая значительную роль в фундаментальных и прикладных аспектах материаловедения. В последние годы значение этого метода в аналитических приложениях усилилось в связи с увеличением доступности коммерческих высококачественных приборов, позволяющих проводить автоматизированные измерения электрохимических параметров в широком диапазоне частот.

Были проведены исследования влияния состава виноматериала и препаратов оклейки на общее сопротивление исследуемых образцов. Спектры импеданса снимали в ячейке с платиновыми электродами площадью по 2 см<sup>2</sup> на расстоянии 1 см на электрохимическом модуле Autolab -30, Ekochemie BV, (Нидерланды), оснащенный модулем FRA (Frequency Response Analyzer) в интервале 10<sup>-3</sup> – 10<sup>6</sup>. Управление модулем осуществляли программой Autolab 4.7 при амплитуде возмущающего сигнала ± 5мВ. Значения сопротивления и частотных характеристик образцов виноматериалов определяли по спектрам импеданса с использованием пакета Zview 2.0

Оклейка и исследования проводились в виноматериалах Пино и Шардоне с использованием препаратов представленных в таблице 1.

Таблица 1.

Образцы и дозы оклеивающих веществ

№	Материал оклейки	Дозы, г/дм <sup>3</sup>
1	Аскангель	1, 2, 5
2	Бентонит	1, 2, 5
3	Модифицированный фосфат-ионами и кальцитом бентонит	1, 2, 5
4	Модифицированный фосфат-ионами бентонит	1, 2, 5

Были установлены области отвечающие за характеристические точки спектров импеданса. Обнаружена зависимость активного и реактивного сопротивления и частотного диапазона от состава виноматериала а также корреляция характеристических значений ( $Z'$ ,  $Z''$ ,  $f$ ) спектров импеданса от концентрации оклеивающего вещества. Выявлено что использование одного оклеивающего вещества в различных дозах приводит к различным формам зависимости активного и реактивного сопротивления от частоты. Аналогично использование различных оклеивающих веществ также приводит к изменению формы зависимости.

**МОДИФІКОВАНІ МЕМБРАНИ З МОЛЕКУЛЯРНО-ІМПРИНТОВАНИМ ПОЛІМЕРОМ ДЛЯ ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНОГО СЕНСОРА**Гуртова О.В., *Жижов В.М.*, Чмиленко Ф.О.

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара

[vitalikchichov123@gmail.com](mailto:vitalikchichov123@gmail.com)

Висока селективність, швидкість визначення дозволяють використовувати потенціометричні сенсори в хімічній промисловості, медицині, біології, при вивченні об'єктів навколишнього середовища та в інших областях. Головною перевагою потенціометричних сенсорів є придатність для безперервного автоматичного контролю.

У представленій роботі для виготовлення потенціометричних сенсорів було використано дві серії модифікованих полівінілхлоридних мембран. Перші чотири мембрани отримували шляхом нанесення дисперсії молекулярно-імпринтованого полімеру (МІП), оберненого до пропранололу, з розміром часток 1,8 мкм на полівінілхлоридну матрицю. Вміст МІП відносно маси полівінілхлориду складає 2, 10, 50 та 100 %. Інші 4 мембрани були виготовлені з введенням тетрафенілборату натрію в полівінілхлоридну матрицю і оброблені дисперсією МІП з однієї сторони у співвідношеннях, аналогічних до перших 4 мембран.

Встановили оптимальні умови функціонування модифікованих мембран потенціометричних сенсорів в стандартних розчинах пропранололу, а саме: термін життя електродів, вплив концентрації внутрішнього розчину, часу кондиціонування, рН та селективність до структурних аналогів пропранололу.

Для визначення терміну життя електродів проводили вимірювання потенціалу сенсорів у серії водних розчинів пропранололу з інтервалом концентрацій  $10^{-1}$ - $10^{-7}$  М. Інтервал лінійності електродної функції сенсорів після зберігання зменшився з  $10^{-1}$ - $10^{-6}$  М до  $10^{-1}$ - $10^{-5}$  М; значення нахилів електродних функцій для перших 4 сенсорів вищі у разі нових мембран, тоді як для 4 останніх вони залишаються стабільними і знаходяться у проміжку  $59,16 \pm 2,00$  мВ.

Вплив концентрації внутрішнього розчину на електродну функцію модифікованих сенсорів визначали з використанням внутрішніх водних розчинів пропранололу з концентраціями  $10^{-2}$  М,  $10^{-3}$  М,  $10^{-4}$  М. Встановили, що концентрація внутрішнього розчину не впливає на інтервал лінійності досліджуваних сенсорів, а нахил електродної функції найбільш близький до теоретичного для концентрації внутрішнього розчину  $10^{-3}$  М.

Дослідили вплив кондиціонування мембран протягом 30 хвилин в  $10^{-3}$  М розчині пропранололу на електродну функцію сенсорів. Значення нахилу електродної функції наблизилось до теоретичного порівняно з результатами без кондиціонування.

Вивчений вплив кислотності стандартних розчинів пропранололу на електродну функцію і встановлене оптимальне значення рН, що дорівнює 6,0. Подальші вимірювання проводили у середовищі цитратного буферного розчину з рН 6,0.

Селективність сенсорів досліджували в розчинах структурних аналогів пропранололу – атенололу та метапрололу тартрату – методом окремих розчинів. Потенціал сенсорів залишався стабільним в розчинах атенололу з концентраціями  $10^{-2}$ - $10^{-6}$  М. Нахил електродної функції сенсорів близький до 29,6 мВ в розчинах метапрололу тартрату в інтервалі концентрацій  $10^{-2}$ - $10^{-6}$  М.

Таким чином, виготовили потенціометричний сенсор на основі молекулярно-імпринтованого полімеру, оберненого до пропранололу, та дослідили умови його функціонування. Сенсори на основі модифікованих полівінілхлоридних мембран з додаванням тетрафенілборату натрію мають кращі електродні характеристики порівняно з іншими сенсорами.

## ПВХ-СЕНСОР ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ 2,4-ДИХЛОРФЕНОКСИОЦТОВОЇ КИСЛОТИ З МЕТИЛОВИМ ФІОЛЕТОВИМ

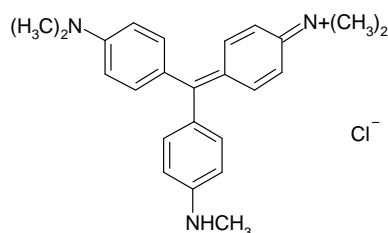
*Журба К.С., Кормош Ж.О.*

Східноєвропейський національний університет ім. Лесі Українки

katya\_babats@mail.ru

В світовій практиці сільськогосподарського виробництва для захисту зернових та інших культур від шкідників широко застосовуються гербіциди на основі 2,4-дихлорфеноксиоцтової кислоти. Прийнято рахувати, що гербіциди групи 2,4-Д відносять до пестицидів, що швидко руйнуються в ґрунті та рослинах під дією різних факторів. Однак актуальною є розробка методики визначення невеликих концентрацій 2,4-Д.

Розроблений ПВХ-сенсор на основі іонного асоціату 2,4-Д з основним барвником метиловим фіолетовим дозволяє визначати гербіцид з концентрацією  $n \cdot 10^{-5}$  моль/л.



**Рис.1.** Структурна формула метилового фіолетового.

Нами було оптимізовано склад мембран на основі ІА. Встановлено, що вміст ІА у мембрані становить 3% від загальної маси. Крутизна електродної функції виконується в межах 20 – 47 мВ/рС, лінійність зберігається в межах  $1 \cdot 10^{-4}$  -  $3 \cdot 10^{-2}$ , нижня межа визначення становить  $n \cdot 10^{-5}$ . При дослідженні впливу природи пластифікатора, було встановлено, що кращі результати показували мембрани, пластифіковані дибутилфталатом (ДБФ) та трикрезилфосфатом (ТКФ), а мембрани, до складу яких входили пластифікатори динонілфталат (ДНФ) та диоктилфталат (ДОФ), не давали відгуків. Вміст пластифікатора становить 65-75% від загальної маси мембрани.

Встановлено, що іоноселективний електроди на основі ІА 2,4-Д з метиловим фіолетовим працює в широких межах кислотності середовища із збереженням величини крутизни нахилу електродної функції, меж лінійності та чутливості визначення, а саме  $pH=6 - 10$ .

Для визначення коефіцієнта селективності дослідження проводили методом змішаних розчинів. Визначенню 2,4-Д не заважають такі іони, як  $I^-$ ,  $F^-$ ,  $VO_4^{2-}$ ,  $Cl^-$ , а також речовини класу пестицидів 4-хлорфеноксиоцтова кислота, індоліоцтова кислота та невеликі кількості 1-нафтілоцтової кислоти.

При визначенні 2,4-Д в препаратах різних виробників були отримані такі результати.

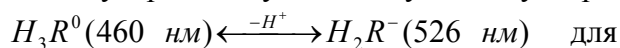
Препарат, г (в перерахунку на 2,4-Д)	Знайдено, мг	Sr	S	RSD (Sr,x %)
„Хлібодар“, 395,5	382,0 ± 2,6	0,005	2,1	0,6
„Пріма“, 199,1	189,2 ± 3,3	0,006	1,14	0,6
„Діален Супер“, 319,4	301,0 ± 1,9	0,005	1,5	0,5

### ХІМІКО-АНАЛІТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ АСОЦІАТИВ ПОЛІГУАНІДИНІВ З ТРИОКСИФЛУОРОНАМИ В ЕТАНОЛЬНИХ РОЗЧИНАХ

Іваниця Л.О., *Заруба С.В.*, Чмиленко Т.С., Чмиленко Ф.О.  
Дніпропетровський національний університет ім. Олеса Гончара  
[zaruba\\_sv@mail.ru](mailto:zaruba_sv@mail.ru)

Значне зростання спектру отруйних речовин, що входять до складу засобів хімічної та фармацевтичної промисловості, поєднується з невстановленим їх впливом на організм людини. Впровадження інноваційної продукції випереджує технічні можливості та створює певні проблеми проведення судово-хімічної експертизи. Встановлені випадки отруєння спиртовмісними сумішами та настоянками на полімерній основі, у склад яких входила добавка полігексаметиленгуанідину (ПГМГ). Водні розчини ПГМГ відносяться до III класу помірно небезпечних речовин при потраплянні у шлунок, у той час як спиртові сурогати полігуанідинів є гепатотоксичними отрутами. Токсичність ПГМГ зростає зі зменшенням довжини полімерного ланцюга. Мета роботи полягала у створенні методики контролю вмісту ПГМГ у алкогольному сурогаті «Екстрасепт-1» (0,14% ПГМГ).

Досліджено вплив ПГМГ різної середньої молекулярної маси ( $M_r \approx 6,4 \times 10^3$ ;  $1 \times 10^4$ ) на спектрофотометричні характеристики етанольних розчинів триоксифлуоронів (ТОФ). Добавка полікатиону супроводжується гіперхромними ефектами та зсуває кислотно-основну рівновагу ТОФ у бік утворення першої аніонної форми барвника:



о-нітрофенілфлуорону. Більш сильний вплив на оптичні характеристики ТОФ у етанолі спричиняє ПГМГ з  $M_r \approx 6,4 \times 10^3$ . Оптична густина спиртових розчинів ТОФ знаходяться в залежності від концентрації ПГМГ у діапазоні 0,05 - 0,50 г/л, що дозволяє спектрофотометрично визначати останній.

Вірогідним поясненням впливу ПГМГ на протолітичні рівноваги ТОФ може бути зміна діелектричної проникності розчину при збільшенні концентрації ПГМГ. Діелектрична проникність  $\epsilon$  етанольних розчинів ПГМГ, виміряна за допомогою контактного первинного перетворювача ємкісного типу, зростає лінійно при збільшенні концентрації ПГМГ (див. рисунок). Це дозволило розробити просту та експресну діелкометричну методику визначення ПГМГ в спиртовому сурогаті «Екстрасепт-1». Лінійність градувального графіку зберігається в межах концентрацій ПГМГ 0,02 — 0,12 г/л.

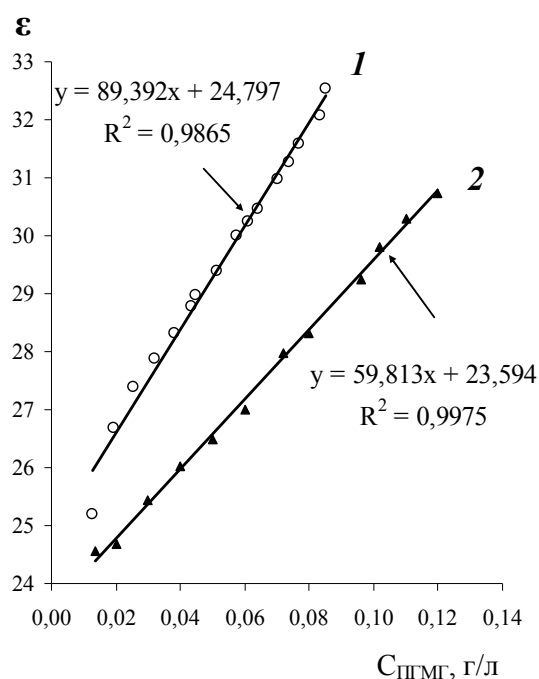


Рисунок. Зміна діелектричної проникності  $\epsilon$  етанолу від концентрації ПГМГ ( $M_r$ ): 1 –  $6,4 \times 10^3$ ; 2 –  $1 \times 10^4$ .  $T = 25^\circ \text{C}$ .

**СЕЛЕКТИВНІСТЬ ДИФЕНІЛ- ТА N,N,N-ТРИФЕНІЛГУАНІДИНІЙ ЧУТЛИВИХ СЕНСОРІВ**

*Зубеня Н.В., Кормош Ж.О.*

Східноєвропейський національний університет імені Лесі Українки

[Nati\\_26@ukr.net](mailto:Nati_26@ukr.net)

Основні успіхи потенціометричного методу аналізу за останні 40 років пов'язані із розробкою і практичним використанням іонселективних електродів із рідкими (перш за все із полімерними пластифікованими) мембранами. Завдяки простоті принципу створення цих електродів і доступності техніки їх виготовлення, реалізація принципово нових ( у порівнянні із скляними та кристалічними мембранами) можливостей керування потенціометричною селективністю, завдяки своїй універсальності, ІСЕ такого типу зайняли передове місце серед електрохімічних сенсорів для аналізу різних об'єктів , та сфера їх використання постійно розширюється.

В даній роботі описані коефіцієнти селективності, які були отриманні методом окремих розчинів (SSM – separate solution method). Цей метод полягає у тому, що вимірюють потенціал електроду, який занурений у розчин, що містить лише головний іон (і),

$$E_i = E^0 + \frac{RT}{z_i F} \lg a_a \quad (1)$$

а потім вимірюється потенціал розчину, який містить лише іони, що заважають:

$$E_j = E^0 + \frac{RT}{z_j F} \lg (K_{ij}^{Pot} \cdot a_B^{z_i/z_j}) \quad (2)$$

Різниця рівнянь (1) та (2) дозволяє обрахувати значення потенціометричного коефіцієнта селективності.

$$\lg K_{ij}^{Pot} = (E_j - E_i) \frac{z_i F}{RT} \ln 10 + (1 - z_i/z_j) \ln a_i \quad (3)$$

$$K_{ij}^{Pot} = a_i^{(1 - z_i/z_j)} e^{(E_j - E_i) z_i F / RT}$$

Досліджували вплив іонів на коефіцієнт селективності електродів на основі іонних асоціатів N,N,N-трифенілгуанідинію із йодоозином та дифенілгуанідинію із йодоозином. Склад мембрани: 3% ЕАР; 61% ТКФ; розчинник полівінілхлориду – тетрагідрофуран; рН = 4,0. Результати подані у таблиці 1.

Таблиця 1.

Іони / ICE	NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	Cu <sup>2+</sup>	K <sup>+</sup>	Na <sup>+</sup>	Co <sup>2+</sup>	Ba <sup>2+</sup>	Ca <sup>2+</sup>	Mg <sup>2+</sup>	2,3,5-трифеніл-тетразолій хлористий	N-цетилпіридиній хлорид	Тетраметиламоній бромід	Цетилтриметиламоній бромід	Тетрабутиламоній йодистий	Бензилтриметиламоній хлорид	Бензалконій хлорид	Дифенілгуанідин/ Трифенілгуанідин
ТФГ	1	0,8	>4	>4	2,3	>4	>4	2,9	2,2	3,1	>4	3,4	>4	>4	2,4	1
ДФГ	1,9	2,5	>4	>4	3,9	>4	>4	3,1	2,8	1,4	>4	3,4	>4	2,7	2,7	1,1

## СОРБЦИЯ ЛАНТАНА (III) НЕКОТОРЫМИ ПОЛИСАХАРИДАМИ

*Кефилева З.Р.*, Кацева Г.Н.Таврический национальный университет имени В.И.Вернадского  
panovda@crimea.edu

В последнее время все большее применение находят такие биополимеры как хитозан, альгинаты и их производные. Особый интерес представляют сорбционные свойства этих полисахаридов, обусловленные наличием различных функциональных групп: гидроксильных и карбоксильных — у альгиновой кислоты; гидроксильных, амидных и аминогрупп — у хитозана. Благодаря наличию данных групп, а также относительно малой токсичности, указанные полисахариды могут применяться в качестве биосорбентов тяжелых металлов. Имея бактерицидные и иммуномодулирующие свойства, они успешно применяются в качестве биологически активных добавок.

В настоящей работе рассмотрены основные количественные характеристики изучаемых полимеров, результаты исследования взаимодействия с нитратом лантана и установление состава образующихся комплексов, а также сравнена металлосвязывающая способность хитозана и альгината в отношении соли лантана.

В работе использован альгинат натрия (Alfa Aesar) и хитозан (Биопрогресс). Для образцов полисахаридов методом потенциометрического титрования было определено массовое содержание свободных карбоксильных групп (для альгината) и аминогрупп (для хитозана), составившее соответственно  $10,93 \pm 0,20$  и  $5,74 \pm 0,15\%$ . Для хитозана определена средневязкостная молекулярная масса, составившая  $3,98 \pm 0,45$  кДа. Определены зависимости относительной вязкости и удельной электропроводности от концентрации для исследуемых образцов. Концентрация соли лантана определялась комплексонометрическим методом с ксиленоловым оранжевым в качестве индикатора при pH 5,2 – 5,4.

Методами кондуктометрического и потенциометрического титрования установлено число элементарных звеньев полисахарида, приходящееся на один ион металла. Для альгината отношение  $-\text{COOH}:\text{La}^{3+}$  составляет  $3,05 \pm 0,03\%$ , для хитозана отношение реагирующих аминогрупп к иону лантана близко к 1,00. Исследования проведены в области концентраций  $1,0 \cdot 10^{-3} - 4,0 \cdot 10^{-3}$  моль/л для реагирующих веществ и pH 4,0 – 6,0. Отсутствие четко выраженного экстремума указывает на недостаточную устойчивость образующегося соединения в случае обоих полисахаридов.

Исследован процесс сорбции для малорастворимых форм биополимеров в зависимости от концентрации, времени и pH. Сорбционное равновесие устанавливается в течение 1-2 часов в обоих случаях. Сорбционные свойства альгината значительно выше хитозана: степень извлечения иона лантана из раствора при использовании в качестве адсорбента альгината кальция составляет 85-90%, в случае хитозана — не превышает 20%. Оптимальная сорбционная емкость достигается при концентрациях соли лантана 3,0 мг/мл в области pH 3,0 – 7,0.

Таким образом, проведенные исследования показывают о возможности использования в качестве сорбентов ионов лантана -полисахаридов, в частности, альгината кальция.

**КИНЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМИЗАЦИИ ИЗ ТВЕРДЫХ ПРОБ В АТОМИЗАТОРЕ «ПЕЧЬ-ПЛАМЯ» С ОДНОВРЕМЕННЫМ РАССМОТРЕНИЕМ ОБРАЗОВАНИЯ СВОБОДНЫХ АТОМОВ И ИХ ДИФФУЗИОННОГО ВЫНОСА**

*Коротина Д.С., Луговой К.С., Алемасова А.С.*

Донецкий национальный университет

korotina-1992@mail.ru

Оценить процессы, приводящие к образованию свободных атомов из твердых проб в атомизаторе «печь-пламя», а также влияние химических модификаторов на эти процессы, позволяют значения кинетических параметров – эффективной энергии активации  $E_a$ , предэкспоненциального множителя  $k_0$ , константы скорости диссипации атомов из аналитической зоны  $k_2$ . Для нахождения значений этих величин необходимо построить адекватную математическую модель, учитывающую температурно-временные параметры в атомизаторе, его геометрию, возможную диффузию атомов определяемого элемента через графит, расход газов пламени и т.д.

Атомно-абсорбционный сигнал определяется в основном динамическим наложением процессов образования свободных атомов и их диффузионного выноса из аналитической зоны. Существует два общепринятых подхода к изучению этих процессов. Первый – разделить их во времени или создать такие условия, при которых форма сигнала определяется только одним из процессов. К сожалению, иногда такие условия создать невозможно, особенно если аналитический сигнал имеет невысокие значения и довольно высокую зашумленность. В таком случае применяют второй подход – рассматривать эти процессы одновременно в динамике, для чего необходимо знать, как они описываются и накладываются друг на друга. При реализации этого подхода необходимо знать температуру графитового стержня в каждый момент времени.

Зависимость температуры графитового стержня от времени определяли следующим образом. Графитовый стержень атомизатора размещали непосредственно на оптическом пути спектрофотометра, включали программу разогрева стержня и регистрировали эмиссионный сигнал. Время от запуска программы до выхода сигнала на постоянное значение является временем разогрева графитового стержня атомизатора «печь-пламя» до заданной в программе температуры.

При определении свинца и кадмия в твердых карбонизатах пищевых продуктов было также обнаружено, что на кинетику образования свободных атомов существенное влияние оказывает диффузия атомов определяемых элементов через твердые частицы карбонизата. Об этом свидетельствовали низкие значения (менее 1) константы скорости диссипации.

При испарении с поверхности графита, согласно макрокинетической теории, могут наблюдаться три различные области. Кинетическая область, в которой скорость испарения определяется только соответствующей константой; диффузионная область, в которой скорость испарения зависит только от величины коэффициента поверхностной диффузии пробы; квазикинетическая область, в которой скорость испарения является функцией константы скорости испарения и размеров испаряющихся микрочастиц.

При комплексной оценке кинетических параметров показано, что скорость образования свободных атомов свинца и кадмия из твердых частиц в присутствии химических модификаторов выше, чем без модификаторов.

Для полузакрытых атомизаторов типа «печь Массмана» второй подход реализован в моделях Кацкова, Ван ден Брока, Стержена и Чакрабартти.

**ВИЗНАЧЕННЯ ГЕКСАКАРБОНІЛУ МОЛІБДЕНУ В БЕНЗИНІ***Коротун М.С., Рокун А.М.*

Донецький національний університет

[rokun502@donnu.edu.ua](mailto:rokun502@donnu.edu.ua)

Для покращення екологічних властивостей і підвищення експлуатаційних характеристик товарних бензинів до їх складу вводять різні антидетонаційні, стабілізуючі, антикорозійні металовмісні присадки, у тому числі і гексакарбоніл молібдену (ГКМ).

Це ефективна присадка, що дозволяє підвищити октанове число рідких палив, збільшити їх стабільність в процесі експлуатації, а також значно підвищити ефективність роботи свічок запалювання.

Вміст ГКМ у бензинах повинен суворо контролюватися, оскільки:

- ✓ надлишок ГКМ призводить до підвищення корозійної активності бензинів і зниження його хімічної стабільності;
- ✓ нестача ГКМ призводить до зниження октанового числа бензинів і працездатності свічок запалювання;
- ✓ контроль бензинів на вміст металів-присадок необхідний з метою виявлення фальсифікованих автомобільних бензинів.

В Україні в аналітичному контролі продуктів нафтопереробки для визначення металів використовують, як правило, вітчизняні ДСТУ, стандарти СРСР і Росії, а також методики, що рекомендовані ISO (Міжнародною організацією по стандартизації), UOP (американською фірмою Universal Oil Products), ASTM (Американським товариством випробування матеріалів), EN (Європейським комітетом із стандартизації).

Американський міжнародний стандарт пропонує атомно-емісійний метод з індуктивно-зв'язаною плазмою для визначення молібдену в бензинах і мастильних оліях. Проте, застосування цього методу стримується економічними чинниками.

У зв'язку з цим для визначення вмісту молібдену в бензині розроблені методики, які дозволяють контролювати якість бензинів, як на автозаправних станціях, так і в стаціонарних лабораторіях.

Розроблений комплекс методик включає: пряме атомно-абсорбційне визначення ГКМ у бензині з використанням емульсії бензин – бутиловий спирт – додецилсульфат натрію – вода; екстракційно-атомно-абсорбційне визначення ГКМ у бензині, яке включає вилучення молібдену розчином гіпохлорита натрію з органічної фази у водну та безпосереднє введення екстракту в полум'я ацетилен-закис азоту; а також екстракційно-фотометричне визначення молібдену з тіоціанат-іонами.

Розроблені методики апробуванні на реальних бензинах, які реалізуються на АЗС м. Донецька. Методики відрізняються високою точністю, експресністю, доброю відтворюваністю, екологічністю, використанням реактивів зі зниженою небезпекою.

Перевірку правильності розроблених методик проводили методом добавок.

Отримано 3 патенти України на розроблені методики.

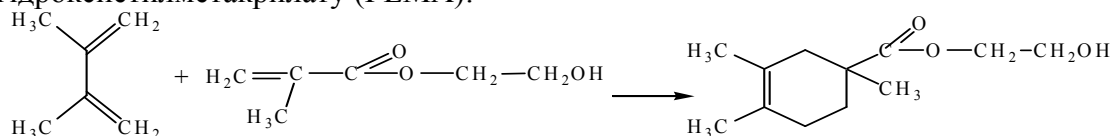
## АНАЛІТИЧНИЙ КОНТРОЛЬ ПРОЦЕСУ ОДЕРЖАННЯ 2-ГІДРОКСИЕТИЛ-1,3,4-ТРИМЕТИЛЦИКЛОГЕКС-3-ЕН-КАРБОКСИЛАТУ

*Костів І.С., Маршалок О.І., Полюжин І.П., Пиріг І.Ю.*

Національний університет «Львівська політехніка»

*kostiv.irina@gmail.com*

Одержання 2-гідроксиетил 1,3,4-триметилциклогекс-3-енкарбоксилату (ГЕТМЦГК) протікає за схемою взаємодії 2,3-диметилбута-1,3-дієну (ДМБ) та 2-гідроксиетилметакрилату (ГЕМА):



З метою аналітичного контролю за процесом одержання ГЕТМЦГК, нами було розроблено методику газо-хроматографічного аналізу реакційної суміші циклізації ДМБ з ГЕМА. Вибрано такі оптимальні умови хроматографування на приладі SHROM-5: детектор за теплопровідністю - ДТП, струм детектора - 37 мА; колонка з нержавіючої сталі довжиною 2,5 м, діаметром - 3 мм, заповнена 5 % ХЕ-60 на Chromaton-N-Super 0,16-0,20 мм; температура колонки 140°C; температура детектора 150°C; температура випарника 150°C; витрата газу-носія (водень) - 22 мл/хв; реєстрацію хроматограм здійснювали за допомогою комп'ютера; масштаб реєстрації: 1:4; об'єм проби, введеної в хроматограф мікрошприцем МШ-10, складав 1 мкл.

Калібрувальні суміші готували на основі ДМБ, ГЕМА та ГЕТМЦГК, зважуючи необхідні кількості компонентів на аналітичних терезах. Концентраційні діапазони компонентів калібрувальних сумішей були узгоджені з концентраціями відповідних речовин в реакційних пробах протягом процесу термічної циклізації ДМБ з ГЕМА.

На хроматограмах реакційних сумішей циклізації ДМБ з ГЕМА (рис.1) виявлено 3 основні піки - ДМБ ( $t_R = 58$  с), ГЕМА ( $t_R = 124$  с), ГЕТМЦГК ( $t_R = 170$  с). За величиною  $R_S(n-m)$  ступінь розділення складає не менше 99%. Ідентифікацію піків проводили за чистими речовинами.

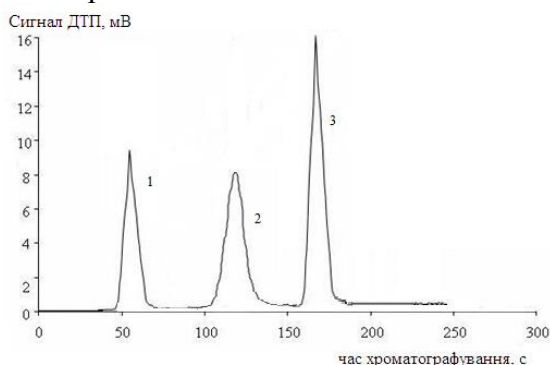


Рис. 1 Хроматограма реакційної суміші циклізації ДМБД з ГЕМА:

1 - ДМБД ( $t_R=58$  с);

2 - ГЕМА ( $t_R=124$ с)

3 - ГЕТМЦГК ( $t_R=170$ с)

Площу піка знаходили за індивідуальною базовою лінією для кожного піку, проводячи її через точки мінімумів між піками. Площу піка, зареєстрованого в числовій формі розраховували методом чисельного інтегрування за сумою трапецій. Кількісний аналіз проводили методом внутрішньої нормалізації, оскільки методом внутрішнього стандарту попередньо було встановлено, що при термічній циклізації ДМБ з ГЕМА в дослідженому інтервалі температур 130 - 160 °C практично не утворюються високомолекулярні продукти, які незворотно затримуються на колонці і тому не реєструються на хроматограмі. Встановлено, що відносна похибка визначення продукту циклізації ГЕТМЦГК методом газо-рідинної хроматографії не перевищує 5 %.

**ОЦЕНКА ВАРИАБЕЛЬНОСТИ ОТНОСИТЕЛЬНЫХ ВРЕМЕН  
УДЕРЖИВАНИЯ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ РАЗЛИЧНЫХ  
ХРОМАТОГРАФИЧЕСКИХ КОЛОНОК C18**

*Кудрис И.В., Куликов А.Ю.*

ГП «Государственный экспертный центр МЗ Украины», г. Киев

ГП «Научно-экспертный фармакопейный центр», г. Харьков

i.kudris@mail.ru

Хроматографические методы анализа являются незаменимыми для качественного и количественного определения веществ в сложных матрицах. Они позволяют провести разделение компонентов смеси с последующей идентификацией и количественным определением интересующих компонентов. В фармацевтическом анализе идентификацию сопутствующих примесей в субстанциях и биологически активных компонентах растительных экстрактов часто проводят используя относительные времена удерживания ( $t_{rel}$ ). Такой подход позволяет провести идентификацию интересующих компонентов по их удерживанию (расположению на хроматограмме) относительно известного компонента разделяемой смеси без использования стандартов определяемых компонентов. В рутинном анализе при использовании хроматографических колонок, заполненных сорбентом одного типа и имеющих близкие физические свойства, или даже колонок разных серий одного и того же производителя часто не удается получить сопоставимые характеристики разделения веществ.

Целью данного исследования было определить вариабельность относительных времен удерживания, полученных для модельных смесей на различных хроматографических колонках, заполненных сорбентом с привитыми октадецилсилильными группами.

Было проведено хроматографическое разделение 4 модельных смесей на 14 различных хроматографических колонках. Модельная смесь (1) - хлорогеновая кислота, катехин, рутин, гиперозид, ликуразид, лютеонин, кверцетин, кемпферол; (2) - диметилфталат, диэтилфталат, бифенил, о-терфенил; (3) - метилпарабен, этилпарабен, пропилпарабен, бутилпарабен; (4) - толуол, этилбензол, изопропилбензол, трет-бутилбензол, антрацен.

Хроматографическое разделение модельных смесей проводили на хроматографе «Agilent 1200» с УФ-детектором. В качестве подвижной фазы (ПФ) использовали ацетонитрил, тетрагидрофуран, уксусную кислоту, воду в соотношении 9:9:1:81 – для разделения (1) и водно-ацетонитрильные подвижные фазы для модельных смесей (2), (3),(4).

Для расчета относительных времен удерживания выбирали в качестве стандарта один из пиков компонентов смеси.

Анализ полученных данных показал высокую вариабельность относительных времен удерживания для всех модельных растворов. Так для модельной смеси (1) значения относительных стандартных отклонений для  $t_{rel}$  компонентов составили от 5,0 % до 24,9 %; для смеси (2) – 7,1 %-25,8 %; для смеси (3) – 6,5 %-12,5 %; смеси (4) – 4,4 %-17,9 %.

Проведенный эксперимент показал, что относительные времена удерживания не могут быть использованы для надежной и однозначной идентификации компонентов, особенно при анализе сложных многокомпонентных матриц.

## ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА ВИНОГРАДНОЙ ВЫЖИМКИ ДЛЯ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В ПИЩЕВОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

*Кудусова С.С., Брановицкая Т.Ю.*

Таврический национальный университет имени В.И.Вернадского

[sevik20@mail.ru](mailto:sevik20@mail.ru)

В рамках современной теории здорового питания актуальна разработка продуктов питания повышенной пищевой ценности. Перспективным и доступным сырьем, богатым биологически значимыми веществами, является виноград и продукты его переработки.

Биологическая ценность винограда обуславливается присутствием в нем минеральных солей, аминокислот, пектинов и других веществ, которые обладают антимикробными и противовоспалительными свойствами, снижающие концентрацию холестерина, сахара и улучшающие функции пищеварения.

При производстве кондитерских изделий интерес представляет использование пюре, подварки из виноградной выжимки. Пюре, подварку с сахаром из виноградных выжимок можно использовать в качестве начинок для карамели и мучных кондитерских изделий, при производстве помадных сортов конфет для улучшения органолептических показателей и продления сроков хранения.

Целью настоящей работы явилось исследование и усовершенствование технологии производства полуфабрикатов из выжимок винограда путем регулирования в них состава компонентов полифенольного комплекса и пектиновых веществ, позволяющих улучшить качество продукции и усилить её питательные свойства.

Мы определяли количественное содержание фенольных, красящих и пектиновых веществ по общепринятым методикам. Для исследования были взяты сорта винограда: Каберне, Мускат Италия, Мерло, Изабелла, Мускат Гамбургский. Для исследования использовалась гидрализованная и негидрализованная мезга винограда.

В результате исследования показано, что виноград является ценным сырьем для получения целого ряда пищевых продуктов, при этом повышается его биологическая ценность. Для кондитерского производства эффективнее использовать негидрализованную мезгу, так как содержание фенольных и красящих веществ больше на 20% для сортов Изабелла, Мускат Гамбургский, Мерло и на 30% для сортов Каберне, Мускат Италия, по сравнению с контролем на всех стадиях производства. При этом также происходит увеличение количества пектиновых веществ во всех образцах, что улучшает желеобразующие свойства получаемого продукта.

Виноград- исключительно полезное и прекрасное растение на земле, его вторичные продукты переработки являются ценным сырьем для получения разнообразных новых продуктов

## ЭКСТРАКЦИЯ РАЗНОЗАРЯДНЫХ ТИОЦИАНАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ ВИСМУТА (III) ВОДОРАСТВОРИМЫМИ И ДРУГИМИ ЭКСТРАГЕНТАМИ И СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОЕ ЕГО ОПРЕДЕЛЕНИЕ В РАСТВОРАХ

Мусаева М.В., *Лобенко С.А.*, Симонова Т.Н

Донецкий национальный университет

simonovatn@yandex.ru

Экстракция тиоцианатных комплексов висмута применяется для отделения его от сопутствующих элементов при анализе различных по составу сплавов, технологических и природных объектов.

В качестве экстрагентов исследуемых комплексов применяют ТБФ, МИБК, спирты, органические основания. Недостатком традиционных экстрагентов является их высокая стоимость, токсичность, в ряде случаев - многостадийность процесса. Этих недостатков лишены водорастворимые экстрагенты, удовлетворяющие требованиям «зеленой экстракции».

В водных растворах висмут (III) образует с тиоцианат-ионами разнозарядные ацидокомплексы:  $\text{Bi}(\text{SCN})_4^-$ ,  $\text{Bi}(\text{SCN})_5^{2-}$  и  $\text{Bi}(\text{SCN})_6^{3-}$ . Для прогнозирования экстракционного поведения исследуемых комплексов нами была использована установленная ранее прямолинейная зависимость коэффициента распределения хлоридных ацидокомплексов драгоценных металлов от величины заряда на центральном атоме:  $\lg D = 3,34 \cdot z - 0,96$  (для ПЭГ),  $\lg D = 8,99 \cdot z - 7,04$  (для изопропанола). Квантовохимические расчеты показали, что величина заряда на центральном атоме для  $\text{Bi}(\text{SCN})_4^-$  составляет 1,47, для  $\text{Bi}(\text{SCN})_6^{3-}$  – 1,62. Экспериментальные исследования подтвердили, что для тиоцианатных комплексов висмута можно применять различные по структуре экстрагенты. Но природа экстрагента влияет на сдвиг равновесия в сторону образования одной из форм тиоцианатных комплексов висмута. Так, введение органических оснований первичных алкиламинов в исследуемую систему приводит к сдвигу равновесия в сторону образования в органической фазе  $\text{Bi}(\text{SCN})_6^{3-}$ , который обладает наиболее интенсивной окраской. Это приводит к увеличению чувствительности фотометрической реакции. Спектр поглощения экстракта  $\text{Bi}(\text{SCN})_6^{3-}$  характеризуется двумя максимумами 335 и 470 нм. Спектры поглощения ассоциата, образованного ТБФ, не имеют максимума при этих длинах волн. Экстракт при этом не окрашен. В органическую фазу переходят комплексы, менее насыщенные тиоцианат-ионами, например  $\text{Bi}(\text{SCN})_4^-$ .

Нами осуществлена экстракция в ДВС тиоцианатных комплексов висмута полиэтиленгликолем (R=98%). Водорастворимые спирты извлекают исследуемый комплекс аналита в меньшей степени. Обсуждены вопросы различного экстракционного поведения разнозарядных ацидокомплексов висмута водорастворимыми спиртами и полимерами в зависимости от концентрации тиоцианат-ионов.

Оптимизированы условия экстракционного извлечения тиоцианатных комплексов висмута (III) при помощи ПЭГ: кислотность среды, концентрация лиганда, соотношение водной и органической фаз, время контакта фаз и др. Состав экстрагируемого соединения определяли методами сдвига равновесий, молекулярной абсорбционной спектрофотометрии, ИК-спектроскопии, химического анализа.

Изучены условия отделения висмута от сопутствующих элементов. Показана возможность экстракционно-фотометрического определения аналита и предложена ускоренная комбинированная методика определения висмута в растворах с применением малоопасных, дешевых экстрагентов.

## ВСТАНОВЛЕННЯ СКЛАДУ ІОННИХ АСОЦІАТІВ МЕЛОКСИКАМУ, ЛОРНОКСИКАМУ ТА МЕФЕНАМІНОВОЇ КИСЛОТИ З АСТРАФЛОКСИНОМ

*Матвійчук О.Ю.*

Східноєвропейський національний університет імені Лесі Українки

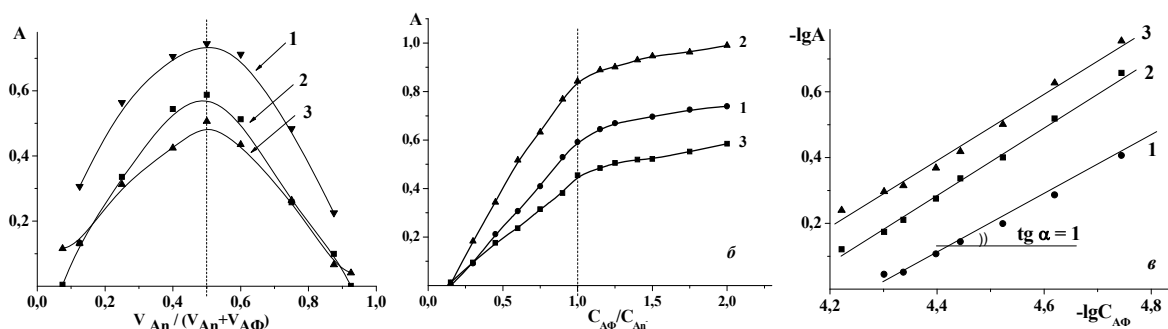
Oksana\_\_M@ukr.net

Сполуки типу іонних асоціатів з основними барвниками набули широкого поширення для розробки нових чутливих спектрофотометричних методик. Це зумовлено високим значенням оптичної густини їх розчинів за низької концентрації, слабкою розчинністю у воді та відсутністю заряду утворених сполук.

Речовини групи нестероїдних протизапальних препаратів, зокрема лорноксикам (Лор), мелоксикам (Мел), мефенамінова кислота (Меф) схильні до утворення сполук типу іонних асоціатів (ІА) з основними барвниками. Протиіоном для отримання таких асоціатів було обрано Астрафлорсин (АФ) - основний барвник поліметинового ряду. Він широко застосовується у спектрофотометричних методах аналізу завдяки високій інтенсивності поглинання розчинів при малих концентраціях ( $10^{-5} - 10^{-6}$  моль/л) у широкому діапазоні кислотності середовища (рН 1 - 12). Встановлено, що іонні асоціати мелоксикаму, лорноксикаму, мефенамінової кислоти кількісно утворюються та екстрагуються лише у лужному середовищі, при рН 8 - 12.

Для попереднього відділення одержаних ІА від вільної солі основного барвника застосовували екстракцію. Екстрагентом слугувала суміш органічних розчинників ізооктан:дихлоретан (1,8:3,2 за об'ємом). Для визначення складу користувалися трьома спектрофотометричними методами: методом ізомолярних серій, методом насичення та обмежено-логіфічним методом.

Для цього досліджували залежність зміни оптичної густини екстрактів утворених іонних асоціатів від концентрації АФ або від різного співвідношення компонентів ІА в ізомолярній серії при незмінних усіх інших параметрах системи. За методом ізомолярних серій максимум поглинання кривої залежності був отриманий за вмісту АФ 50% від складу ІА, тобто 1:1. За такого ж співвідношення спостерігався перегин кривих насичення АФ при утворенні асоціатів з Мел, Лор та Меф. Кути нахилу прямих логарифмічних залежностей світлопоглинання екстрактів від  $\lg C_{\text{АФ}}$  за обмежено-логіфічним методом ( $\nu$ ) близькі до 1,0, тобто склад асоціатів 1:1. Постійний сталий склад ІА дає змогу продовжувати дослідження з метою розробки нових спектрофотометричних методик визначення мелоксикаму, лорноксикаму та мефенамінової кислоти



Графіки визначення складу іонних асоціатів АФ з НПЗП методом: а) ізомолярних серій, б) насичення, в) обмежено-логіфічний метод: рН 9; 1 – Лор, 2 – Мел; 3 – Меф.

## МЕТАЛЛОПОЛИМЕРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ ГЕРМАНИЯ(IV) И МОЛИБДЕНА(VI) С КРАСИТЕЛЯМИ КСАНТЕНОВОГО РЯДА В АНАЛИЗЕ

*Мех Ю.В., Чмиленко Т.С., Иваница Л.А., Чмиленко Ф.А.*

Днепропетровский национальный университет имени Олеся Гончара

[analyticdnu@mail.ru](mailto:analyticdnu@mail.ru)

Германий и молибден принадлежат к числу редких, биологически активных химических элементов, входят в состав легированных сталей и сплавов авиационной и атомной техники. Для увеличения селективности и чувствительности методик определения металлов используются организованные среды, образованные введением поверхностно-активных веществ или полиэлектролитов и их комбинаций с неорганическими электролитами.

Комплексообразование германия (IV) и молибдена (VI) с красителями ксантенового ряда триоксифлуоронами (ТОФ : о-нитрофенилфлуорон (о-НФФ), салицилфлуорон (СФ) и фенилфлуорон (ФФ)) изучено в присутствии катионного полиэлектролита полигексаметиленгуанидиний хлорида (ПГМГ,  $M_r \approx 10^4$ ). В тройных системах ТОФ–ПГМГ–металл происходит образование металлополимерных комплексов. При комплексообразовании германия с ТОФ происходит последовательное присоединение бинарных комплексов на поликатион, соотношение компонентов в системе соответствует ТОФ–ПГМГ–Ge(IV) = 6 : 1 : 3 ( $\lambda = 518$  нм) (рисунок). При введении в раствор полиэлектролита, чувствительность реакции увеличивается в 2,5 раза.

В присутствии фоновых электролитов смещается равновесие комплексообразования в системе о-НФФ–ПГМГ–Mo(VI). Повышение ионной силы раствора до 0,3 моль/л ( $\text{NaNO}_3$ ) приводит к смещению равновесия взаимодействия в сторону длинноволнового комплекса, который в водно-полиэлектролитной среде преобладает при избытке реагента. Методами молярных соотношений и тройной диаграммы Гиббса–Розенбома было установлено соотношение компонентов у системе о-НФФ–ПГМГ–Mo(VI) 3 : 1 : 1 ( $\lambda = 520$  нм) та 6 : 3 : 1 ( $\lambda = 600$  нм). Оптимальная концентрация ПГМГ при образовании тройного комплекса составляет  $5 \times 10^{-7}$  моль/л.

Предложены новые чувствительные методики спектрофотометрического определения германия и молибдена по реакции образования тройных металлополимерных комплексов. Интервал определяемых концентраций для молибдена составил 0,02–0,08 мкг/мл, для германия – 0,7–73,0 нг/мл.

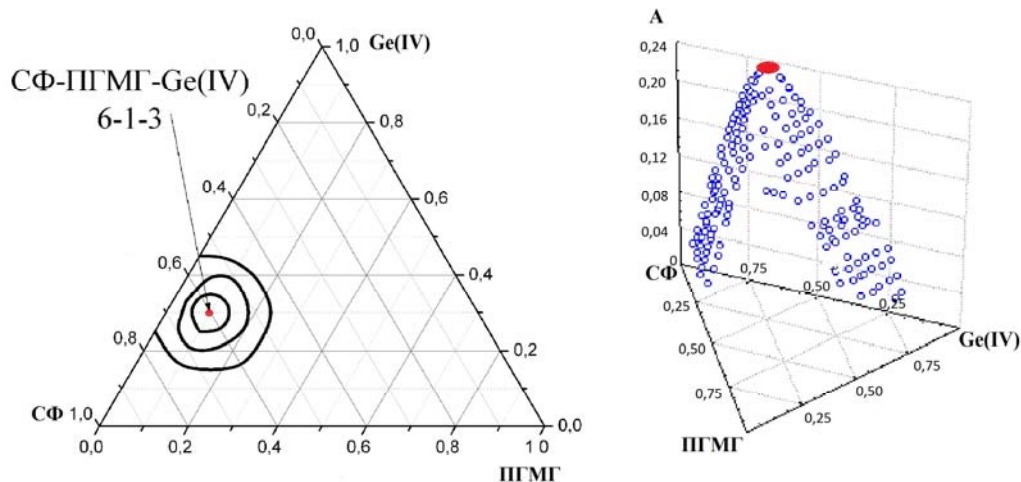


Рисунок. Диаграмма соотношения компонентов СФ–ПГМГ–Ge(IV).  
 $\Sigma C = 1 \times 10^{-5}$  моль/л,  $\Sigma V = 1$  мл,  $l = 1$  см, pH 2,8 (ацетатный буфер),  $\lambda = 518$  нм.

## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СЕЛЕНИТА НАТРИЯ С L-ЦИСТЕИНОМ

*Оманова А.А.*, Панова Э.П.

Таврический национальный университет имени В.И. Вернадского  
panovda@crimea.edu

В настоящее время наиболее распространенным является профилактическое применение антиоксидантов. В связи с этим в последние годы проведено множество исследований эффективности и безопасности применения селена. Он играет решающую роль в физиологических процессах и изменение его уровня оказывает прямое влияние на здоровье человека. Он обладает антиканцерогенным действием, причем не только предотвращает, но и приостанавливает развитие злокачественных опухолей.

Нынешняя фармакология отдает предпочтение препаратам, в которых данный микроэлемент находится в виде соединений с органическими веществами, так как их биологическая роль на порядок выше. Из литературных данных известно, что ферментативное взаимодействие селена(IV) с L-цистеином проводилось в сильноокислотных средах, в результате чего образовывался Se-дисульфид. Однако это не всегда приемлемо.

Целью данной работы явилось изучение взаимодействия селенита натрия с цистеином в нейтральной и слабокислой среде. Для этого был использован селенит натрия (х.ч.) и цистеин (х.ч., пр-ва «Synex Pharma», Китай). Работа проводилась на иономере ЭВ-74. Характерной особенностью потенциометрического метода является возможность проведения титрования в окрашенных, мутных средах, достигая высокой точности и объективности при определении конечной точки титрования. Решающее значение в этом методе имеет индикаторный электрод. Нами для титрования цистеина селенитом натрия были использованы в качестве индикаторных: платиновый, серебряный, молибденовый, вольфрамовый и танталовый электроды. Электродом сравнения служил хлорсеребряный. По результатам титрования строили кривые в координатах потенциал индикаторного электрода – объем титранта и определяли объем селенита натрия в точке эквивалентности. Наиболее четкое изменение потенциала наблюдалось на платиновом и серебряном электродах. В дальнейшей работе использовали серебряный индикаторный электрод. При титровании различных количеств цистеина ( $5 \times 10^{-3}$  –  $1 \times 10^{-1}$  моль/л) на кривой наблюдался один скачок, соответствующий отношению цистеин–селенит равном 4:1. В процессе титрования образуется аморфный осадок элементарного селена красно-оранжевого цвета. Следует отметить, что в процессе титрования наблюдалось изменение рН и в точке эквивалентности оно равно 8,6. Для подтверждения количественного соотношения при взаимодействии цистеина с селенитом натрия был использован метод изомолярных серий. Была приготовлена серия растворов с равной концентрацией цистеина и селенита натрия (0,05M), в которых относительное количество различно, но общее количество одинаково. На иономере измеряли потенциал серебряного электрода соответствующих растворов. По полученным данным был построен график изменения потенциала электрода от объема селенита натрия. На кривой наблюдался один резкий перегиб, который соответствовал ранее указанному соотношению (4:1).

Таким образом, в результате взаимодействия цистеина с селенитом натрия в слабокислых растворах образуется элементарный селен красно-оранжевого цвета.

**ДОСЛІДЖЕННЯ ДИБУТИЛФТАЛАТУ У ВИНАХ І ВИНОМАТЕРІАЛАХ  
МЕТОДОМ ГАЗОВОЇ ХРОМАТОГРАФІЇ**Жилякова Т.П.<sup>1</sup>, Арістова Н.І.<sup>1</sup>, Панов Д.О.<sup>2</sup>, Виноградов Б.О.<sup>1</sup><sup>1</sup>Національний інститут винограду й вина "Магарач" НАН України<sup>2</sup>Таврійський національний університет ім. В.І. Вернадського

mendes@inbox.ru

Дибутілфталат (ДБФ) належить до класу фталатів - широко використовуваних у промисловості речовин, що застосовуються як пластифікатори (пом'якшувачі) полівінілхлоридних смол для додання виробам з вінілу гнучкості. Дибутілфталат - складний ефір фталевої кислоти з молекулярною масою 278,34 – представляє собою безбарвну маслянисту рідину, розчинну в етанолі, хлороформі, ацетоні та інших органічних розчинниках. Світове виробництво фталатів складає приблизно мільярд фунтів на рік. Високі дози фталатів представляють загрозу для здоров'я людини як канцерогени. Низькі дози, особливо ДБФ та діетилгексилфталат, негативно впливають на ембріогенез та сперматогенез, викликаючи пошкодження ДНК сперматозоїдів. У зв'язку з цим актуальна задача моніторингу вмісту цих антиандрогенів у навколишньому середовищі та продуктах харчування.

В Україні вміст фталатів регламентується Сан ПіН 42-123-4240-86 та інструкцією № 880-71. Показник допустимої кількості міграції (ДКМ) дибутілфталату з полімерних матеріалів в модельні середовища встановлено на рівні не більше 0,25 мг/дм<sup>3</sup>.

Для визначення ДБФ у винопродукції було використано метод ГХ-МС, заснований на газохроматографічному розділенні компонентів у досліджуваній пробі та їх детектуванні мас-спектрометричним детектором в режимі SIM (метод селективного іона). Хромато-мас-спектрометричний аналіз проводили на газовому хроматографі з мас-спектрометричним детектором Agilent Technologies 6890/5973. Як робоча була обрана капілярна колонка DB-1MS розміром 30м × 0,20 мм × 0,33 мм з концентрацією фенільних груп метилполісилоксану 1%. Кількісне визначення ДБФ проводили методом абсолютного градування з використанням промислового стандартного розчину фталатів Semivolatle Calib Mix Supelko (кат. № 5-02049) з концентрацією ДБФ 1 мкг/см<sup>3</sup>. Ідентифікацію та кількісне визначення ДБФ в пробі здійснювали в режимі селективного іона з відношенням маси до заряду (m/z) для ДБФ, рівним 149.

Масова концентрація дибутілфталату в 33-х досліджуваних зразках вин і винома матеріалів варіювала в діапазоні від 0,001мг/дм<sup>3</sup> до 0,24 мг/дм<sup>3</sup>. У 52 % досліджуваних зразків масова концентрація ДБФ складала менше 0,011 мг/дм<sup>3</sup>, що більш ніж на порядок менше регламентованих рівнів ДКМ. Таким чином, розроблена хромато-мас-спектрометрична методика визначення масової концентрації ДБФ в винах дозволяють вимірювати вміст ДБФ в діапазоні масових концентрацій від 0,01 мг/дм<sup>3</sup> до 1,00 мг/дм<sup>3</sup>. Відносна похибка визначення вищенаведених компонентів не перевищує 10 % при довірчій ймовірності 0,95, а чутливість методик складає 0,01 мг/дм<sup>3</sup> для альдегідів і 0,001 мг/дм<sup>3</sup> для ДБФ при їх реалізації в даному апаратурному виконанні.

## КОНТРОЛЬ ВМІСТУ ФУРФУРОЛУ ТА ОКСИМЕТИЛФУРФУРОЛУ В МЕДІ

Приходько Я.О., Сидорова Л.П., Чмиленко Ф.О.

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара

[analyticaldnu@mail.ru](mailto:analyticaldnu@mail.ru)

Оксиметилфурфурол та фурфурол відносяться до так званих індикаторів якості і безпеки ведення технологічного процесу, дотримання правил зберігання, і навіть можуть свідчити побічно про фальсифікацію продукції.

Токсична дія оксиметилфурфуролу та фурфуролу обґрунтовує необхідність нормування їх максимальної кількості в продуктах, особливо продуктах дитячого харчування.

Метою роботи була розробка методики визначення оксиметилфурфуролу та фурфуролу у харчових продуктах. Об'єктом дослідження є зразки меду з різним терміном зберігання.

Для розробки методики визначення фурфуролу та окиметилфурфуролу були підібрані оптимальні умови проведення реакції. Встановлювали оптимальний час нагрівання розчину фурфуролу протягом 1 години з шагом 10 хв при температурі 80° С. Показано, що навіть при короткому часу нагрівання (до 10 хв) спостерігається збільшення оптичної густини при цьому максимальне значення оптичної густини досягається при нагріванні протягом 30 хв.

Для визначення оптимального значення рН в пробопідготовці розчину фурфуролу, було знайдено, що стійкість оптичної густини відповідає інтервалу рН (2 – 4).

Запропонована методика визначення оксиметилфурфуролу та фурфуролу з антраніловою кислотою. Метод заснований на вимірюванні інтенсивності забарвлення фурфуролу та його похідного оксиметилфурфуролу з антраніловою кислотою у водній витяжці з проби продукту при довжині хвилі  $\lambda = 530$  нм. Побудовані градувальні графіки залежності оптичної густини від кількості фурфуролу (рівняння градувального графіка  $y = 0,0285x + 0,0040$ , коефіцієнт кореляції  $R^2 = 0,9996$ ). Діапазон лінійності градувальної залежності оптичної густини від вмісту оксиметилфурфуролу становить 1 - 15 мг/кг меду. Проаналізовані зразки меду з різним терміном зберігання, визначено вміст фурфуролу та оксиметилфурфуролу: 24,55мг/кг (мед з тривалістю зберігання менше року ); 31,07 мг/кг (мед, що зберігався більше 3 років). Останній перевищує рівень ГДК. Перевірено правильність отриманих результатів методом добавок.

Отримані результати добре узгоджуються з результатами визначення фурфуролу та окиметилфурфуролу за стандартною спектрофотометричною методикою з п- толуїдином.

Запропонована методика дозволяє в 1,5 рази скоротити час проведення аналізу.

## СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВАНАДИЯ(V) И СЕЛЕНА(VI) В ПИЩЕВЫХ ПРОДУКТАХ И ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТАХ

Чеботарев А.Н., Рабошвиль Е.В., Ефимова И.С.

Одесский национальный университет

[alexch@ukr.net](mailto:alexch@ukr.net)

Перспективным направлением развития спектрофотометрического (СФМ) метода при контроле за содержанием биометаллов (М) в объектах пищевой и фармацевтической промышленности, является разработка простых, экспрессных, селективных и чувствительных методик их определения с использованием органических реагентов (ОР). Заметная специфичность реакций комплексообразования может быть достигнута в случае взаимного окисления-восстановления в системе «М–ОР» с последующим образованием комплексного соединения (КС). К указанному типу реакций относится взаимодействие V(V) и Se(VI) с редокс-реагентом кармоaziном (КАН), для которых установлены оптимальные условия реакции комплексообразования в водно-органических средах, а также рассчитаны основные химико-аналитические характеристики образующихся КС, выступающих в качестве аналитических форм.

Однако, следует отметить, что экспрессность определения ванадия и селена в объектах различной природы лимитируется временем, затрачиваемым на преобразование пробы в аналитический образец. Поэтому нами были дополнены и унифицированы методики и схемы физико-химического превращения исходных проб пищевых продуктов, лекарственных трав и препаратов, содержащих на ряду с макрокомпонентами и сопутствующими ионами, также целевые биометаллы V(V) и Se(VI) в аналитические образцы для их дальнейшего количественного определения.

На основе найденных аналитических форм в редокс-системах «М-КАН» разработаны СФМ методики определения V(V) и Se(VI).

### Химико-аналитические характеристики редокс-систем при определении ионов металлов

Ион	Условия реакции	Концентрационный диапазон, мг/мл	$\epsilon_{\lambda_{\max}} \cdot 10^4$	Объект анализа
V(V)	pH 0 $t \approx 80^\circ\text{C}$ этанол 25 об. % $\lambda_{\max} = 365 \text{ нм}$	0,26÷1,79	1,6	Пищевые продукты (фасоль разных сортов, горох, гречиха, овес, пшеница), поливитаминный комплекс Vitrum Century
Se(VI)	pH -0,5 $t \approx 80^\circ\text{C}$ этанол 25 об. % $\lambda_{\max} = 370 \text{ нм}$	1,58÷12,64	1,0	Пищевые продукты (орех бразильский, гриб белый, мякоть кокоса), пижма цветки, корневищ валерианы, поливитаминный комплекс Perfectil

Разработанные спектрофотометрические методики позволяют проводить определение микроколичеств V(V) и Se(VI) в реальных объектах различного природного происхождения при совместном присутствии с использованием кармоазина без проведения вспомогательных стадий отделения компонентов макроосновы и/или маскирования элементов близких по химико-аналитическим характеристикам в аналитический образец.

## МЕТОД ХІМІЧНОЇ КОЛЬОРОМЕТРІЇ ПРИ ДОСЛІДЖЕННІ КИСЛОТНО-ОСНОВНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПЕЛАРГОНІДИНУ

*Снігур Д.В., Чеботарьов О.М., Єфімова І.С.*

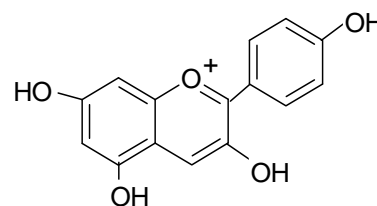
Одеський національний університет імені І.І. Мечникова

[alexch@ukr.net](mailto:alexch@ukr.net)

Одним з найбільш розповсюджених класів барвників рослинного походження є флавоноїди, а саме антоціанідини (АЦН), що обумовлено їх фізико-хімічними характеристиками і особливостями будови. Відомо, що АЦН, в залежності від кислотності середовища можуть знаходитись у декількох кислотно-основних формах, які існують у вузьких інтервалах рН і характеризуються певними значеннями констант іонізації.

Для встановлення величин показників констант іонізації (рК) використовують класичні фізико-хімічні методи, при застосуванні яких, опираючись на закон діючих мас, необхідно оперувати рівноважними концентраціями певної кислотно-основної форми і відповідними екстенсивними характеристиками хімічної системи. Перспективність методу хімічної кольориметрії (МХК) при вивченні кислотно-основних властивостей і встановленні відповідних величин рК барвників полягає у відході від оперування рівноважними концентраціями. Суть МХК - використання координат кольору рівноконтрастної системи CIE Lab, які несуть інформацію про інтегральний розподіл світлопоглинання хімічної системи в широкому діапазоні довжин хвиль при різній кислотності середовища. Врахування різних складових частин кольору дозволяє простежити тонкі відмінності близьких за властивостями атомних угруповань барвників і встановити відповідні величини рК.

В якості об'єкта дослідження нами обрано антоціанідиновий барвник пеларгонідин, який знайшов широкого застосування як компонент харчових добавок – барвник Е 163. У пеларгонідину електрон гетероциклічного атому оксигену приймає участь в утворенні  $\pi$  – зв'язків в гетероароматичному кільці, внаслідок чого молекула стає хромофором.



На основі отриманого нами масиву спектрофотометричних даних розраховані кольориметричні характеристики питомої відмінності кольору (SCD), повного колірної розрізнення ( $\Delta E_{76}$ ) та показника жовтизни ( $Y_1$ ) водних розчинів пеларгонідину у широкому інтервалі кислотності середовища та розраховані відповідні величини рК (таблиця).

Таблиця

Константи іонізації пеларгонідину

№, з/п	Група	рK <sub>SCD</sub>	рK $\Delta E_{76}$	рK $Y_1$
1	-ОН	4,00±0,14	3,85±0,12	3,80±0,13
2	-ОН	6,00±0,13	6,10±0,14	6,15±0,13
3	-ОН	8,00±0,12	7,95±0,15	7,90±0,14
4	-ОН	12,00±0,11	11,90±0,13	11,95±0,13

Як видно з таблиці величини рК пеларгонідину, розраховані з використанням кольориметричних функцій SCD,  $\Delta E_{76}$  і  $Y_1$  корелюють між собою, що вказує на принципову можливість використання даних функцій для дослідження та кількісного описання протолітичних рівноваг в розчинах барвників без залучення даних про рівноважні концентрації відповідних іонно-молекулярних форм.

**ОБРАЗОВАНИЕ СВОБОДНЫХ АТОМОВ АЛЮМИНИЯ В ГРАФИТОВЫХ ПЕЧАХ ПРИ ЭЛЕКТРОТЕРМИЧЕСКОЙ АТОМИЗАЦИИ***Сошникова А.Ю., Алемасова А.С., Понамаренко О.А.*

Донецкий национальный университет

[au\\_soshnicova@mail.ru](mailto:au_soshnicova@mail.ru)

Точное определение следов алюминия необходимо при анализе питьевой воды; в крови больных, проходящих процедуру гемодиализа либо получающих лекарственные препараты, содержащие соединения алюминия и т.д. Электротермическая атомно-абсорбционная спектроскопия (ЭТААС) позволяет проводить анализ с высокой чувствительностью; при этом необходимое количество пробы составляет всего 0,5-1 мл и даже меньше. Актуальной задачей при ЭТААС определении следовых количеств алюминия является правильность результатов, так как сложная матрица оказывает существенное влияние, как на чувствительность, так и на сходимость результатов.

Прогнозировать возможные матричные помехи и выбирать способы их устранения возможно на основании знаний о схеме образования свободных атомов алюминия в графитовой печи. Целью данной работы являлось исследование возможных схем атомизации соединений алюминия, в том числе в присутствии органических полидентатных лигандов. Известен механизм так называемого карботермического восстановления оксидов алюминия в графитовых печах, развитый в работах Львова Б.В. Однако в более поздних работах этот механизм был оценен как не корректный.

Термодинамическое моделирование высокотемпературных процессов испарения и атомизации  $Al(NO_3)_3$  подтверждает более сложную схему атомизации. При моделировании выделяют две зоны: зона сухого остатка после сушки, контактирующая с углеродом атомизатора и зона, контактирующая с аргоном. Для обеих зон в конденсированной фазе преобладают  $AlN$  и  $Al_2O_3$ . Это не противоречит известным литературным данным об образовании  $AlN$  из оксида в присутствии углерода при 1600-1800°C. Образование свободных атомов алюминия начинается при температуре 2000°C, наряду с этим, в газовой фазе атомизатора присутствуют значительные количества  $Al_2O$ . Следует отметить, что максимально допустимые расчетная и экспериментально найденная температуры пиролиза не совпадают для обеих зон.

В присутствии 8-оксихинолина и 8-меркаптохинолина в газовой фазе дополнительно появляются  $AlC$ ,  $AlC_2$ ,  $Al_2C_2$ ,  $AlS$ ,  $AlS_2$ ,  $Al_2S$ ,  $Al_2S_2$ , что обусловлено влиянием химического состава функциональных групп органических лигандов. По данным моделирования в присутствии 8-оксихинолина преобладающим соединением в конденсированной фазе является восстановленный алюминий, что свидетельствует о повышении восстановительных свойств аналитической зоны. В присутствии 8-меркаптохинолина источником образования свободных атомов алюминия могут быть, по крайней мере, три соединения в конденсированной фазе –  $Al_2O_3$ ,  $AlN$  и  $Al$ . Сульфид  $Al_2S_3$  и карбид  $Al_4C_3$  присутствует в конденсированной фазе в незначительных количествах.

При оптимальной температурно-временной программе в условиях температурно-стабилизированной печи с платформой определены значения характеристической массы алюминия (масса, обеспечивающая 1% поглощения или 99% пропускания, то есть  $A=0,0044$ ), которое составило 20 пг, что несколько хуже, чем минимально возможное значение.

Возможный механизм атомизации был учтен нами при исследовании влияния комплексобразующих химических модификаторов на метрологические характеристики ЭТААС метода определения алюминия в сложных объектах.

**ТЕСТ-СИСТЕМИ НА ОСНОВІ ПІНОПОЛІУРЕТАНУ  
З ІММОБІЛІЗОВАНИМИ ПОХІДНИМИ ДИМЕРКАПТОТІОПІРОНУ  
ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ПАЛАДІЮ**

*Тимова А.О., Худякова С.М., Чмиленко Ф.О.*

Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара

[analyticdnu@mail.ru](mailto:analyticdnu@mail.ru)

Паладій широко застосовують в різних сферах виробництва, науки та техніки. Разом з потенційно токсичними елементами він віднесений до забруднюючих речовин міських стічних вод та осадів (Pollutants in Urban Waste Water and Sewage Sludge/Office for Official Publications of the European Communities (OOP EC). Luxembourg, 2001). Розробка простих чутливих та селективних методів аналітичного контролю мікродошток паладію в різних об'єктах залишається актуальною задачею.

Похідні димеркаптотіопіроно (ДТ) в реакціях з Pd(II) характеризуються високою швидкістю комплексоутворення як у розчинах, так і в твердій фазі сорбентів. Встановлено ефективність методу динамічного концентрування та розділення Pd(II) та Pt(IV) з використанням паперових носіїв, модифікованих 3-метил-2,6-димеркапто-1,4-тіопіроном (H<sub>2</sub>M).

Запропоновано використовувати полімерну матрицю – пінополіуретан (ППУ) для іммобілізації ДТ. Отримано нові сорбенти на основі H<sub>2</sub>M, 3-феніл-2,6-димеркапто-1,4-тіопіроно (H<sub>2</sub>Ф) та їх тіопірондимеркаптідних сполук (ТДС) з металами. ДТ є аналітичними реагентами для визначення ряду халькофільних металів, і одним із способів підвищення селективності є використання їх комплексів для аналітичного визначення при обміні одного йону металу на другий. Стійкість у водних розчинах, наприклад, комплексів H<sub>2</sub>M з деякими металами, включаючи Pd(II), відповідає ряду: Pd(II) > Bi(III) > Sb(III) > Cd(II) > Pb(II) > Cu(II), а у випадку H<sub>2</sub>Ф – Pd(II) > Bi(III) > Sb(III) > Cu(II) > Pb(II) > Cd(II), що дозволяє йонам Pd(II) витіснити інші метали. Для розробки методики візуального тестового визначення Pd(II) застосовували ППУ, імпрегнований H<sub>2</sub>M або його комплексом з Cd(II). Застосування сорбційно-аналітичних системи ППУ-H<sub>2</sub>M-Pb(II) та ППУ-H<sub>2</sub>Ф-Pb(II) дало можливість виявлення мікродошток Pd(II) у розчинах за наявності Cu(II) або Cd(II), при цьому для твердофазних реакцій зареєстрували найбільшу контрастність. У залежності від вмісту Pd(II) у розчині сорбент змінював забарвлення з жовтого на темно коричневе. При цьому величина аналітичного сигналу визначається ефективністю сорбції Pd(II) із розчину та повнотою заміщення Pb(II) в ТДС у полімерній матриці. Визначено оптимальні умови цих процесів, а саме: час контакту фаз в статичному режимі концентрування Pd(II) або швидкість прокачування розчину в динамічному режимі із застосуванням медичного шприца, в який вміщували таблетку модифікованого ППУ. Оптимальна кислотність розчину, з якого вилучали Pd(II) становила 0,1 М HCl. Визначено сорбційну ємність ППУ за H<sub>2</sub>M та H<sub>2</sub>Ф (ммоль/г): 2,8×10<sup>-2</sup> та 2,0×10<sup>-2</sup> відповідно. Для сорбційно-аналітичних систем ППУ-H<sub>2</sub>M та ППУ-H<sub>2</sub>Ф ємність за Pd(II) складає 1,4×10<sup>-2</sup> та 1,1×10<sup>-2</sup> ммоль/г відповідно. Таким чином, можна припустити, що у фазі сорбенту молярне співвідношення металу до органічного ліганду дорівнює 1:2. Розроблені сорбенти, отримані імпрегнуванням ТДС металів, використано для розробки різних варіантів непрямого інструментального визначення Pd(II) за металом, що заміщується в полімерній матриці.

**ПОКАЗАТЕЛИ КАЧЕСТВА ПОДЗЕМНЫХ ВОД г. ЧАСОВ-ЯРА  
И ПРИЛЕЖАЩИХ ТЕРРИТОРИЙ**

*Тютерева Т. Н.,* Касянчук М. Г.

Донбасская национальная академия строительства и архитектуры

tat\_yana\_tutereva@mail.ru

Проблемы, связанные с качеством питьевой воды, остро стоят в Донбассе, расположенном на маловодном Донецком кряже. В связи с изношенностью системы централизованного водоснабжения его услуги не удовлетворяют потребителей, вынуждая их использовать воду из местных источников, качество которой систематически не контролируется. В ходе работы мы проверили (табл. 1) базовые показатели качества пресной подземной воды из родников и колодцев города Часов-Яр и прилежащих сел Артёмовского района Донецкой области — жёсткость временную и общую (по ГОСТ Р 52407-2005), минерализацию (по ГОСТ 18164-72) и бактериальную загрязнённость (по ГОСТ 18963-73).

Таблица 1. Результаты контроля базовых показателей качества воды исследованных источников

Источник	Сухой остаток, г/л	Жёсткость, ммоль/л		Бактер. загрязн., колоний/мл
		общая	временная	
«Золотая рыбка»	1,20±0,26	19,49±0,05	11,17±0,06	196±6
«Часовярец»	1,50±0,13	24,04±0,06	14,67±0,06	164±6
с. Богдановка, колодец	1,15±0,13	20,68±0,10	10,63±0,06	71±2
с. Григорьевка, колодец	2,20±0,10	17,54±0,59	9,97±0,15	35±6
с. Красное, скважина	0,72±0,19	5,37±0,25	6,83±0,23	29±2
с. Красное, родник	0,93±0,10	8,08±0,07	3,37±0,06	40±3
Водопроводная вода	0,70±0,10	4,71±0,07	6,70±0,10	38±11

Таким образом, воды из природных источников с. Красное и из системы центрального водоснабжения г. Часов-Яр соответствуют санитарным стандартам по базовым показателям. Остальные источники не пригодны для питья без предварительной очистки.

## УСОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ МЕТОДИКИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПИЩЕВЫХ СИНТЕТИЧЕСКИХ КРАСИТЕЛЕЙ МЕТОДОМ ТОНКОСЛОЙНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

*Чопенко А.Г., Алемасова Н.В.*

Донецкий национальный университет

[natasha-meshaninova@rambler.ru](mailto:natasha-meshaninova@rambler.ru)

Для улучшения внешнего вида пищевых продуктов часто применяют красители, которые могут быть как природными, так и синтетическими. Несознательные производители могут применять дешевые синтетические красители вместо дорогих природных, без указания на это на этикетке пищевого продукта. Кроме того, содержание разрешенных синтетических красителей необходимо строго контролировать. Для идентификации и определения концентрации синтетических красителей чаще всего применяют хроматографические методы: капиллярный электрофорез, высокоэффективную жидкостную и тонкослойную (ТСХ) хроматографии. Наиболее экспрессным из них является хроматография в тонком слое сорбента.

Правильный выбор сорбента и растворителя или смеси растворителей определяет эффективность разделения веществ методом ТСХ. Стандартные методики идентификации синтетических красителей в пищевых продуктах почти всегда предусматривают использование токсичных органических растворителей – пиридина, метанола, хлороформа и др. С целью повышения безопасности условий труда химиков-аналитиков предложено заменить высокотоксичные растворители на более экологически безопасные (учитывали класс опасности, ПДК в рабочей зоне, летучесть).

Под «простотой» метода ТСХ скрываются весьма сложные и многообразные проблемы, связанные с огромным количеством факторов, влияющих на процесс разделения; часто успешного разделения удается добиться только после трудоемких исследований, в ходе которых приходится прибегать к методу проб и ошибок. Для выбора оптимальной подвижной фазы были применены математическое планирование эксперимента – симплекс-решетчатый план третьего порядка.

Исследования проводили для синтетических пищевых азокрасителей (тартразин E102, кармуазин E122, красный очаровательный E129, желтый «Солнечный закат» E110) и трифенилметанового красителя (синий блестящий E133). С помощью программы HyperChem 8.0.7 рассчитаны физико-химические характеристики исследуемых красителей (липофильность, поляризуемость, дипольный момент), которые оказывают значительное влияние на адсорбцию и элюирование веществ в тонком слое сорбента.

Так как различие свойств сорбента и связывающего вещества, используемого разными производителями, не позволяет автоматически перенести условия хроматографирования, найденные для одних пластин на другие, исследовали разделение красителей на пластинах разных производителей – «Silufol» (производство Kavalier, Чехословакия) и «Sorbfil» (ЗАО Сорбполимер, г. Краснодар). Наилучшие результаты разделения красителей были получены при разделении на пластинке «Sorbfil» с использованием в качестве подвижной фазы смеси смеси изопропанол – уксусная кислота – диметилсульфоксид в соотношении 0,8:0,1:0,1. Определены характеристики разделения (селективность, разрешающая способность).

**РОЗРАХУНКИ КРИВИХ ОСАДЖУВАЛЬНОГО ТИТРУВАННЯ СУМІШЕЙ З ВРАХУВАННЯМ КОМПЛЕКСОУТВОРЕННЯ**Стецик В.В., Цибулько В.А., Чуйкова В.В.

Донецький національний університет

[vikusya\\_bestiya@mail.ru](mailto:vikusya_bestiya@mail.ru)

При розрахунках кривих осаджувального титрування сумішей зазвичай комплексоутворення не враховують, бо в цьому випадку потрібно розраховувати досить складну систему нелінійних рівнянь. Такий розрахунок реально можна виконати тільки із застосуванням спеціальної обчислювальної техніки. Нами розроблена методика розрахунку осаджувального титрування суміші галогенідів. На рисунках приведена крива осаджувального титрування суміші 0.1000 М NaI та 0.1000 М NaCl розчином 0.1000 М AgNO<sub>3</sub>.

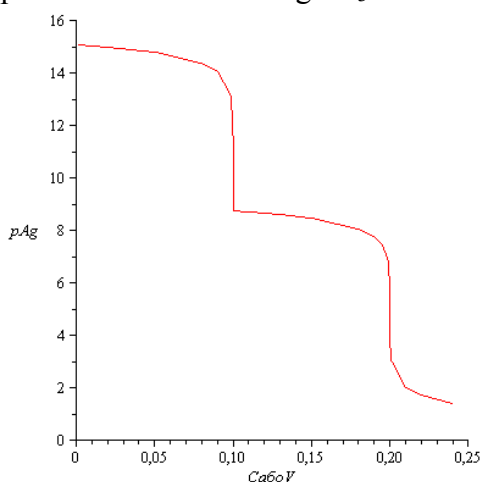


Рис. 1

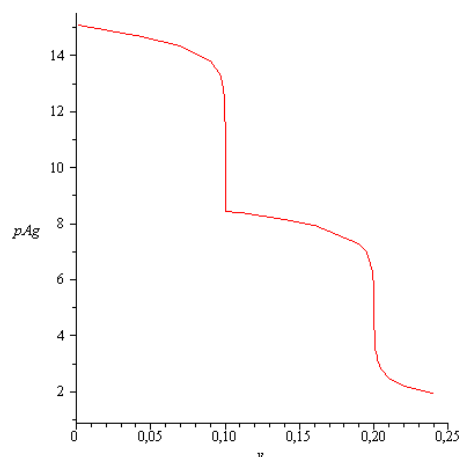


Рис. 2

Криві титрування суміші 0.1000 М NaI та 0.1000 М NaCl розчином 0.1000 М AgNO<sub>3</sub> без врахування зміни об'єму та комплексоутворення (рис.1) та з врахуванням зміни об'єму та комплексоутворення (рис.2).

Складаємо системи алгебраїчних рівнянь на основі виразів добутків розчинності галогенідів та констант стійкості відповідних комплексів. Складність розв'язання полягає не тільки в громіздкій системі нелінійних рівнянь, але й в потребі вчасно включати чи виключати з системи деякі рівняння. На початковому етапі очевидно вираз добутку розчинності хлориду срібла з системи рівнянь треба виключити, бо цей осад в системі ще не утворився. Зате маємо матеріальний баланс за хлорид йонами. Коли добуток концентрацій  $[Ag^+][Cl^-]$  розрахований таким чином перевищить добуток розчинності хлориду срібла, тоді системи алгебраїчних рівнянь видозмінюємо: включаємо в неї вираз добутку розчинності хлориду срібла й виключаємо вираз матеріального балансу за хлорид йонами. Таким чином маємо справу з блочним нелінійним програмуванням.

Титрування вказаної суміші можна проводити двома методами потенціометричним та індикаторним. При потенціометричному методі для фіксації другої точки еквівалентності, що відповідає обох галогенідів, доцільно обробити кілька точок, в області другого скачка на кривій, з обов'язковим охопленням ділянки з максимальною крутизною й методами математичного аналізу в програмі Maple 13 розв'язати задачу на знаходження екстремуму (точка еквівалентності відповідає максимальному значенню першої похідної). Для фіксації першої точки еквівалентності треба розв'язати систему двох рівнянь, що описують гілку кривої безпосередньо до цього перегибу і після нього.

## ИССЛЕДОВАНИЕ АДСОРБЦИИ ИОНОВ ЖЕЛЕЗА(III) МОДИФИЦИРОВАННЫМИ ПРИРОДНЫМИ СОРБЕНТАМИ

*Щербин Э.А., Крымова В.В.*

Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского

[777milena@mail.ru](mailto:777milena@mail.ru)

Сорбционный метод с использованием как природных, так и синтетических сорбентов широко используется для очистки природных и производственных сточных вод от катионов тяжелых металлов. Этот метод позволяет снижать содержание в воде загрязнений органического и неорганического происхождения до любой остаточной концентрации. Значительные количества железа поступают в окружающую среду со сточными водами промышленных предприятий и с сельскохозяйственными стоками. ПДК соединений железа в воде составляет 0,3 мг/л.

Целью данной работы являлось исследование процессов сорбции ионов железа(III) природными сорбентами – бентонитом Крымского месторождения (КМ) и его модифицированными формами.

Бентониты - природные минералы, сочетающие в себе высокие сорбционные свойства, дешевизну и широкую распространенность в природе

Бентониты входят в группу монтмориллонита, химический состав которых отвечает формуле:  $(\text{Na}, \text{Ca})_{0,33}(\text{Al}, \text{Mg})_2\text{SiO}_4(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ .

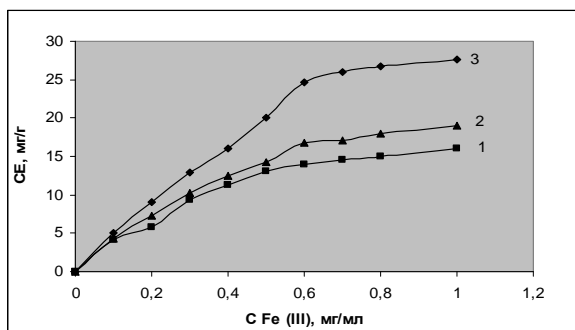
Для улучшения сорбционных свойств сорбенты подвергают активации, для чего используют различные физические и химические методы воздействия: механические, термические, ионный обмен, обработку кислотами и комплексообразующими реагентами, как органической, так и не органической природы.

Нами получены химически модифицированные образцы бентонита (КМ), обработанные: а) 1 н. раствором HCl железа(III), б) 5% спиртовым раствором триэтаноламина (ТЭА).

Адсорбцию ионов  $\text{Fe}^{3+}$  из растворов проводили в статическом режиме при комнатной температуре. Модельные растворы железа(III) в интервале концентраций 0–1,0 мг/мл были приготовлены из  $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ . Количественное определение ионов железа(III) осуществляли спектрофотометрическим методом и методом комплексонометрического титрования.

Исследование процессов адсорбции ионов  $\text{Fe}^{3+}$  проводили в зависимости от концентрации исходных растворов и времени сорбции. Изотермы адсорбции представлены на рис.1. Результаты исследования сорбции железа(III) из растворов показали, что сорбционная емкость (СЕ) бентонита, модифицированного ТЭА, в 2 раза превышает СЕ немодифицированного бентонита.

**Рис.1.** Изотерма адсорбции ионов железа(III) на трех образцах бентонита КМ: 1-бентонит немодифицированный; 2-бентонит, модифицированный HCl; 3-бентонит, модифицированный ТЭА. Время сорбции составило 24 часа.



Степень извлечения ( $\gamma$ ) ионов железа(III) немодифицированным бентонитом достигает 44%, в то время как ( $\gamma$ ) бентонита, модифицированного ТЭА, достигает 85%. Таким образом, модифицирование бентонита КМ комплексообразующим веществом триэтаноламином значительно улучшает его сорбционные характеристики.

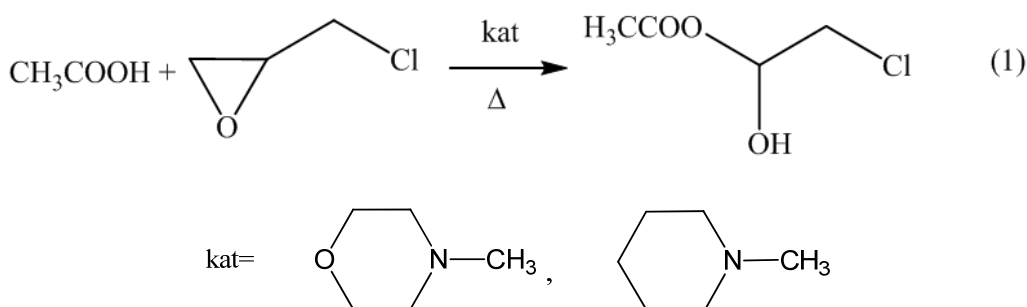
## КІНЕТИКА АЦЕТОЛІЗУ ЕПІХЛОГІДРИНУ В ПРИСУТНОСТІ СТЕРИЧНО ЗАТРУДНЕНИХ ТРЕТИННИХ АМІНІВ

*Арендаренко С.С., Беспалько Ю.М., Швед О.М.*

Донецький національний університет

[viking2007@ukr.net](mailto:viking2007@ukr.net)

Оксирани широко застосовуються в якості хімічних проміжних ланок у виробництві розчинників, пластифікаторів, клеїв, синтетичних смол. Особливо вирізняють серед даного класу сполук  $\alpha$ -оксиди, наприклад, епіхлоргідрин, що характеризується високою реакційною здатністю. Найбільше практичне значення мають реакції епіхлоргідрину з нуклеофільними реагентами, зокрема, карбоновими кислотами:



Ефективними каталізаторами реакції (1) є органічні основи, такі як третинні аміни, які дозволяють селективно провести синтез хлоргідринових ефірів карбонових кислот нормальної будови. Не зважаючи на широке висвітлення проблеми каталітичного ацидолізу оксиранів в науковій літературі, були зроблені лише поодинокі спроби пояснити залежність між швидкістю нуклеофільного розкриття епоксидного циклу  $\alpha$ -оксидів від структури та основності амінів. Проте відсутність чіткої, систематизованої інформації щодо перебігу реакції (1) в присутності третинних амінів не дозволяє однозначно описати механізм та пояснити закономірності даного процесу.

Метою даної роботи є вивчення впливу структури каталізатору та температури на швидкість реакції епіхлоргідрину з оцтовою кислотою. В якості каталізатора обрані N-метилморфолін та N-метилпіперидин, які є стерично ускладненими основами.

Дослідження кінетики реакції ацетолізу проводились у надлишку епіхлоргідрину, що одночасно виступає як реагент та розчинник при температурі 80°C. Контроль за ходом досліджуваної реакції здійснювали методом потенціометричного кислотно-основного титрування.

На основі кінетичних досліджень реакції каталітичного ацетолізу епіхлоргідрину оцтовою кислотою, що включали варіюванні концентрації каталізатору, встановлено, що кінетичні криві в координатах концентрація нуклеофільного реагенту – час мають прямолінійний характер. Порядок реакції за каталізатором є дробовий але близький до першого. Експериментальні дані були співставлені з аналогічними результатами для третинних амінів з іншими алкільними замісниками, що дозволило уточнити роль третинних амінів як каталізаторів реакції (1) та сформулювати роль стеричного фактору на кінетичні параметри реакції (1). Зроблені пропозиції щодо деталізації механізму реакції.

**ИНГИБИРУЮЩЕЕ ДЕЙСТВИЕ ПИРИМИДИЛГИДРАЗОНОВ  
ПРИ ОКИСЛЕНИИ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ**

*Артемова О.А., Хижан Е.И., Тихонова Г.А., Хижан А.И.\**

Донецкий национальный университет

\*Институт физико-органической химии и углехимии им.Л.М.Литвиненко НАНУ

[kasirelena@mail.ru](mailto:kasirelena@mail.ru)

Поиск новых синтетических высокоактивных и малотоксичных соединений с антиоксидантной активностью является актуальной проблемой на сегодняшний день. Введение гетероциклических фрагментов в состав молекулы эффективных антиоксидантов является одним из способов получения биоантиоксидантов. Известно, что соединения гидразонового ряда являются эффективными ингибиторами процессов окисления. Ингибирующее действие гидразонов обусловлено обрывом цепей окисления по реакции с пероксирадикалами окисляющегося субстрата. Пиримидины входят в состав различных витаминов, используются как лекарственные препараты. В данной работе на практике осуществлена возможность комбинации этих активных соединений.

Объектами данной работы являются пиримидилгидразоны, вещества, содержащие фрагменты, как гидразонов, так и пиримидинов.

Цель – оценка антиоксидантных свойств пиримидилгидразонов при окислении органических веществ в гомогенных и гетерогенных системах.

Методы исследования кинетики процессов – хемилюминесцентный и йодометрический. Количественно антиоксидантную активность (АОА) ингибиторов (InH) характеризовали стехиометрическим коэффициентом ингибирования (f), константой скорости взаимодействия вещества с пероксирадикалами окисляющегося субстрата  $RO_2^{\cdot}$  ( $k_7$ ), отношением  $\tau/\tau_0$  ( $\tau_0$  – период индукции без ингибитора,  $\tau$  – период индукции с ингибитором).

Установлено, что производные пиримидилгидразонов являются эффективными ингибиторами окисления как при окислении этилбензола в гомогенной системе, так и в при окислении этилбензола и фосфатидилхолина в прямой водной эмульсии. Закономерности изменения антиоксидантной активности пиримидилгидразонов в зависимости от строения, полученные при окислении в гомогенной системе, не сохраняются при переходе к гетерогенным системам. Это может быть обусловлено распределением антиоксиданта между водной и органической фазами. В целом, предложенные соединения могут являться перспективными ингибиторами окисления органических веществ, антиоксидантная активность которых находится на уровне таковой для стандартного ингибитора ионола.

## КАТАЛИЗ РАСПАДА ПЕРОКСИДА ВОДОРОДА ЙОДИДОМ АЦЕТИЛХОЛИНА

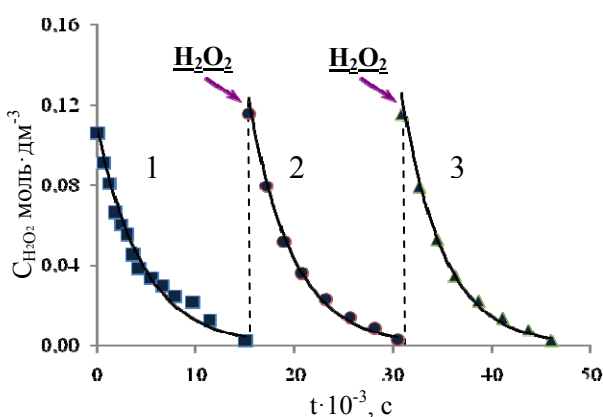
*Букрей А.О., Берестнева Ю.В., Ракша Е.В., Туровский Н.А.*

Донецкий национальный университет

[N.Turovskij@donnu.edu.ua](mailto:N.Turovskij@donnu.edu.ua)

Пероксид водорода является одной из активных форм кислорода, которые принимают участие в метаболизме живой клетки. Внутриклеточная концентрация  $H_2O_2$  варьируется в пределах от 1 до 700 нМ и контролируется антиоксидантными системами ферментативной и неферментативной природы. Стационарная концентрация  $H_2O_2$  выше 1000 нМ вызывает окислительный стресс и ведет к гибели клеток. Пероксид водорода также является экологически чистым реагентом. Доступность и многогранная реакционная способность  $H_2O_2$  стимулируют проведение исследований с его использованием, как в фундаментальных, так и в прикладных областях науки.

В работе установлено каталитическое действие йодида ацетилхолина (AcChI) в реакции распада пероксида водорода в воде. Экспериментальные исследования выполнены в интервале температур 296-318 К в условиях избытка пероксида водорода ( $[H_2O_2]_0 = 0,1$  М,  $[AcChI]_0 = (1 \div 6) \cdot 10^{-3}$  М). Реакции проводили в стеклянном термостатированном реакторе. Концентрацию  $H_2O_2$  контролировали йодометрией, а йодид-ионов – аргентометрически.



На рисунке представлены кинетические кривые реакции распада  $H_2O_2$  в присутствии AcChI ( $T = 308$  К,  $[H_2O_2]_0 = 0,1$  М,  $[AcChI]_0 = 6,0 \cdot 10^{-3}$  М). Эксперимент проводили в условиях избытка  $H_2O_2$ . В течении 250 минут наблюдали полный распад пероксида. После этого вводили новые порции  $H_2O_2$  ( $[H_2O_2]_0 = 0,1$  М) и наблюдали дальнейший распад пероксида. Кинетические кривые 1-3 линеаризуются в координатах реакции первого порядка. Эффективные константы скорости

реакции распада  $H_2O_2$  для каждого участка ( $k_{ef}, c^{-1}$ ), степень конверсии пероксида (S, %) и количество каталитических циклов йодида ацетилхолина (n) представлены в таблице.

Таким образом, йодид ацетилхолина является эффективным катализатором распада  $H_2O_2$  в воде, т.к. он не расходуется и не дезактивируется.

Таблица

Кинетические параметры распада  $H_2O_2$  в присутствии AcChI в воде

Параметры	Кривая 1	Кривая 2	Кривая 3
$k_{ef} \cdot 10^4, c^{-1}$	$2,29 \pm 0,10$	$2,28 \pm 0,11$	$2,29 \pm 0,09$
S, %	97,72	97,5	97,6
n	17	19 (36)	19 (55)

Исследовано влияние температуры на кинетические параметры реакции распада пероксида водорода в присутствии йодида ацетилхолина. Энергия активации реакции каталитического распада  $H_2O_2$  в присутствии AcChI составляет 58 кДж/моль.

## АНТИОКСИДАНТНОЕ ДЕЙСТВИЕ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРИДИЛГИДРАЗОНОВ АРОМАТИЧЕСКИХ АЛЬДЕГИДОВ

*Виноградов В.В., Хижан О.І., Николаевский А.Н.*

Донецкий национальный университет

[antioxidant104@yandex.ua](mailto:antioxidant104@yandex.ua)

Пиридилгидразоны ароматических альдегидов обладают антиоксидантной активностью (АОА) при окислении органических веществ в гомогенных и гетерогенных системах. Их ингибирующее действие обусловлено обрывом цепей окисления по реакции с пероксирадикалами окисляющегося субстрата. Изучение антиоксидантной активности (АОА) гидразонов при окислении различных модельных систем, ее связи со строением соединений позволяет расширить представление о механизмах действия ингибиторов в цепных свободнорадикальных процессах.

Определено, что при иницированном азодиизобутиронитрилом (343К) окислении этилбензола (ЭТБ) антиоксидантная активность пиридилгидразонов превышает АОА стандартного ингибитора ионола.

Пиридилгидразоны ингибируют и высокотемпературное автоокисление ЭТБ (393К), однако, в отличие от иницированного процесса эффективность их значительно ниже по сравнению с ионолом, что может быть обусловлено взаимодействием этих соединений с молекулярными окислителями, прежде всего, с кислородом и гидропероксидом. Влияние этих процессов на ингибирующее действие гидразонов зависит от механизма. В случае радикального – образуются новые свободные радикалы, которые являются дополнительным источником иницирования, что и обуславливает снижение эффективности антиоксидантного действия пиридилгидразонов. Если в реакции ингибитора с молекулярными окислителями образуются только молекулярные продукты, то происходит усиление АОА ингибитора. Установлено, что фенилгидразоны достаточно эффективно разлагают гидропероксид кумила. Введение электроноакцепторного гетероцикла в гидразонную часть молекулы снижает лабильность NH-связи, и пиридилгидразоны по сравнению с фенилгидразонами менее активны в реакции с гидропероксидом.

Уменьшение эффективности ингибирования автоокисления ЭТБ косвенно свидетельствует о том, что в неполярной среде гидразоны разлагают гидропероксиды с образованием радикалов.

Изучено ингибирующее действие производных пиридилгидразонов при окислении эмульсии прямого типа ЭТБ:вода. Корреляция АОА соединений в гомогенной и гетерогенной системах отсутствует, что может быть связано с коллоидно-химическими факторами, например, распределением ингибиторов между фазами эмульсии. Наличие в структуре молекул гидразонов дополнительных полярных групп (гидрокси-, метокси-) повышает их гидрофильность, растворимость в водной фазе – эти соединения менее эффективны как антиоксиданты, особенно в сравнении с ионолом. В исследуемом ряду, пиридилгидразон 3,5-диметил-4-гидроксибензальдегида имеет одинаковую с ионолом ингибирующую активность при окислении эмульсии ЭТБ.

В отсутствие железа при иницировании азодиизобутиронитрилом (АИБН) окисления дисперсии ФХ:вода гидразоны практически независимо от строения ингибируют окисление этой системы, причем, вдвое эффективнее, чем ионол. В свою очередь, отсутствие влияния природы и очень высокая АОА гидразонов в водно-липидных системах может быть результатом их взаимодействия с гидропероксидами на поверхности раздела фаз дисперсий с образованием молекулярных продуктов.

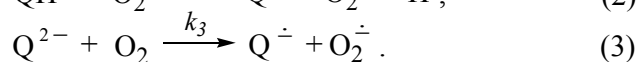
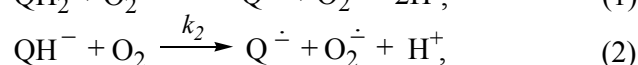
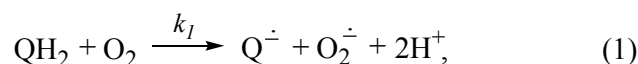
## ЗАРОЖДЕНИЕ РАДИКАЛОВ ПРИ АВТООКСИЛЕНИИ ГИДРОХИНОНА В СИЛЬНОЩЕЛОЧНОЙ СРЕДЕ

*Гуков В.С., Одарюк И.Д., Шендрик А.Н.*

Донецкий национальный университет

[odaryuk\\_ivan@yahoo.com](mailto:odaryuk_ivan@yahoo.com)

Как известно, фенолят-ионы проявляют большую реакционную способность по отношению к  $O_2$ , чем их нейтральные формы. Значения  $pK_{a1}$  для большинства двухатомных фенолов ( $QH_2$ ) в воде находятся в пределах 9-10, а  $pK_{a2}$  примерно на 2 порядка выше. То есть, в пределах рН 3–9, 9–11 и выше 11 основной будет нейтральная, моноанионная или бианионная форма фенола, соответственно. Восстанавливающая способность возрастает в ряду  $QH_2$ ,  $QH^-$ ,  $Q^{2-}$ . Скорость реакции зарождения радикалов при автоокислении  $QH_2$  должна определяться соотношением констант скоростей реакций (1) – (3) и концентраций разных форм фенолов.



Ранее получены значения  $k_2$  для некоторых фенолов методом ингибиторов при использовании в качестве последнего аскорбиновой кислоты ( $AscH_2$ ). В данной работе предпринята попытка оценить значение  $k_3$  в реакции автоокисления гидрохинона (р- $QH_2$ ). Для решения этой задачи была исследована кинетика реакции ингибированного аскорбиновой кислотой окисления р- $QH_2$  при рН 12.5 хемилюминесцентным (ХЛ) и спектрофотометрическим методами.

При ингибированном аскорбиновой кислотой автоокислении р- $QH_2$  на кинетических кривых ХЛ имеются периоды индукции ( $\tau_{ind}$ ), которые линейно увеличиваются с концентрацией ингибитора. Если допустить, что при автоокислении р- $QH_2$  радикалы зарождаются только по реакции (3), то рассчитанное значение  $k_3$  без учета непродуктивного расходования  $AscH_2$  будет равно  $451 \text{ M}^{-1} \cdot \text{c}^{-1}$ . Учитывая вклад реакции (2), для которой  $k_2 = 24 \text{ M}^{-1} \cdot \text{c}^{-1}$ , получаем значение  $k_3 = 443 \text{ M}^{-1} \cdot \text{c}^{-1}$ . То есть ее влияние на скорость зарождения радикалов в этих условиях незначительно. Однако скорость непродуктивного расходования  $AscH_2$  только в 6.2 раза меньше, чем скорость автоокисления р- $QH_2$  при  $[p-QH_2]_0/[AscH_2]_0 \approx 1$  и рН 12.5. То есть для определения значения  $k_3$  при использовании аскорбиновой кислоты как ингибитора необходимо учитывать реакцию ее непродуктивного расходования. Для решения этой задачи кинетику автоокисления р- $QH_2$  и  $AscH_2$ , по-отдельности и в смеси, изучали спектрофотометрическим методом. Так как полосы поглощения р- $QH_2$  и  $AscH_2$  частично перекрываются кинетику ингибированного автоокисления первого вещества изучали по убыли ингибитора при  $\lambda_{max}=299 \text{ нм}$  и условия  $[AscH_2]_0/[p-QH_2]_0=6$  и 12.

Если ингибитор в реакционной смеси расходуется по закону нулевого порядка, то кинетические кривые его расходования будут линейными. Это допущение хорошо согласуется с экспериментом. Полученное при использовании такого подхода значение  $k_3$  равно  $241 \pm 44 \text{ M}^{-1} \cdot \text{c}^{-1}$ . Таким образом, в работе обоснована возможность измерения константы скорости зарождения радикалов по реакции (3) в сильнощелочной среде спектрофотометрическим методом, с использованием аскорбиновой кислоты в качестве ингибитора.

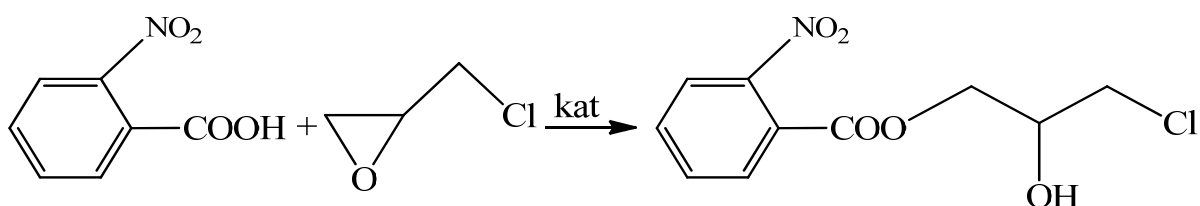
**РЕАКЦІЙНА ЗДАТНІСТЬ ОРТО-ЗАМІЩЕНИХ БЕНЗОЙНИХ КИСЛОТ  
У РЕАКЦІЇ З ЕПІХЛОРГІДРИНОМ У ПРИСУТНОСТІ  
НИЗЬКООСНОВНИХ АМІНІВ**

*Зінченко П.В., Сінельникова М.А., Швед О.М.*

Донецький національний університет

z.four.system@gmail.com

Реакція карбонових кислот з епіхлоргідрином лежить в основі синтезу гліцидилкарбонових ефірів, що є перспективними мономерами для отримання полімерних композицій з різноманітними властивостями та широким спектром використання.



Кінетика взаємодії карбонових кислот з епіхлоргідрином має низку специфічних особливостей – зокрема, дослідження у якості каталізатору в реакціях подібного типу низькоосновних амінів показало наявність індукційного періоду.

Метою даної роботи є дослідження поведінки низькоосновних амінів у процесах взаємодії епіхлоргідрину зі стерично ускладненими орто-бензойними кислотами.

Об'єктами дослідження обрано орто-нітробензойну кислоту та епіхлоргідрин, що є одночасно субстратом та розчинником. В якості каталізатору – низькоосновного аміну – обрано *p*-формілдиметиланілін. Кінетичні дослідження проводилися за температурою 60 °С, концентрація каталізатору варіювалась в межах 0.005÷0,00125 моль/л. Контроль за ходом реакції проводили потенціометричним кислотно-основним титруванням.

На основі проведення кінетичних досліджень реакції орто-нітробензойної кислоти у присутності низькоосновного *p*-формілдиметиланіліну встановлено нульовий порядок реакції за нуклеофільним реагентом після 20% ступеню конверсії кислотного реагенту та перший порядок реакції за каталізатором. Залежності швидкості мають лінійний характер із задовільним коефіцієнтом кореляції, що свідчить на користь нульового порядку за кислотою. Константи швидкості, що розраховані за рівнянням псевдонульового порядку, є сталими у межах похибки експерименту.

Показано наявність індукційного періоду дії каталізатору до 20% ступеню конверсії кислоти. Розраховані константи швидкості, що спостерігаються, а також константа швидкості каталітичного та некаталітичного потоку реакції. Оцінена каталітична активність каталізатора. Співставлена каталітична дія *p*-формілдиметиланіліну в реакції незаміщеної бензойної кислоти з епіхлоргідрином. Встановлено, що орто-положення замісника в бензойній кислоті збільшує її реакційну здатність в порівнянні з незаміщеною кислотою. Порівняння впливу *p*-формілдиметиланіліну з іншими низькоосновними диметиланілінами в аналогічній реакційній серії дозволило встановити, що індукційний період, який спостерігається в каталітичній дії цих основ, залежить від їх констант основності. Зроблені пропозиції щодо механізму реакції, які стосуються поведінки низькоосновних амінів.

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОРЯДКА ПО АЛЬДЕГИДНОМУ КОМПОНЕНТУ В  
РЕАКЦИИ ОКСИДАТИВНОЙ ЦИКЛИЗАЦИИ СУБСТРАТОВ  
ПИКТЕ-ШПЕНГЛЕРА**

*Клягина А.А.\**, *Сердюк А.А.\*\**, *Касянчук М.Г.\*\**, *Онейда И.А.\*\**

\* Донецкий национальный университет

\*\* Институт физико-органической химии и углехимии им. Л. М. Литвиненко НАН  
Украины

[kasianczuk@rambler.ru](mailto:kasianczuk@rambler.ru)

Реакция Пикте-Шпенглера является одной из основных реакций в синтезе гетероциклических соединений, которую интенсивно используют для синтеза алкалоидов и их синтетических аналогов. Она используется также для получения соединений, важных в технике и электронике. В то же время публикации, посвященные её разработке, затрагивают преимущественно область синтетической химии, и гораздо реже касаются кинетики и механизма её протекания. Изучаемая реакция представлена на схеме 1, где Ar: 2,4 – дихлорфенил.

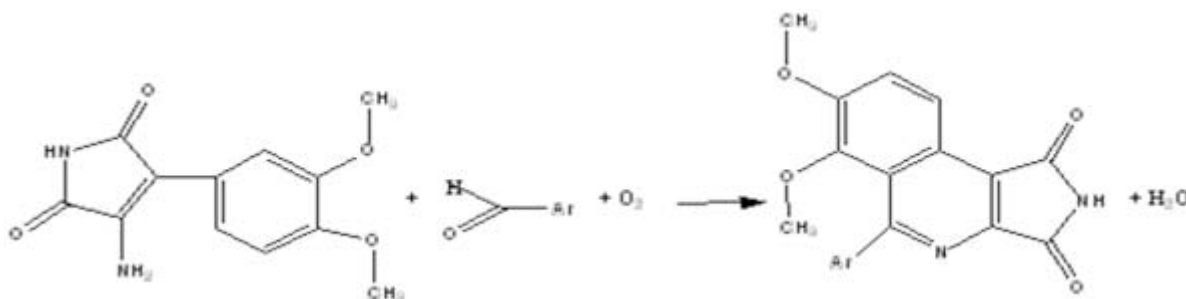


Схема 1.

В трифторуксусной кислоте методом газовой вольмометрии исследовано поглощение кислорода в реакции 2,4-дихлорбензальдегида и 3-амино-4-(3,4-диметоксифенил)-2,5-диоксопиразола при разном соотношении концентраций этих веществ. Результаты представлены в табл. 1.

Таблица 1. Зависимость начальной скорости поглощения кислорода от соотношений концентраций субстратов: 318 К, 760 мм. рт. ст., концентрация аминного компонента 0,47 моль/л.

Концентрация 2,4-дихлорбензальдегида, моль/л	$W_0 \cdot 10^5$ , моль/л·с
0,24	$0,55 \pm 0,04$
0,47	$0,92 \pm 0,005$
0,94	$1,31 \pm 0,004$

Измерение скорости оксидативной циклизации дает возможность определить порядок по альдегидному компоненту — первый.



**КИНЕТИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ ОКИСЛЕНИЯ  
ФОСФАТИДИЛХОЛИНА В ГЕТЕРОГЕННЫХ СИСТЕМАХ***Кузьминых О.А.*

Донецкий национальный университет

[k\\_y\\_z\\_r90@mail.ru](mailto:k_y_z_r90@mail.ru)

Фосфатидилхолины (лецитины) – природные поверхностно-активные вещества, которые применяются в производстве пищевых продуктов, лекарственных и косметических средств, а также в индивидуальном виде в качестве биологически-активной добавки. Фосфатидилхолины являются важной частью в клетках различных тканей, они выполняют как метаболические, так и структурные функции в мембранах. Характерным для всех фосфолипидов является то, что одна часть их молекулы обнаруживает резко выраженную гидрофобность, тогда как другая часть гидрофильна. В молекуле фосфолипида лецитина содержатся две длинные цепи, из которых одна является ненасыщенной. Поэтому актуальным является вопрос антиокислительной стабилизации систем, компонентом которых являются фосфолипиды. Особенно интересным является исследование закономерностей окисления фосфатидилхолина в составе водных дисперсий, поскольку большинство реальных объектов на основе лецитина являются гетерогенными системами. При диспергировании липидов в жидкости фосфолипиды принимают одну из трех возможных конфигураций: мицеллярную, двухслойную или ламеллярную (типичное состояние фосфолипидов биомембран) и гексагональную фазу. Способность фосфолипидов находиться в той или иной фазе зависит как от внутренних свойств молекул (природа «головной» группы, длина и степень насыщения жирной кислоты), так и внешних факторов (гидратация, температура, рН и ионная сила раствора). Для изучения процессов окисления, варьируя состав дисперсий фосфатидилхолина, можно получать системы, моделирующие технические объекты, пищевые продукты, живые организмы.

В данной работе исследованы кинетические закономерности инициированного окисления фосфатидилхолина в гетерогенной системе.

Водную дисперсию фосфатидилхолина готовили с использованием ПАВ (додецилсульфат натрия) и без него. Применение ультразвука способствовало уменьшению дисперсности и получению стабильной системы. Содержание соевого лецитина составляло 2-8 об.%. В качестве инициатора окисления использовали азодиизобутиронитрил. Окисление проводили при 333К. Метод исследования кинетики процесса – йодометрический.

Показано, что скорость окисления дисперсии практически не зависит от концентрации фосфатидилхолина при варьировании его в интервале 2-8 об.% как в присутствии додецилсульфата натрия так и без него. С изменением компонентов системы такая зависимость более выражена. Это может быть связано со строением мицеллярных структур образованных фосфатидилхолином. Так введение детергента додецилсульфата натрия может приводить к образованию смешанных мицелл фосфатидилхолина и додецилсульфата натрия.

## КАТАЛИЗ N-ГИДРОКСИФТАЛИМИДОМ РЕАКЦИЙ ОКИСЛЕНИЯ АЛКИЛАРЕНОВ

*Литвинов Ю.Е., Куц О.В., Опейда И.А.*

Институт физико-органической химии и углекислотной химии им. Л.М. Литвиненко НАНУ  
[nhpi@rambler.ru](mailto:nhpi@rambler.ru)

Исследовано каталитическое действие N-гидроксифталимида (NHPI) в процессах окисления аценафтена (75 °С) и тетралина (66 °С) молекулярным кислородом (1 атм.) в присутствии азодиизобутиронитрила. Первичные продукты окисления этих субстратов в присутствии NHPI – аценафтил-9-гидропероксид и тетралингидропероксид, соответственно.

Установлено, что окисление аценафтена и тетралина в данных условиях подчиняется общему механизму окисления органических субстратов, катализированного NHPI, а скорость окисления описывается уравнением:

$$W_{O_2} = -\frac{d[O_2]}{dt} = k_p[RH] \sqrt{\frac{W_i}{2k_t}} + k_f[NHPI] \sqrt{\frac{W_i}{2k_t}},$$

где [RH] – концентрация субстрата; [NHPI] – концентрация катализатора;  $W_i$  – скорость инициирования;  $k_p$  – константа скорости реакции отрыва атома водорода пероксильным радикалом;  $k_t$  – константа скорости реакции обрыва цепи;  $k_f$  – константа скорости реакции NHPI с пероксильным радикалом. В таблице приведены кинетические параметры стадии роста цепи в процессах окисления аценафтена и тетралина ( $k_H'$  – парциальная константа скорости реакции отрыва атома водорода (в расчете на 1 атом бензильного водорода) от молекулы субстрата фталимид-N-оксильным радикалом (PINO), который образуется *in situ* в реакционной системе из молекулы NHPI):

RH	$W_i$ , моль/(л·с)	$k_p$ , л/(моль·с)	$k_f$ , л/(моль·с)	$k_H'$ , л/(моль·с) (25 °С)
Аценафтен	$(2,66 \pm 0,08) \cdot 10^{-7}$	179,6 ± 1,5	$(4,28 \pm 0,07) \cdot 10^3$	7,7 ± 0,04
Тетралин	$(1,39 \pm 0,08) \cdot 10^{-7}$	13,8	764,9 ± 2,3	2,84 ± 0,04

Исследована стадия отрыва атома водорода радикалом PINO от молекул органических соединений (циклоалкан, алкилбензолы, кетоны, фенол, бензиловый спирт). Парциальная константа скорости реакции взаимодействия PINO с молекулой субстрата изменяется в интервале от 0,00049 до 88 л/(моль·с) при изменении энергии диссоциации связи С-Н от 410 для циклоалкана до 341,9 кДж/моль для тетралина.

Для ряда субстратов (тетралин, флуорен, аценафтен, толуол, *n*-ксилол, этилбензол, дибензил, циклогексилбензол) получена температурная зависимость  $k_H'$ , рассчитаны энергия активации, энтропия активации и предэкспоненциальный множитель. На основе полученных данных сделан вывод, что реакционная способность субстрата в реакциях с PINO определяется не только термодинамическим фактором, но также структурными особенностями строения молекулы субстрата. Показано, что при близких значениях энергии диссоциации С-Н связи и потенциалах ионизации в молекулах полициклических углеводородов отсутствие внутреннего вращения алкильных групп приводит к снижению энтропии реагентов, что обуславливает их повышенную реакционную способность в результате увеличения энтропии активации реакции.

Полученные данные важны для оценки эффективности действия NHPI как катализатора окисления алкиларенов в мягких условиях (<100 °С, 1 атм.).

**ИНГИБИРУЮЩЕЕ ДЕЙСТВИЕ ХИНОЛИЛГИДРАЗОНОВ  
В ПРОЦЕССАХ ОКИСЛЕНИЯ ЭТИЛБЕНЗОЛА***Маслова В.Ю.*

Донецкий национальный университет

[antioxi@bk.ru](mailto:antioxi@bk.ru)

Окисление углеводов, спиртов, кислот, жиров и других органических веществ свободным кислородом представляет собой цепной процесс. Окислительные процессы приводят к порче ценных пищевых продуктов (прогорканию жиров, разрушению витаминов), потере механической прочности и изменению цвета полимеров (каучук, пластмасса, волокно), осмолению топлива, образованию кислот и шлама в турбинных и трансформаторных маслах и др. Для замедления таких процессов применяют антиоксиданты. Антиоксиданты могут предотвратить разрушающее действие свободных радикалов на клетки живых организмов. Одними из наиболее перспективных антиоксидантов и биоантиоксидантов могут быть вещества, полученные в результате комбинации эффективных антиоксидантов с гетероциклическими фрагментами. Такими соединениями являются хинолилгидразоны. В структуре этих соединений с одной стороны содержится фрагмент алкалоида липидина, с другой стороны фрагмент гидразона с лабильной NH-связью.

Целью данной работы является изучение антиоксидантных свойств хинолилгидразонов гидроксibenзальдегидов при инициированном окислении этилбензола в гомогенной и гетерогенной системе.

Методы исследования кинетики процесса – хемилюминесцентный и йодометрический. Количественно антиоксидантную активность ингибиторов окисления характеризовали периодом индукции ( $\tau$ ), стехиометрическим коэффициентом ингибирования ( $f$ ), константой скорости взаимодействия с пероксильными радикалами ( $k_7$ ).

Установлено, что введение хинолилгидразонов приводит к снижению хемилюминесцентного свечения, т.е. хинолилгидразоны взаимодействуют с пероксильными радикалами этилбензола. Показано, что наиболее вероятными реакционными центрами, по которым идет обрыв цепей окисления является NH- и OH-группы гидразонной части молекулы. Для установления того, какой из этих реакционных центров вносит основной вклад в антирадикальную активность гидразонов были проведены квантово-химические расчеты прочности NH- и OH-связей. Сравнение  $D_{N-H}$  и  $D_{O-H}$  в хинолилгидразонах гидроксibenзальдегидов свидетельствует о том, что N-H связь является менее прочной, а значит более реакционно-способной по отношению к пероксирадикалу. Это подтверждает основной вклад N-H-группы в антиоксидантную активность хинолилгидразонов гидроксibenзальдегидов.

Установлено, что хинолилгидразоны сохраняют свою активность при окислении эмульсии прямого типа этилбензол:вода. Для одних соединений этого ряда веществ на кинетических кривых окисления этилбензола в эмульсии видны достаточно четкие периоды индукции, другие же только снижают скорость окисления этилбензола.

Рассчитаны кинетические параметры антиоксидантного действия этого ряда веществ как в гомогенных, так и в гетерогенных системах.

## СРАВНЕНИЕ СУБСТРАТНОЙ СЕЛЕКТИВНОСТИ В РЕАКЦИЯХ ЭЛЕКТРОФИЛОВ С НАСЫЩЕННЫМИ УГЛЕВОДОРОДАМИ В СЕРНОКИСЛОТНЫХ РАСТВОРАХ

Мерзликina М.А., Волкова Л.К., Рудаков Е.С.

Институт физико-органической химии и углехимии им.

Л.М. Литвиненко НАНУ

[mamerslikina@yandex.ua](mailto:mamerslikina@yandex.ua)



Одним из основных результатов исследования кинетики и механизмов активации насыщенных углеводородов (RH) окислителями, металлокомплексами, электрофилами в водных и сернокислотных средах является разделение механизмов электрофильных реакций у насыщенного атома углерода на две группы. Отрыв гидрид-иона, диссоциативный механизм, реагенты названы Н-электрофилами и электрофильное замещение у атома углерода с синхронным отрывом протона, ассоциативный механизм, реагенты – С-электрофилы. Реакции этих групп различаются по знаку величины разности энергий активации циклогексана и циклопентана ( $E_6 - E_5$ ).

$E_6 - E_5 > 0$  для Н-электрофилов (карбокатионы: протонированные димер антрацена  $(An)_2H^+$  и формальдегид  $CH_2OH^+$ , адамантовый катион  $Ad^+$ , а также  $Hg(HSO_4)^+$ ,

$E_6 - E_5 < 0$  для С-электрофилов. ( $NO_2^+$ ,  $Pd(HSO_4)^+$ ,  $SO_3H^+$ ,  $OH^+$ ,  $VO_2^+$ ).

Величины ( $E_6 - E_5$ ) определены из температурной зависимости эффекта (5/6) – отношения констант скорости  $c$ - $C_5H_{10}$  и  $c$ - $C_6H_{12}$  в расчете на одну связь С–Н.

Ниже сопоставлены субстратные селективности (относительные константы скорости  $k_{RH}/k_{R_2H}$ ), позволяющие оценить соотношения активностей: а) третичной ( $3^0$ ) связи С–Н в изобутане и вторичной ( $2^0$ )<sub>c</sub> в циклогексане ( $k_{i-C_4H_{10}}/k_{c-C_6H_{12}}$ , в случае  $OH^+$   $k_{i-C_5H_{12}}/k_{c-C_6H_{12}}$ ); б) третичной ( $3^0$ ) связи С–Н в изопентане и ( $2^0$ ) в *n*-пентане ( $k_{i-C_5H_{12}}/k_{n-C_5H_{12}}$ ), в реакциях с Н- и С-электрофилами, в том числе и с изученным в данной работе диоксокатионом ванадия(V) –  $VO_2^+$

Н-электрофилы, t, °C	карбокатионы			$Hg(HSO_4)^+$ , 90
	$(An)_2H^+$ , 90	$CH_2OH^+$ , 25	$Ad^+$ , 70	
$k_{i-C_4H_{10}}/k_{c-C_6H_{12}}$	34	24	240	22
$k_{i-C_5H_{12}}/k_{n-C_5H_{12}}$	104	333	6111	100

С-электрофилы, t, °C	$NO_2^+$ , 40	$Pd(HSO_4)^+$ , 90	$SO_3H^+$ , 90	$OH^+$ , 25	$VO_2^+$ , 40
$k_{i-C_4H_{10}}/k_{c-C_6H_{12}}$	0,4	0,5	50	1,4	0,9
$k_{i-C_5H_{12}}/k_{n-C_5H_{12}}$	9,6	8,8	82	2,6	≤ 10

Хотя сравнение селективностей, измеренных при разных температурах, не вполне корректно, однако соотношения  $3^0:(2^0)_c$  и  $3^0:2^0$  принципиально не изменятся в интервале от 25 до 90 °C. Н-электрофилы значительно селективнее С-электрофилов. Обращает на себя внимание то, что измеренная в растворах 99 %-ной серной кислоты величина  $E_6 - E_5 < 0$  позволила отнести предполагаемую активную частицу  $SO_3H^+$  к группе С-электрофилов. При этом величины  $3^0:(2^0)_c$  и  $3^0:2^0$ , полученные в растворах 97,7 %  $H_2SO_4$ , ближе к характеристикам селективности для Н-электрофилов.

Отметим, что субстратные селективности ( $k_{RH}/k_{i-C_5H_{12}}$ ), измеренные в 93 %  $H_2SO_4$  при 40°C в реакциях RH с двумя С-электрофилами:  $VO_2^+$  и нитроний катионом  $NO_2^+$  (ранние данные Е.С. Рудакова, А.И. Луцька) практически совпадают в ряду 2-метилгексан (1,1; 1,3), 3-метилгептан (2,5; 2,5), 2,3-диметилбутан (3,9; 3,0), 2,2,4-триметилпентан (0,11; 0,32).

**ПОЛЯРОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИИ  
ВОССТАНОВЛЕНИЯ КИСЛОРОДА ДО ПЕРОКСИДА ВОДОРОДА  
В ПРИСУТСТВИИ ФЕНОЛЬНЫХ КИСЛОТ**

*Мусяенко Е.В.*, Белый А.В., Белая Н.И.

Донецкий национальный университет

belyj@donnu.edu.ua

Реакция катодного восстановления кислорода (ЭВ  $O_2$ ) на ртутных электродах в апротонных и водных средах применяется как модельная система для изучения реакционной способности веществ-антиоксидантов, максимально приближающаяся к биологическим объектам. Однако применение процесса электровосстановления кислорода как правило ограничивается определением суммарной антиокислительной активности веществ без детального изучения кинетических параметров отдельных взятых реакций.

Целью настоящей работы является исследование реакции электрохимического восстановления кислорода до пероксида водорода в присутствии гидроксibenзойных кислот и их производных в водных средах с рН близкой к физиологической.

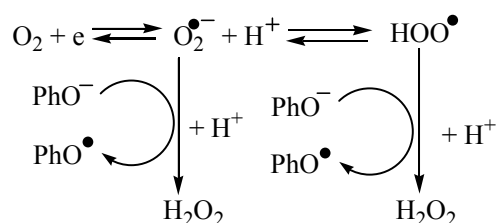
Экспериментальные исследования проводили на полярографе ПУ-1, в постоянно-токовом и дифференциальном режимах при температуре 298К. Рабочим электродом служил ртутный капаящий электрод (РКЭ), электродом сравнения – донная ртуть. В качестве фонового электролита использовали фосфатный буфер с рН=7,3 – 7,4. Расчет констант диссоциации исследуемых фенольных соединений и распределение их ионных форм в зависимости от рН среды проводили методом QSPR в программном пакете Marvin 5.9.1. фирмы ChemAxon. УФ – спектры растворов фенольных кислот и их производных снимали в фосфатном буфере в диапазоне рН от 5,4 до 7,4.

Изучена кинетика реакции свободнорадикальных интермедиатов восстановления кислорода с гидроксibenзойными кислотами и их эфирами на РКЭ в условиях близких к физиологическим (рН = 7,4 и Т = 298 ± 2 К).

По характерным признакам доказано, что ЭВ  $O_2$  в присутствии фенольных кислот и их эфиров протекает как электродный процесс с последующей лимитирующей химической реакцией.

Наблюдается симбатная зависимость от рН среды как для концентрации феноля-ионов, так и для величины относительного изменения тока ЭВ  $O_2$  ( $i_d/i$ ).

Показано, что последующая химическая реакция представляет собой взаимодействие между разными формами супероксид анион-радикала и фенолят-ионом соответствующей кислоты.



Установлено, что моногидроксibenзойные кислоты обладают низкими константами скорости (k) в реакции с кислородными радикалами. С ростом числа ОН-групп в молекуле кислоты величина k закономерно растет. Наибольшую антирадикальную активность проявили дигидроксibenзойные кислоты.

Полученные результаты в дальнейшем будут способствовать развитию представлений о процессе ЭВ  $O_2$  как кинетической модели для исследования реакционной способности веществ при взаимодействии с активными формами кислорода.

## ТЕТРАЕТИЛАМОНІЙ БРОМІД ЯК КАТАЛІЗАТОР РЕАКЦІЇ ЕПІХЛОРГІДРИНУ З 4-NO<sub>2</sub>-ФЕНОЛОМ

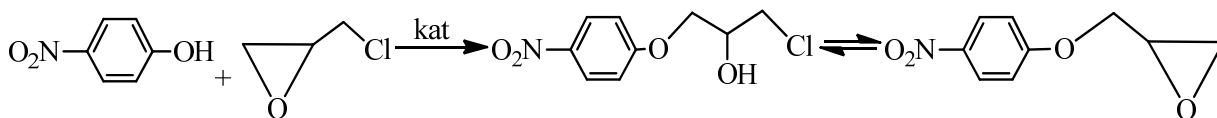
*Підгора М.К., Малиш О.В., Швед О.М.*

Донецький національний університет

[marina260591@mail.ru](mailto:marina260591@mail.ru)

Епоксидні смоли - один з найпоширеніших класів органічних сполук, який застосовується в різноманітних галузях промисловості. Полімери, добуті на основі епоксидних сполук, мають велику реакційну здатність, тому їх використовують для виготовлення великого спектру виробів таких як: клеїв, композиційних матеріалів, зв'язуючих паст, консервуючих засобів, в стоматології при пломбуванні та як герметики для біологічних контейнерів.

Реакція, яка лежить в основі утворення мономерів для синтезу поліепоксидів з заданим комплексом властивостей, є взаємодія *p*-NO<sub>2</sub>-фенолу з 1-хлор-2,3-епоксипропаном (епіхлоргідрин, ЕХГ) з подальшим дегідрохлоруванням хлоргідринового ефіру.



Реакція каталітичного ацидолізу епіхлоргідрину крім практичного значення використовується як модельна реакція для вивчення механізму нуклеофільного розкриття оксиранового циклу фенолами. Не дивлячись на значну кількість робіт по дослідженню реакції  $\alpha$ -окисей з фенолами, кінетичні закономірності цієї реакції вивчено недостатньо. Залишаються відкритими питання, що пов'язані з порядками реакції за вихідними реагентами, впливом природи каталізатора, температури на швидкість фенолізу епіхлоргідрину.

Метою даної роботи є вивчення вмісту галогенід-аніонів при перебігу реакції ЕХГ з фенолами. Об'єктами дослідження обрано *p*-NO<sub>2</sub>-фенол, в якості каталізаторів – тетраетиламоній бромід. Дослідження проводили в надлишку ЕХГ, що є одночасно і субстратом, і розчинником при температурах 30÷60<sup>0</sup>С. Концентрація каталізатору 0,050 моль/л. Контроль за ходом процесу здійснювався рН-потенціометрично та аргентометрично.

На основі дослідження кінетики реакції фенолів з епіхлоргідрином в присутності тетраетиламоній броміду встановлено нульовий порядок реакції за нуклеофільним реагентом та перший порядок реакції за каталізатором. Оцінено каталітичну активність тетраетиламоній броміду. Виміряно концентрацію галогенід-йонів упродовж реакції: на початку реакції вона різко падає, а через деякий час кількість галогенід - йонів збільшується. Розраховано активаційні параметри реакції.

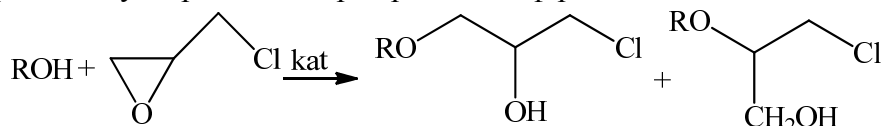
**ВПЛИВ ТЕМПЕРАТУРИ ТА СТРУКТУРИ АРОМАТИЧНИХ КИСЛОТНИХ  
РЕАГЕНТІВ НА РЕАКЦІЇ НУКЛЕОФІЛЬНОГО РОЗКРИТТЯ  
ОКСИРАНОВОГО ЦИКЛУ В ПРИСУТНОСТІ ОСНОВ**

*Рожко Є.Р., Синельникова М.А., Беспалько Ю.М., Швед О.М.*

Донецький національний університет

[org-chem.dep@donnu.edu.ua](mailto:org-chem.dep@donnu.edu.ua)

Гліцидилові ефіри широко використовуються в синтезі фармацевтичних препаратів, в лакофарбовій промисловості, при отриманні пластичних матеріалів, антикорозійних сумішей, клеїв, герметиків. Реакція епіхлоргідрину з нуклеофільними реагентами протікає з утворенням хлоргідринних ефірів за схемою:



Реакція нуклеофільного заміщення широко освічена у літературі однак, проблема впливу температури та структури нуклеофіла в реакціях розкриття оксиранового циклу, зокрема, ароматичними монокарбоновими кислотами та фенолами, вивчена недостатньо.

Метою даної роботи є вивчення впливу структури нуклеофіла та температурного фактора на швидкість феноліту та ацидолізу епіхлоргідрину нуклеофільними реагентами в присутності органічних основ – триалкіламінів та галогенідів тетраалкіламонію.

Об'єктами дослідження обрані серії орто- та метазаміщених бензойних кислот та заміщених фенолів і бісфенолів. ЕХГ одночасно є розчинником і субстратом. Каталіз здійснювався третинними амінами та четвертинними амонійовими солями, концентрація яких варіювалась в межах 0,001÷0,005 моль/л. Експериментальні дослідження проводили в інтервалі температур 30÷100<sup>0</sup>С. Концентрація нуклеофіла складає 0,100÷0,500 моль/л. Контроль за ходом процесу здійснювався потенціометричним кислотно-основним титруванням нуклеофільного реагента. Очистка вихідних речовин проводилась згідно стандартних методик.

Одержані результати оброблені за рівняннями Арреніуса, Ейрінга, багатопараметрової кореляції. Аналіз розрахованих активаційних параметрів показує, що енергія Гіббса процесу активації не залежить від структури кислотного реагента для серії бензойних кислот та має тенденцію до підвищення зі зростанням кислотних властивостей фенолів. Доведено, що в реакційних серіях за участю фенолів, які мають різний порядок реакції за реагентом, доречно використовувати для кінетичних розрахунків параметр  $t_{1/2}$  (час напівперетворення). Оцінений перехресний вплив (компенсаційний ефект) структури кислотного реагенту та температури на швидкість ацидоліза та феноліза епіхлоргідрину. Знайдені ізопараметричні точки для реакції епіхлоргідрину з бензойними кислотами в присутності триалкіламінів.

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ОКИСЛЕНИЯ ЗАМЕЩЕННЫХ ГИДРОХИНОНОВ ЛАККАЗОЙ *TRAMETES VERSICOLOR*

*Рудковская Ю.С., Цяпало А.С., Каниболоцкая Л.В., Шендрик А.Н.*

Донецкий национальный университет

[yulija.rudkowskaja@yandex.ua](mailto:yulija.rudkowskaja@yandex.ua)

Лакказа (п-дифенол: кислород оксидоредуктаза, К.Ф. 1.10.3.2) – фермент с широкой субстратной специфичностью и высокой удельной активностью, занимает особое место в промышленных биокаталитических процессах (в частности, целлюлозо-бумажной, текстильной, пищевой, косметической, фармацевтической промышленности, для биodeградации ксенобиотиков). Субстратами лакказы являются органические ароматические соединения (фенолы, бензиловые спирты, лигнины и др.)

Цель работы – определение кинетических параметров реакции окисления замещенных гидрохинонов в присутствии лакказы, исследование влияния этанола на активность фермента.

Объекты исследования: гидрохинон, метилгидрохинон, триметилгидрохинон, хлор- и дихлоргидрохинон, бромгидрохинон. Данные исследования проводили с применением лакказы из *Trametes versicolor*. Лакказное окисление субстратов осуществляли в цитратной буферной системе (рН 4.5) при атмосферном давлении,  $T=308$  К. Метод исследования кинетики реакции – *UV-Vis* - спектроскопия.

Показано, что замещенные гидрохиноны эффективно окисляются в присутствии лакказы. Кинетические параметры ферментативного окисления полифенолов  $K_m$  и  $V_{max}$  определены в двойных обратных координатах Лайнуивера – Берка. Установлено, что скорость окисления галогензамещенных гидрохинонов меньше, чем у гидрохинонов с алкильными заместителями. Введение этилового спирта в реакционную смесь приводит к снижению начальной скорости окисления гидрохинона, а, следовательно,  $K_m$  и  $V_{max}$  (рис.).

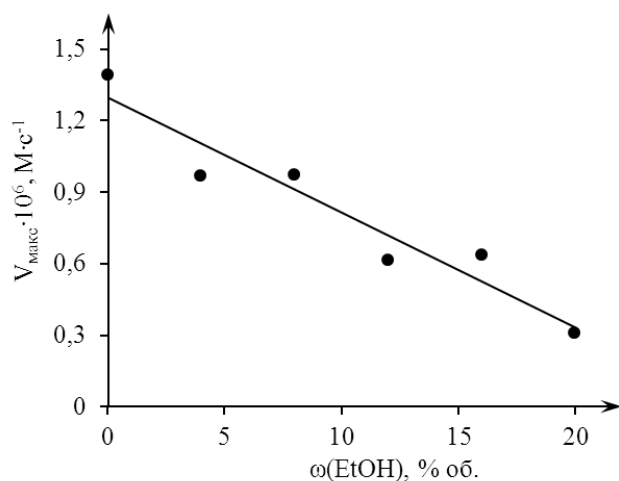


Рис. Зависимость максимальной скорости реакции окисления гидрохинона молекулярным кислородом в присутствии лакказы от содержания этанола.  $C_{\text{Lac}} = 4$  мг/л; цитратная буферная система, рН 4.5;  $T = 308$  К.

При содержании спирта в системе свыше 25 % об. наблюдается резкое увеличение оптической плотности раствора, что может быть связано с частичной коагуляцией фермента.

## ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОСВЯЗИ СТРУКТУРА – РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ В РЯДУ ФЛАВОНОЛОВ

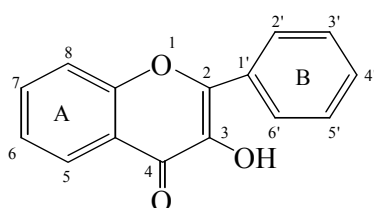
*Симонова Е.Н.,* Белая Н.И., Белый А.В., Мирошниченко И.В.

Донецкий национальный университет

bazykina@gmail.com

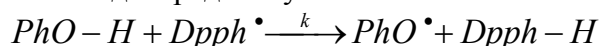
Флавоноиды являются самой многочисленной группой природных фенолов, обладающей широким спектром биологического действия. Наиболее важными свойствами флавоноидов являются антиокислительная и капилляроукрепляющая активность. Антиокислительная активность флавоноидов обусловлена их способностью взаимодействовать с металлами переменной валентности, а также дезактивировать свободные радикалы (антирадикальная активность). При этом наиболее устойчивыми и эффективными антиоксидантами являются более окисленные формы флавоноидов, такие как флаванолы, флавоны и флавонолы.

Целью данной работы – изучить взаимосвязь структура – реакция флавонолов в реакции со свободным стабильным радикалом 2,2'-дифенил-1-пикрилгидразилом (ДФПГ) в диметилсульфоксиде.



Кинетику реакции исследовали фотоколориметрическим методом при температуре  $293 \pm 2$  К. Расчет энергий гомолитического разрыва О-Н связей в молекулах флавонолов проводили квантовохимическим полуэмпирическим методом AM1 в приближении неограниченного метода Хартри-Фока в программном пакете МОРАС-2009.

В апротонном растворителе, где практически подавлены процессы диссоциации, реакция взаимодействия флавонолов с ДФПГ протекает по механизму передачи атома водорода от молекулы флавоноида к радикалу:



Определен второй общий порядок реакции и первый псевдопорядок как по флавонолу, так и по ДФПГ.

Установлено, что наиболее высокую константу скорости исследуемой реакции ( $k$ ) имеют флавонолы с двумя ОН-группами в кольце В. Существенное влияние при этом на антирадикальную активность оказывает взаимное расположение этих групп. Наиболее эффективно мета-положение 2',4'-ОН групп (морин), где вторая гидроксигруппа выполняет роль электронодонорного заместителя. Орто-расположение у кверцетина (3',4'-ОН) приводит к снижению величины  $k$ , по-видимому, за счет образования внутримолекулярных водородных связей, дезактивирующих одну из функциональных групп.

Наличие метоксизаместителя у изорамнетина (3'-ОСН<sub>3</sub>,4'-ОН) в о-положении к гидроксигруппе в кольце В приводит к падению величины  $k$  и росту прочности О-Н связи по сравнению с кверцетином.

Замещение гидроксигруппы в положении 3 на дисахарид рутинозу приводит к росту реакционной способности гликозида – рутина по сравнению с его агликоном – кверцетином, что может быть связано с нивелированием действия группы С=О пиринового цикла за счет углеводной части на кольцо В. Это подтверждается снижением прочности связи 4'-ОН группы у рутина по сравнению кверцетином.

Замена пиринового кольца на менее стабильный пирановый цикл в составе молекулы флаванола катехина существенно снижает антирадикальную активность вещества в реакции с ДФПГ, что может быть обусловлено реакциями непродуктивного расходования катехина как весьма лабильного соединения, склонного к процессам окисления под действием света и кислорода воздуха.

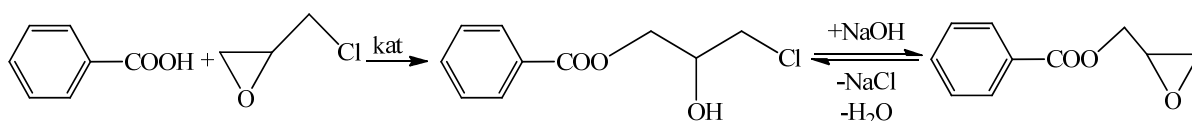
## ТРИБЕНЗИЛАМІН ЯК КАТАЛІЗАТОР РЕАКЦІЇ ЕПІХЛОРГІДРИНУ З БЕНЗОЙНОЮ КИСЛОТОЮ

*Слотіна Ю.О., Сінельникова М.А., Швед О.М.*

Донецький національний університет

[juliya\\_zzzz@mail.ru](mailto:juliya_zzzz@mail.ru)

Сполуки на основі гліцидилових ефірів карбонових кислот мають широке практичне застосування, зокрема в синтезі фармацевтичних препаратів, в лакофарбовій промисловості, при отриманні пластичних матеріалів, антикорозійних композицій, клеїв, герметиків. Утворення гліцидилових ефірів ароматичних карбонових кислот протікає в дві стадії:



Особливості протікання реакції розкриття оксиранового циклу карбоновими кислотами широко обговорюються в літературі. Однак, питання щодо впливу природи та структури каталізатора на швидкість утворення хлоргідринового ефіру залишаються дискусійними.

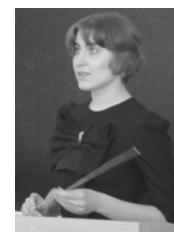
Метою даної роботи є вивчення впливу температури, природи та концентрації стерично розгалуженого каталізатору- трибензиламіну - на швидкість реакції епіхлоргідрину з бензойною кислотою.

Об'єктами дослідження обрано бензойну кислоту, епіхлоргідрин, який виступає в якості розчинника і субстрата одночасно. Концентрація трибензиламіну варіювалась в межах  $0,00375 \div 0,0100$  моль/л. Експериментальні дослідження проводили в температурному інтервалі  $60 \div 80^\circ\text{C}$ . Вихідні речовини очищали згідно стандартних методик, їх температури топлення та кипіння відповідають літературним даним. Кінетичний контроль за перебігом реакції здійснювали потенціометричним кислотно-основним титруванням бензойної кислоти.

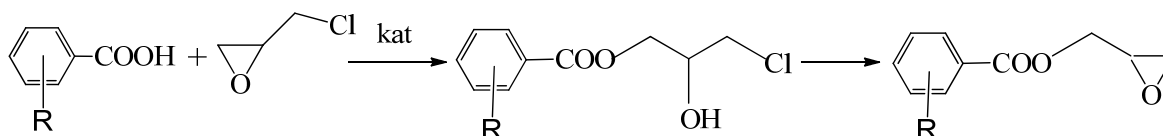
Одержані експериментальні дані були оброблені за кінетичними рівняннями для розрахунку констант швидкості псевдонульового порядку. Встановлено нульовий порядок реакції за кислотним реагентом та перший порядок реакції за каталізатором. Запропоновано кінетичне рівняння реакції бензойної кислоти з епіхлоргідрином в присутності трибензиламіну. Розраховані спостережувані константи швидкості реакції, константа швидкості некаталітичного та каталітичного потоків реакції. Показано, що каталітична активність трибензиламіну на 2 порядки нижча в порівнянні з таким стерично затрудненим аміном як N,N-диметиланілін. Оцінені енергетичні параметри (енергія, ентальпія та ентропія активації) реакції епіхлоргідрину з бензойною кислотою при каталізі трибензиламіном. Проведено співставлення активаційних параметрів реакції в присутності трибензиламіну з даними, що отримані для інших третинних амінів, які є співрозмірними. Встановлено вплив стеричних чинників на швидкість реакції ацидолізу епіхлоргідрину в присутності органічних основ..

**ВИВЧЕННЯ КАТАЛІТИЧНОЇ ДІЇ БЕНЗОАТІВ  
ТЕТРААЛКІЛАМОНІЮ НА АЦИДОЛІЗ ЕПІХЛОРГІДРИНУ  
БЕНЗОЙНИМИ КИСЛОТАМИ**

*Степанова Д.С., Сінельникова М.А., Швед О.М*  
Донецький національний університет  
[s.dinusya@gmail.com](mailto:s.dinusya@gmail.com)



Полімери на основі епоксидних сполук мають високі експлуатаційні властивості, що дозволяє широко використовувати їх у медицині, промисловості, авто- і авіабудуванні у якості пластифікаторів, герметиків, гідроізоляторів, лікарських препаратів, клеїв. Один зі шляхів отримання епоксидних мономерів – реакція епіхлоргідрину з карбоновими кислотами з подальшим дегідрохлоруванням хлоргідринового естеру:



Реакція каталітичного ацидолізу епіхлоргідрину крім практичного значення використовується як модельна реакція для вивчення механізму нуклеофільного розкриття оксиранового циклу О-кислотами, зокрема в біохімічних процесах. Аналіз літературних джерел показує, що не дивлячись на зростаючу кількість робіт в цьому напрямі, одержані кінетичні закономірності реакції  $\alpha$ -окисей з карбоновими кислотами не дають однозначної відповіді на причину спостережуваних особливостей перебігу реакції. Залишаються відкритими питання відносно порядків реакції, впливу структури реагентів та каталізаторів на швидкість ацидолізу епіхлоргідрину.

Метою даної роботи є дослідження впливу температури, структури R-заміщеної бензойної кислоти та карбоксилат-аніона в тетраалкіламонієвій солі на швидкість ацидолізу епіхлоргідрину.

Об'єктами дослідження обрано серію бензойних кислот  $RC_6H_4COOH$  (H, 2- $NO_2$ , 3- $NO_2$ , 2- $CH_3$ , 3- $CH_3$ ). В якості каталізатору обрано m- $NO_2^-$ , o- $NO_2^-$  та бензоат тетраетиламонію.

Кінетичні дослідження реакції ацидолізу епіхлоргідрину проводили при концентрації кислот 0,300 моль/л в температурному інтервалі 30÷60°C у надлишку епіхлоргідрину, що є одночасно і субстратом, і розчинником. Хід процесу контролювали по зміні концентрації бензойних кислот методом потенціометричного кислотно-основного титрування. Очистка вихідних речовин проводилась відповідно до стандартних методик.

В результаті кінетичних досліджень реакції ацидолізу епіхлоргідрину встановлено нульовий порядок реакції за бензойними кислотами. Показано, що при зміні природи аніона в бензоаті тетраалкіламонію каталітичні константи швидкості змінюються несуттєво в рамках одного нуклеофільного реагента. Реакція каталітичного ацидолізу епіхлоргідрину описується кінетичним рівнянням другого порядку. Розраховані активаційні параметри реакції. Показано, що для серії бензойних кислот, каталізованих бензоатом тетраетиламонію, значення енергії та ентальпії активації є співрозмірними. Однак, значення енергії активації ацидолізу епіхлоргідрину заміщеними бензойними кислотами при каталізі бензоатом є дещо нижчими в порівнянні з енергіями активації при каталізі бромідом тетраетиламонію, що свідчить про більш сприятливі умови перебігу процесу. Більш чутливою до зміни природи аніона каталізатора виявилася ентропія активації. Запропонована схема механізму ацидолізу епіхлоргідрину заміщеними бензойними кислотами в присутності бензоатів тетраалкіламонію.

## ВЛИЯНИЕ ДОБАВОК ПРИРОДНОГО СЫРЬЯ НА ОКИСЛЕНИЕ РАСТИТЕЛЬНЫХ МАСЕЛ

*Сторчак Д.А., Книга О.П., Николаевский А.Н.*

Донецкий национальный университет

[antioxidant104@yandex.ua](mailto:antioxidant104@yandex.ua)

В настоящее время возрастает интерес к поиску нетрадиционных источников биологически ценных компонентов, которые способны предупреждать свободорадикальное окисление биологических структур – замедлять развитие патологических изменений организма и повышать качество пищевых продуктов. Наиболее перспективными источниками антиоксидантов (АО) считаются растительные объекты. Природные АО обладают комплексным и одновременно мягким воздействием на организм и низкой токсичностью в отличие от синтетических.

Цель работы – изучение антиоксидантной активности природного сырья в процессе автоокисления растительных масел. Объекты исследования: порошки плодов и корней шиповника, листьев грецкого ореха и эвкалипта, плодов софоры, цветов сальвии, трав - полыни, пустырника, а также фармакопейные настойки софоры, эвкалипта, полыни и пустырника.

Оценку антиоксидантной активности (АОА) добавок проводили в условиях автоокисления масел (353К); окисления дисперсии фосфатидилхолина в фосфатном буфере в присутствии ионов двухвалентного железа и хемилюминесцентным методом при разложении пероксида водорода. Кинетику процессов окисления контролировали, соответственно, по накоплению пероксидных чисел (йодометрически) и по поглощению кислорода (газовольюмометрически), эффективность действия АО оценивали по отношению периодов индукции в присутствии и без добавок –  $\tau/\tau_0$ .

Определено, что фармакопейные настойки влияют на интенсивность хемилюминесцентного свечения в системе  $H_2O_2 - Fe^{2+}$ , то есть, проявляют антирадикальную активность в водной среде по отношению к гидроксирадикалам. В качестве параметра АОА использовали  $C_{50\%}$  – концентрацию добавок, которая снижает интенсивность хемилюминесценции в два раза.

Полученные экспериментальные данные представлены в таблице.

Таблица – Антиоксидантная активность растительного сырья  
в различных модельных системах

АО	Автоокисление льняного масла, $\tau/\tau_0$		$H_2O_2 - Fe^{2+}$ , настойки, $C_{50\%}$ , об. %
	Порошки	Настойки	
Пустырник	1.0	2.3	6.0
Полынь	1.2	2.0	0.8
Эвкалипт	1.7	1.7	0.9
Софора	2.0	1.8	2.4

Установлено, что и порошки, и аптечные настойки проявляют антиоксидантную и антирадикальную активность, эффективность зависит от условий процесса. Наиболее высокое значение параметров АОА у плодов софоры и у пустырника (кроме порошка), что, возможно, связано с высоким содержанием антиоксидантов (кверцетина, рутина, фенолкарбоновых кислот и др.) в этом растительном сырье.

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛОВ ПОЛУВОЛН БРОМЗАМЕЩЕННЫХ ГИДРОКИНОНОВ МЕТОДОМ ЦИКЛИЧЕСКОЙ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИИ**

*Цяпало А.С., Калиниченко Е.А., Каниболоцкая Л.В., Шендрик А.Н.*

Донецкий национальный университет

Alex\_Tsyapalo@mail.ru

Галогензамещенные фенольные соединения являются известными экотоксикантами. В водной среде фенолы могут окисляться растворенным кислородом и принимать участие в процессах зарождения радикалов. Вопрос о механизме окислительных трансформаций фенолов в водных средах остается до настоящего времени дискуссионным. Критерием возможности переноса электронов с полифенола на кислород может служить значение электрохимических потенциалов процесса переноса электронов. В литературе отсутствуют экспериментальные значения редокс-потенциалов, а также  $pK_a$  для многих полифенольных соединений, таких как алкил- и галогенпроизводные гидрохинонов. Метод циклической вольтамперометрии позволяет определить стандартные потенциалы полувольт на основании зависимости потенциала от значения pH среды.

Цель данной работы – исследование реакции электрохимического окисления фенольных соединений в водной среде методом циклической вольтамперометрии.

Объекты исследования: 2-бромгидрохинона (БрГХ) и 2,5-дибромгидрохинона (ДБрГХ). Метод исследования – постоянно-токовая цикловольтамперометрия. Условия эксперимента – фосфатная буферная система (pH 6.4÷9.2, 298 К); диапазон скорости развертки потенциала ( $V$ ) 3÷200 мВ/с. Эксперимент выполняли в трехэлектродной ячейке. В качестве рабочего электрода использовали углеситаловый электрод, вспомогательным электродом служил платиновый электрод, а электродом сравнения – хлорсеребряный. Фоновый электролит – 0,1 М фосфатный буфер. Растворы полифенолов содержали 4% этилового спирта.

Показано, что на циклических вольтамперограммах имеются четкие пики волн анодного окисления и катодного восстановления. По полученной зависимости  $E_{ox}$  и  $E_{red}$  от  $\omega^{-1/2}$  определили значения  $E'_{1/2}$  при различных значениях pH. Установлено, что существует хорошо выраженная линейная зависимость  $E'_{1/2}$  от pH (рис.1).

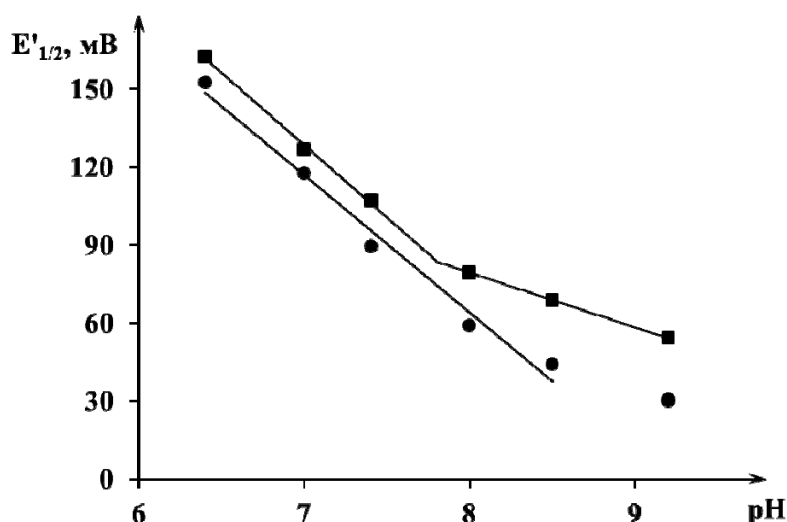


Рис.1 Зависимость потенциала полувольты от pH среды для БрГХ(●) и ДБрГХ(■). Фосфатная буферная система, 298 К

Для ДБрГХ наблюдается точка перегиба при pH равном 7.8, что соответствует статистически рассчитанному в программном пакете ACD/Labs значению  $pK_a$ . Для БрГХ все значения  $E'_{1/2}$  в интервале pH 6.4÷8.5 также линейно зависят от значения pH. Исключением является точка 9.2, что свидетельствует о том, что  $pK_a$  БрГХ находится в интервале 8.5÷9.2.

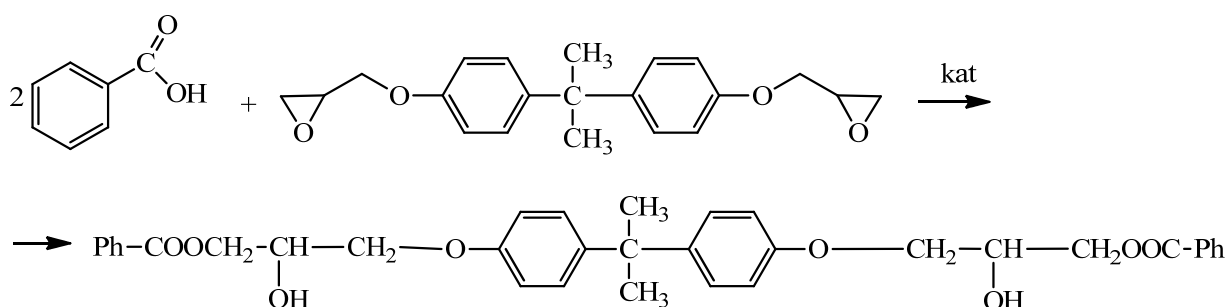
## КІНЕТИКА РЕАКЦІЇ ЕПОКСИДНОЇ СМОЛИ ЕД-20 З БЕНЗОЙНОЮ КИСЛОТОЮ В ПРИСУТНОСТІ БРОМІДУ ТЕТРАЕТИЛАМОНІЮ

*Чичирко М. А., Сінельникова М. А., Швед О.М.*

Донецький національний університет

[m.myosotis2592@gmail.com](mailto:m.myosotis2592@gmail.com)

Епоксидні смоли характеризуються високою механічною міцністю, хімічною стійкістю, підвищеними діелектричними властивостями, низькою усадкою, мають широке використання у різних галузях: медицині, будівництві, радіотехніці. Тому актуальним є створення високоякісних полімерів холодного затвердження з запрограмованим комплексом властивостей. Синтез мономерів епоксидних смол включає стадію утворення гліцидилгідринових ефірів карбонових кислот:



Метою даної роботи є вивчення впливу концентрації каталізатору та температури на процес кислотного затвердження епоксидної смоли ЕД-20.

Об'єктами дослідження обрано: епоксиданову смолу ЕД-20 на основі дигліцилового ефіру 2,2-біс-(4-оксіфеніл) пропану, затверджувач – бензойна кислота. Вихідні реагенти взяті у моль-еквівалентному співвідношенні 1:1. В якості каталізатору обрано тетраетиламоній бромід, концентрація якого варіювалась в межах 0,2÷0,05 моль/л. Хід процесу контролювали по зміні концентрації бензойної кислоти методом кислотно-основного титрування, та по зміні концентрації ЕД-20 потенціометричним аргентометричним титруванням.

На основі отриманих експериментальних даних для реакції епоксидної смоли ЕД-20 з бензойною кислотою в присутності броміду тетраетиламонія встановлено нульовий порядок реакції за кислотним реагентом до 60% конверсії кислоти та перший порядок реакції за каталізатором. Розраховані спостерігаємі константи швидкості, константи каталітичного та некаталітичного потоків реакції. Показано, що бромід тетраетиламонію є ефективним каталізатором затвердження епоксидної смоли ЕД-20 карбоновими кислотами. Проведено співставлення каталітичної активності даного каталізатору з комплексами амінів з трифторидом бора. Розраховані активаційні параметри реакції, значення яких є співрозмірними з іншими основними каталізаторами процесу кислотного затвердження епоксидної смоли ЕД-20.

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОНСТАНТ СКОРОСТЕЙ РЕАКЦИИ ТРИГИДРОКСИБЕНЗОЙНЫХ КИСЛОТ С DPPH<sup>•</sup> В ВОДЕ С ПРИМЕНЕНИЕМ МОДЕЛИ ЛИНЕЙНОЙ РЕГРЕССИИ

*Шацких В.М.*, Белая Н.И., Белый А.В.

Донецкий национальный университет  
bazykina@gmail.com

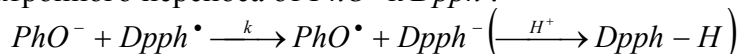
В последние десятилетия детально изучается роль фенольных кислот как антиоксидантов в модельных системах (in vitro) с участием свободных стабильных радикалов. Такая реакция исследуется преимущественно в неводных растворителях, что позволяет увеличить стабильность образующихся продуктов, предотвратить реакции диссоциации, а значит существенно упростить механизм исследуемого процесса. С другой стороны, такие преимущества значительно отдалают модельные реакции стабильных радикалов от реальных водных систем, а значит аппроксимация полученных данных на биологические объекты будет весьма проблематичной. В связи с этим не прекращаются попытки усовершенствовать данные методы, изменяя условия эксперимента – pH среды, растворитель и т. д.

Целью данной работы является изучение кинетики реакции тригидроксибензойных кислот и их производных в реакции с дифенилпикрилгидразилом (*Dpph*<sup>•</sup>) в водной среде с применением модели линейной регрессии.

Кинетику реакции *Dpph*<sup>•</sup> с фенолкарбоновыми кислотами изучали в смесях вода - диметилсульфоксид в разных соотношениях методом фотоколориметрии и УФ-спектроскопии при температуре 293±2 К. Расчет реакционной способности фенолов с *Dpph*<sup>•</sup> в воде (*k*) проводили с применением модели линейной регрессии в системе Statistica Demo 6.0 с активным модулем Multiple Regression.

Изучена кинетика реакции тригидроксибензойных кислот и их эфиров с радикалом *Dpph*<sup>•</sup> в водно-апротонных смесях с разным соотношением растворителей. Квантовохимическим и QSPR методами определены OH-группы, участвующие в образовании фенолят-ионов, наиболее активных в реакции с *Dpph*<sup>•</sup>.

Установлена линейная зависимость величины *k* от разности энергий высшей занятой молекулярной орбитали ( $E_{ВЗМО}$ ) фенолятов и низшей вакантной орбитали ( $E_{НВМО}$ ) радикала ( $E_{ВЗМО \rightarrow НВМО}$ ), что свидетельствует о реализации в водных средах механизма одноэлектронного переноса от  $PhO^-$  к *Dpph*<sup>•</sup>:



Поскольку полученные экспериментальные данные в смешанных растворителях не линеаризуются в координатах уравнения Кирквуда, учитывающего неспецифическую сольватацию растворителем, то «ускоряющая» функция воды обусловлена не столько изменением полярности среды, сколько влиянием на процесс за счет специфической сольватации реагирующих частиц. При переходе от диметилсульфоксида к воде увеличивается степень сольватации фенолят-ионов, что должно способствовать усилению процесса диссоциации фенолов и росту их ионизированных форм. Это подтверждается УФ-спектральными исследованиями фенольных кислот в водно-апротонных смесях.

Предложен метод определения констант скоростей реакции фенольных кислот и их эфиров с *Dpph*<sup>•</sup> в воде с применением модели линейной регрессии. Полученные данные позволяют прогнозировать и адекватно оценивать реакционную способность природных антиоксидантов в биологических системах и пищевых продуктах на водно-жировой основе.

## СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ АНТИРАДИКАЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ ГИДРОКСИПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗОЙНОЙ И КОРИЧНОЙ КИСЛОТ

*Яшуніна Ю.О.*, Белая Н.И., Белый А.В.

Донецкий национальный университет

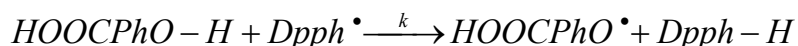
bazykina@gmail.com

Гидроксипроизводные бензойной и коричной кислот ( $HCOOPhO-H$ ) принадлежат к группе природных фенолов, которые постоянно поступают в организм человека в составе пищевых продуктов на растительной основе. К этим соединениям можно отнести различные оксибензойные и оксикоричные кислоты, которые зарекомендовали себя как эффективные антиоксиданты. При этом между этими группами кислот часто не проводят четких разграничений, объединяя их под одним термином «фенольные кислоты». Однако, если говорить об их антирадикальной активности, которая во многом определяет их биологический спектр действия, то она существенно отличается. Это прежде всего обусловлено различиями в строении их молекул. Проведение сравнительного анализа взаимосвязи структура – реакционная способность для оксибензойных и оксикоричных кислот позволит выявить среди них наиболее эффективную группу антиоксидантов, а затем проводить целенаправленный поиск и подбор биологически активных добавок, а также пищевой продукции антиокислительного назначения.

Целью данной работы является сравнительный анализ антирадикальной активности оксикоричных и оксибензойных кислот в реакции с радикалом 2,2'-дифенил-1-пикрилгидразилом (ДФПГ) в апротонном растворителе – диметилсульфоксиде (ДМСО) в зависимости от структуры их молекул.

Исследования проводили фотоколориметрическим методом при температуре  $293 \pm 2K$  в интервале концентраций реагирующих веществ  $10^{-4} - 10^{-5}$  моль·л<sup>-1</sup>. Растворы исследуемых кислот смешивали в эквимольных концентрациях с раствором ДФПГ в ДМСО, затем измеряли оптическую плотность и через молярный коэффициент экстинкции ( $\epsilon = 1,4 \cdot 10^4$  л·моль<sup>-1</sup>·см<sup>-1</sup>) рассчитывали концентрацию радикала.

Определены стехиометрические и кинетические параметры реакции оксибензойных и оксикоричных кислот с ДФПГ в апротонном растворителе.



Установлен второй общий порядок реакции и первый псевдопорядок как по фенолу, так и по радикалу.

Среди гидроксипроизводных бензойной кислоты наибольшую реакционную способность ( $k$ ) проявили кислоты, у которых либо более одной активной функциональной ОН-группы, либо в составе молекулы есть электронодонорные заместители. К таким соединениям можно отнести 3,4-оксибензойную и 3-метокси-4-оксибензойную кислоты. Моногидроксibenзойные кислоты крайне медленно реагируют с радикалом ДФПГ независимо от расположения гидроксигруппы относительно электроноакцепторной карбоксильной группы.

Антирадикальная активность оксикоричных кислот значительно больше, чем у соответствующих оксибензойных кислот. Причина заключается в наличии винильного мостика в составе молекул оксипроизводных коричной кислоты, который отделяет карбоксильную группу от бензольного кольца, тем самым уменьшая ее влияние на активную фенольную ОН-группу. В общем, как и в случае оксибензойных кислот, наибольшая константа скорости в реакции с радикалом у 3,4-диоксикоричной кислоты. Наименее активны оксикоричные кислоты, в составе молекул которых одна гидроксигруппа без каких-либо электронодонорных заместителей.

## FIRST PRINCIPLES CALCULATIONS OF VOIDS IN FE (BCC)

Dmytro Kandaskalov, Claude Mijoule, Damien Connétable  
 CIRIMAT, Ecole Nationale d'Ingénieurs en Arts Chimiques et  
 Technologiques (ENSIACET), Toulouse, France  
[dmytro.kandaskalov@ensiacet.fr](mailto:dmytro.kandaskalov@ensiacet.fr)



The real crystalline material has never perfectly periodic crystals as different kind of defects is presented inside. These defects could be form in thermic equilibrium or while fabrication or treatment of the material. There are different types of defects such as vacancies, impurities, dislocations, grain boundaries, cavities etc. The defects have influence on physical (plasticity, diffusion etc.) and chemical (electron transfer, catalytic activity etc.) proprieties of material. These defects are mixed in a real material, which made experimental study more complicated. The theoretical simulations permit to study separately each kind of defects.

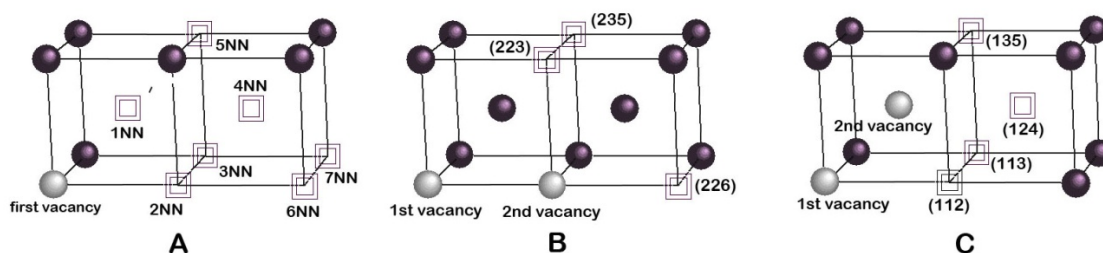


Figure 1. Configurations of divacancies(A) and trivacancies (B, C).

We present in this poster a first principles study of multi-vacancies ( $V_n$ ,  $n=1$ , until 15) in  $\alpha$ -Fe bulk and monovacancy on Fe(100) and Fe(110) surfaces by means of the density functional theory. Our calculations were performed using the Vienna *ab initio* simulation package VASP using projected-augmented wave (PAW) pseudopotentials, and Perdew and Wang 91 (PW 91) functional. Large super-cells (up to 250 atoms) were used to simulate multivacancies. The plane-wave energy cut-off was fixed to 400 eV and 4x4x4 Monkhorst-Pack meshes were used to sample the Brillouin zone for the bulk and 7x7x1 for surfaces.

In the case of the monovacancy, the formation energy and the diffusion coefficient are found in agreement with experimental and theoretical data of the literature. For divacancies, the second nearest neighboring (2NN) (see Figure 1-A) configuration is found to be the most stable configuration, more stable than isolated monovacancies. The first nearest neighboring (1NN) is slightly less stable than 2NN configuration. Others divacancy configurations (3NN-7NN) will permit to analyze the long range of interactions between vacancies. We will also present the diffusion and dissociation mechanism of the 2NN divacancy. The trivacancies results (see Fig. 1-B/C for the different configurations used) will confirm that compact structures are energetically, in most of cases, more stable than others structures.

Stability and configurations of larger cavities are then presented ( $V_n$ , where  $n=[4, 10]$  and  $n=[11, 15]$ ). In the first case we have shown that the most stables multivacancies is represented by the chain of perpendicular concatenation of the bivacancies 2NN. For  $n>11$ , the spherical vacancies became more stable than the chain of 2NN bivacancies

Our results also show that the cavity formation is thermodynamically favored processes. Results of vacancies on Fe(100) and Fe(110) surfaces will be presented also to see the interactions of a vacancy with the surface.

<sup>1</sup>H ЯМР ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ В СИСТЕМЕ ГИДРОПЕРОКСИД ТРЕТ-БУТИЛА – БРОМИД ТЕТРАЭТИЛАММОНИЯ

Берестнева Ю.В., Дороднев С.В., Ракша Е.В., Туровский Н.А.

Донецкий национальный университет

[N.Turovskij@donnu.edu.ua](mailto:N.Turovskij@donnu.edu.ua)

Целью данной работы является экспериментальное доказательство образования комплекса при взаимодействии гидропероксида трет-бутила с бромидом тетраэтиламмония методом <sup>1</sup>H ЯМР спектроскопии.

Для подтверждения образования комплекса гидропероксид трет-бутила – бромид тетраэтиламмония исследовали влияние Et<sub>4</sub>NBr на положение сигналов гидропероксида в спектре протонного магнитного резонанса при 295 К. В <sup>1</sup>H ЯМР спектре (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>C-O-OH протонам метильных групп соответствуют сигналы 1.22, 1.27 и 1.27 м.д., протону гидропероксидной группы соответствует величина химического сдвига 7.26 м.д. В этих условиях скорость распада (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>C-O-OH пренебрежимо мала. Изменение концентрации гидропероксида в пределах  $(8 \div 11) \cdot 10^{-3}$  моль·дм<sup>-3</sup> не приводит к изменению положения сигналов в спектре (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>C-O-OH (Рис. 1). Введение в систему эквивалентного количества Et<sub>4</sub>NBr

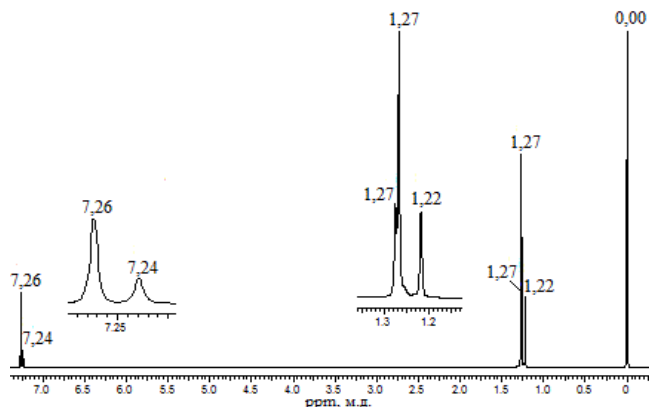


Рисунок 1

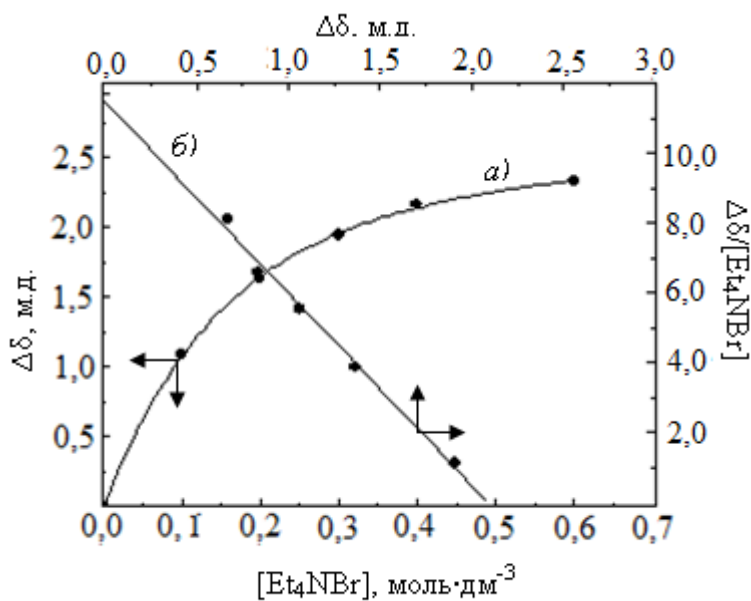


Рисунок 2

приводит к смещению сигнала протона гидропероксидной (-CO-OH) группы в сторону слабых полей без его заметного уширения. Характер изменения сигнала протона группы -CO-OH в присутствии избытка Et<sub>4</sub>NBr (Рис. 2 - а) указывает на образование в системе комплекса гидропероксид – Et<sub>4</sub>NBr и на выполнение условия быстрого обмена протонов свободной и связанной в комплекс -CO-OH группы гидропероксида. В условиях избытка Et<sub>4</sub>NBr и образования комплекса 1 : 1 для анализа полученной зависимости использовали уравнение Фостера – Файфа. Полученная нелинейная зависимость изменения величины

химического сдвига протона -CO-OH группы от концентрации Et<sub>4</sub>NBr (Рис. 2-а) линеаризуется в координатах Фостера – Файфа (Рис. 2-б).

Таким образом, методом <sup>1</sup>H ЯМР спектроскопии доказано образование комплекса между гидропероксидом трет-бутила и Et<sub>4</sub>NBr. Константа равновесия комплексообразования в исследуемой системе составляет  $K_C = (5.49 \pm 0.07)$  дм<sup>3</sup>·моль<sup>-1</sup> при 295 К.

## КВАНТОВЕ МОДЕЛЮВАННЯ СОРБЦІЇ ЛЕТЮЧИХ ГІДРИДІВ НА АКТИВОВАНОМУ ВУГІЛЛІ

*Коваль К.В.*, Безносик Ю.О.

Національний технічний університет «Київський політехнічний інститут»

e\_k\_a\_t\_e\_r\_i\_n\_a@mail.ru

В даній роботі детально проводиться квантово-хімічне моделювання процесу каталітичної сорбції летючих гідридів SiH<sub>4</sub>, NH<sub>3</sub>, PH<sub>3</sub>, AsH<sub>3</sub>, B<sub>2</sub>H<sub>6</sub> на активному вугіллі (включаючи різні модифікації кластерів активного вугілля). Для моделювання систем використовували кластерне наближення. В якості найпростішої моделі вугілля був запропонований графітоподібний кластер, але термований з одного боку хіноїдними групами. Для обліку впливу розчинника на протікання цих процесів використане супермолекулярне наближення, тобто коли на реагуючі молекули або активні центри модельної системи оточуються набором молекул води, положення яких оптимізується. Таким чином молекули розчинника підсліджують протікання хімічної реакції, а саме зміну просторової і електронної будови реакційних центрів, і відображають роль середовища в даному процесі. Для моделювання хімічних перетворень використане стандартне наближення координати хімічної реакції, яке базується на понятті гіперповерхні потенційної енергії, де кожній точці на такій багатомірній поверхні відповідає визначене взаємне розташування атомів. Потенційна поверхня молекули, яка складається з  $N$  атомів, визначається в просторі, розмірність якого дорівнює  $3N-6$ . Таку поверхню в принципі не можливо відобразити в трьохмірному просторі, тому для наглядного представлення багатомірної поверхні зазвичай використовують одно- або двовимірну проекції. Якщо система складається з 10 атомів, то для неї існує 24 ступені свободи. Якщо сканувати кожну координату і розраховувати 10 точок, то буде  $10^{24}$  квантово-хімічних обчислень. Але час розрахунку такої системи перевищує тривалість існування всесвіту. Тому, цікавлять лише точки екстремумів (мінімумів, оскільки система існує лише в точках мінімуму). Зручною формою представлення координати хімічної реакції є графік залежності теплоти утворення системи від узагальненої координати реакції, яка виражається в проекції на лінію руху точки, яка визначає взаємне розташування атомів в системі. У зв'язку з необхідністю розрахунку великої кількості різних модельних систем з наступним переходом до кластерів активного вугілля для пошуку моделей, які підходять використаний напівемпіричний метод *PM6*, реалізований в програмі *MOPAC*. Для більш точного обліку електронних ефектів використаний необмежений метод Хартрі-Фока як для синглетного так і для вищих мультиплетних станів.

Основним енергетичним параметром є теплота утворення, яку можна розрахувати квантово-хімічно :

$$\Delta H_f = E_{Elect} + E_{Nuc} - \sum E_{el}^A + \sum \Delta H_f^A,$$

де  $\Delta H_f$  - теплота утворення системи;  $E_{Elect}$  - загальна електронна енергія;  $E_{Nuc}$  - енергія відштовхування;  $\sum E_{el}^A$  - розрахована енергія утворення газоподібного атома;  $\sum \Delta H_f^A$  - експериментальні теплоти утворення атомів.

Проведені розрахунки методом *PM6* для молекул летючих гідридів (NH<sub>3</sub>, PH<sub>3</sub>, AsH<sub>3</sub>, B<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, SiH<sub>4</sub>). У роботі було проведено моделювання кластерів модифікованого активного вугілля в різних мультиплетних станах В результаті отримано заряди електронів, відстані між молекулами, енергії вищих зайятих молекулярних орбіталей та нижчих вакантних молекулярних орбіталей. По отриманим даним будується залежність енергій і проводиться аналіз результатів.

## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПРОИЗВОДНЫХ 3-ГИДРОКСИХРОМОНА С ДОДЕКАНТИОЛ-СТАБИЛИЗИРОВАННЫМИ НАНОЧАСТИЦАМИ ЗОЛОТА

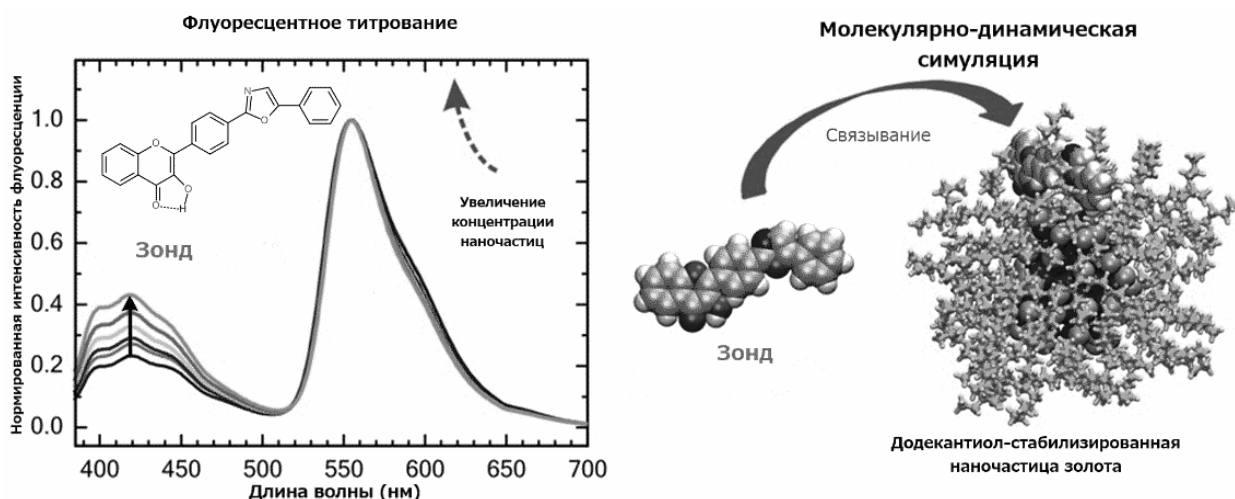
*Колодезний Д.Ю., Свечкарёв Д.А., Кириченко А.В., Дорошенко А.О.*

Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина

[kolodezny@gmail.com](mailto:kolodezny@gmail.com)

Понимание взаимодействия флуоресцентных красителей с монослойно-защищенными наночастицами золота чрезвычайно важно для создания новых флуоресцентных наноматериалов. Весьма многообещающими в данном контексте являются флуоресцентные красители на основе 3-гидроксихромонов (ЗГХ). В молекулах этих красителей при возбуждении происходит внутримолекулярный фотоперенос протона (ВМФПП), чувствительность которого к природе ближайшего микроокружения хорошо известна.

В данном исследовании были синтезированы наночастицы золота, стабилизированные додекантиольной оболочкой, средний диаметр которых составил приблизительно 1,4 нм. При титровании наночастицами раствора красителя - производных ЗГХ было обнаружено изменение соотношения интенсивностей полос вместо ожидаемого тушения флуоресценции, что позволяет предположить, что краситель связан с наночастицей нековалентно и не взаимодействует непосредственно с ее золотым ядром.



**Рисунок 1.** Результаты молекулярного моделирования связывания красителя наночастицей (справа) и флуоресцентного титрования красителя наночастицами (слева)

Дальнейшие исследования показали, что подобное изменение соотношения интенсивностей полос можно объяснить наличием в додекантиольной оболочке наночастицы молекул этанола, попадающих туда в процессе синтеза. Это предположение также подтверждается наличием пиков, соответствующих этанолу, в  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  ЯМР-спектрах наночастиц.

Для описания процесса переноса додекантиол-стабилизированной наночастицы золота из этанольной среды в толуольную, что соответствует эксперименту, было проведено полноатомное молекулярно-динамическое моделирование с использованием силового поля CHARMM27. В результате моделирования в стабилизирующей оболочке додекантиола показано наличие остаточного количества этанола, а также определено предпочтительное положение молекулы красителя в оболочке наночастицы.

**ГЕОЛОГІЧНА НА ГЕОТЕХНІЧНА СИСТЕМИ БАР'ЄРІВ  
ДЛЯ ПРИПОРХНЕВОГО СХОВИЩА РАВ***Колябіна Д.О., Безносик Ю.О.*

Національний технічний університет «Київський політехнічний інститут»

[koliabina@gmail.com](mailto:koliabina@gmail.com)

До радіоактивних відходів відносяться матеріальні об'єкти та субстанції, що не підлягають подальшому використанню, рівень радіонуклідів в яких або радіоактивне забруднення яких перевищує значення встановлені діючими нормами і правилами. За часом небезпечності для навколишнього середовища відходи поділяють на двоїснуючі та короткоіснуючі. Основними виробниками радіоактивних відходів в Україні є атомні електростанції, підприємства з видобування та переробки уранової руди, наукові центри, підприємства та організації, що використовують радіоактивні речовини або джерела іонізуючого випромінювання. Частка радіоактивних відходів, що утворилися внаслідок аварії на Чорнобильській АС сягає 95% всіх радіоактивних відходів в Україні. Поверхнєве (приповерхнєве) - сховище РАВ, що представляє собою споруду, розташовану на поверхні чи в приповерхневому шарі землі, спеціально обладнане та конструкційно оформлене таким чином, щоб гарантувалася тривала ізоляція РАВ від потрапляння їх у біосферу, а також забезпечувалося дотримання вимог і регламентів, установлених санітарним законодавством для подібного типу сховищ. Система бар'єрів для захисту біосфери від внесення радіонуклідів складається з наступних компонентів:

- Технічний бар'єр (матриця відходів і сталевий контейнер)
- Геотехнічний бар'єр (мінеральна суміш, бентонітовий буфер і матеріали засипки / закладки)
- Геологічний бар'єр (ближня зона, дальня зона і можливі покривні шари)

Кожен з наведених елементів бар'єру вносить свою частку в ефективність ізоляції загального бар'єру і, тим самим, в першу чергу, в утримування радіонуклідів, отже, має власні "захисні функції". Прийнято вважати, що геотехнічний бар'єр складається із шару піску й шару бентоніту. Сам бентоніт має дуже низьку теплопровідність, так що в даний час виходять з того, що бентоніт буде змішуватися в певних пропорціях з графітом, що володіє термічно високою провідністю, для збільшення теплопровідності суміші так, щоб вона приблизно відповідала теплопровідності вміщуючої породи. Захисні функції бар'єра ближнє поле і перекривають шари складаються з утримування радіонуклідів за допомогою процесу сорбції, а також з уповільнення транспорту радіонуклідів, наприклад, через низьку проникності систем тріщин, низькою пористості матриці вміщуючих порід, високого вмісту вміщуючих порід з низькою проникністю в осадових перекривають шарах, низьких коефіцієнтів дифузії, незначних течій, що заповнюють порожнечі, і низьких гідравлічних градієнтів. Для геологічної частини системи параметри, що лежать в основі довготривалого моделювання процесів, і припущення прийняті для моделей, можуть містити численні похибки через значне прогнозованого періоду та великої різноманітності можливих факторів впливу. При цьому робиться відмінність відомих граничних умов місця розташування, ускладнюють розробку прогнозу довгострокового розвитку геологічного бар'єру. між похибками даних та / або параметрів, яким найчастіше легше керувати, і похибками процесів, які в результаті їх залежності від конкретних, часто ще не повністю відомих граничних умов місця розташування, ускладнюють розробку прогнозу довгострокового розвитку геологічного бар'єру. Погрішності в початкових даних тягнуть за собою похибки в моделях, що може поставити під сумнів результати відповідних моделювань процесів

## ЕЛЕКТРОСИНТЕЗ НАНОСТРУКТУРОВАНИХ КОМПОЗИЦІЙНИХ ПОКРИТТІВ НА ОСНОВІ МІДІ ТА НІКЕЛЮ

*Овчаренко О.О., Тарнавська О.В. Сахненко М.Д.*

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»

[neshly@mail.ru](mailto:neshly@mail.ru)

У сучасній промисловості велика увага приділяється створенню й впровадженню у виробництво принципово нових прогресивних технологій, що забезпечують підвищення якості й надійності встаткування й матеріалів, скорочення трудових витрат, зниження матеріалоємності, енергоспоживання й забруднення навколишнього середовища. Аналіз ряду виробів машинобудування свідчить, що існує цілий ряд деталей, які економічно більш вигідно одержувати електролітичним способом. Важливе значення має розробка нових видів покриттів з підвищеними твердістю, зносостійкістю, корозійною стійкістю, паяємістю, поліпшеними електричними й іншими експлуатаційними властивостями. Створення композиційних електрохімічних покриттів (КЕП) є одним з актуальних напрямків сучасної гальванотехніки. Включаючись у покриття, частинки дисперсної фази істотно поліпшують їхні експлуатаційні властивості або надають їм нові якості (антифрикційні, магнітні, каталітичні). Завдяки цьому КЕП знаходять широке застосування в різних галузях промисловості, а розробка нових видів КЕП і пошук шляхів керування їхніми властивостями є важливим науково-технічним завданням.

Метою роботи є створення композиційних покриттів на основі міді або нікелю, армованих нанорозмірною дисперсною фазою ( $Al_2O_3$ ) з покращеними експлуатаційними властивостями, дослідження кінетики та механізму їх електроосадження для удосконалення процесу електросинтезу.

Композитні фольги на основі міді (нікелю) отримано методом гальванопластики на зразках з полірованої нержавіючої сталі в гальваностатичному режимі у сульфатних електролітах за присутності у розчинах нанорозмірних частинок  $Al_2O_3$  варійованої концентрації (5 - 100 г/л). З метою запобігання агрегації частинок дисперсної фази в електролітах попередньо проводили їх оброблення з використанням диспергатора УЗД 22/44 на частоті 22 кГц. Час обробки складав 15 хвилин.

Отримано композитні фольги міді та нікелю товщиною 10 - 100 мкм залежно від часу електролізу. Кінетика утворення КЕП включає наступні стадії: доставку дисперсних частинок до катода, утримання їх на поверхні катода. Частинки на катоді ініціюють зародкоутворення в місцях контакту з його поверхнею, що стимулює їх зарощування металом, який осаджується. Структура мідної фольги має зеренну однорідність із середнім розмір зерна 10 мкм. При введенні домішок оксиду алюмінію в розчин (30-50 г/л) структура композитних фольг стає більш дисперсною - 1-2 мкм.

При концентраціях корунду в розчині 50—100 г/л утворюються покриття, які містять 0,4 - 0,8 % (мас.) частинок дисперсної фази. Значення мікротвердості покриттів становлять 1200 МПа для композиційної фольги на основі міді та 1600 МПа – на основі нікелю, які перевищують такі ж значення для фольг міді та нікелю – 800 МПа та 1000 МПа, відповідно.

Доведено, що використання гальванопластичного методу синтезу КЕП дозволяє отримувати безпорові фольги регульованої товщини без їх наступної термопластичної обробки.

Визначено, що введення високодисперсної фази оксиду алюмінію в сульфатні електроліти мідніння або нікелювання сприяє формуванню КЕП з істотно кращими механічними характеристиками (межа текучості, межа міцності, пластичність, мікротвердість) у порівнянні з мідними або нікелевими фольгами, отриманими за аналогічних режимів.

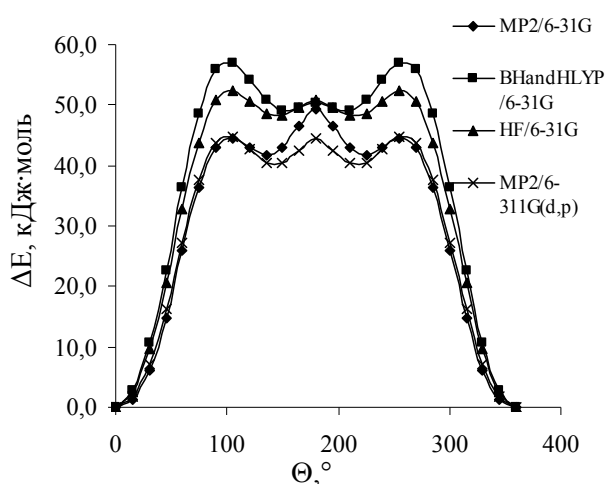
**MP2-ИССЛЕДОВАНИЕ ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ  
2-ПИРИДИН-2-ИЛ-1H-БЕНЗИМИДАЗОЛА**

*Рулёва К.В., Берестнева Ю.В., Ракша Е.В.*

Донецкий национальный университет

[elenaraksha411@gmail.com](mailto:elenaraksha411@gmail.com)

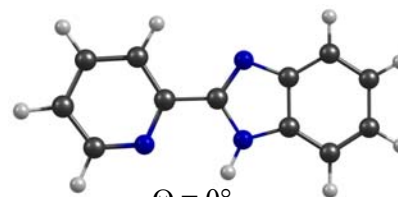
Производные бензимидазола – перспективные соединения-лидеры в дизайне лекарственных препаратов антимикробного, противовирусного и противоракового действия. Введение в структуру бензимидазола пиридинового фрагмента обеспечивает дополнительный координационный центр и открывает широкие возможности для создания на основе такой структуры биомиметических каталитических и сенсорных систем. Эффективность и селективность таких систем будет зависеть от конформационных свойств пиридинил-бензимидазольного фрагмента. В работе представлены результаты теоретических исследований структуры и внутримолекулярной динамики 2-пиридин-2-ил-1H-бензимидазола (PBI). Расчеты выполнены в приближении методов HF, BHandHLYP и MP2 с набором базисных функций 6-31G. В случае MP2 метода использовали также и расширенный базис 6-311G(d,p).



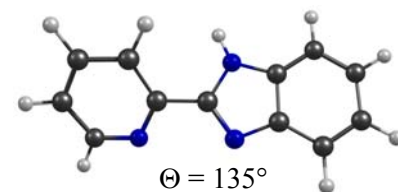
Проводилась полная оптимизация параметров молекулярной геометрии PBI с последующим расчетом частот гармонических колебаний.

Рассчитано изменение полной энергии PBI при внутримолекулярном вращении пиридинового фрагмента в молекуле вокруг связи C–C. При этом варьировали величину торсионного угла C9-C8-C7-N1 ( $\Theta$ ) от 0° до 360° с шагом 15° при полной оптимизации всех остальных геометрических параметров. На рисунке приведены типичные кривые

внутримолекулярного вращения пиридинового фрагмента вокруг C–C связи в молекуле PBI ( $\Delta E$  – конформационная энергия, рассчитанная как разность полной энергии конформации молекулы с текущей величиной координаты  $\Theta$  и полной энергии конформера с наименьшей энергией). На кривой внутримолекулярной динамики наблюдается 4 минимума. Конфигурация молекулы PBI с величиной  $\Theta$ , равной 0° и 360° - идентичны. Минимумы на кривой, соответствующие  $\Theta = 135^\circ$  и  $\Theta = 225^\circ$  (MP2 метод) также изоэнергетичны и имеют одинаковую конфигурацию. Поэтому далее рассматриваем только два конформера PBI. Рассчитаны величины барьеров внутреннего вращения (таблица) в молекуле PBI, соответствующих переходам конформер 1  $\rightarrow$  конформер 2 ( $\Delta E_{1\rightarrow 2}$ ) и конформер 2  $\rightarrow$  конформер 1 ( $\Delta E_{2\rightarrow 1}$ ).



Конформер 1



Конформер 2

метод	HF/6-31G	BHandHLYP/6-31G	MP2/6-31G	MP2/6-311G(d,p)
$\Delta E_{1\rightarrow 2}$ , кДж/моль	52,4	57,0	49,2	44,9
$\Delta E_{2\rightarrow 1}$ , кДж/моль	4,2	7,8	2,7	4,5

**КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РЕАКЦИИ ОКИСЛЕНИЯ ДИМЕТИЛСУЛЬФИДА ПЕРОКСОМЕТАСИЛИКАТ АНИОНОМ**

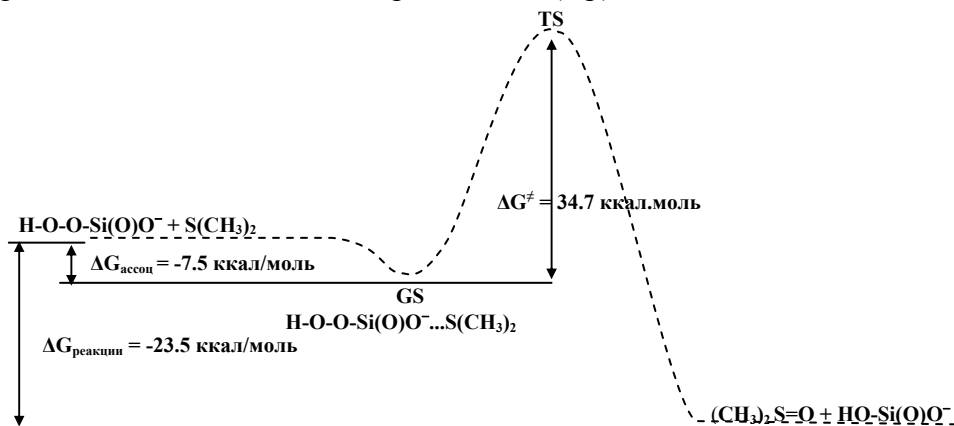
Дятленко Л.М. \*, *Следнева А.С.*, Пастернак Е.Н., Лобачев В.Л. \*

Донецкий национальный университет

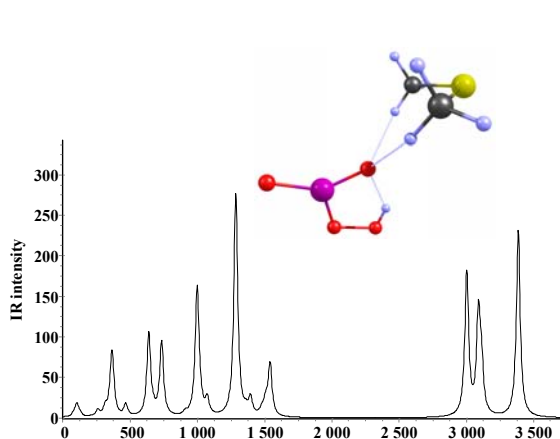
\*Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко НАНУ

Поиск новых окислительных систем для быстрого селективного окисления тиоэфиров (RSR) имеет большое значение для разложения активных компонентов пестицидов и отравляющих веществ, десульфирования углеводородного сырья и топлив, синтеза биологически активных соединений и лекарственных препаратов. Среди многочисленных окислителей, используемых для окисления RSR, особое место занимает наиболее экологически чистый и дешевый пероксид водорода, который, однако, сам по себе имеет низкую реакционную способность в окислении сульфидов. Добавки метасиликата натрия приводят к росту скорости окисления диэтилсульфида пероксидом водорода. Предполагается, что метасиликат - анион значительно повышает активность H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> за счет образования пероксокислот.

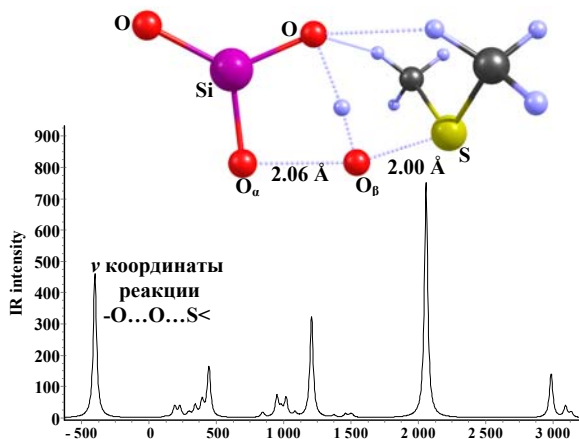
В докладе обсуждаются результаты молекулярного моделирования реакции окисления диметилсульфоксида пероксосиликат анионом, который образуется *in vivo* в реакции H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> с Na<sub>2</sub>SiO<sub>3</sub>. Квантовохимические расчеты выполнены DFT-методом на уровне теории B3LYP с базисным набором 6-311G(d,p).



ΔG реакции образования реакционноактивного аниона пероксомонокремниевой кислоты в соответствии с уравнением 1 составляет -7,2 ккал/моль.



Структура и ИК- спектр GS  
H-O-O-Si(O)O<sup>-</sup>...S(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>



Структура и ИК- спектр TS  
реакции H-O-O-Si(O)O<sup>-</sup> + S(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>

**МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ПЕРЕОКИСНЕННЯ РОЗЧИННИХ  
ПРОВІДНИХ ПОЛІМЕРІВ У СИЛЬНОКИСЛОМУ СЕРЕДОВИЩІ**

*Ткач В.В.<sup>1</sup>, Нечипорук В.В.<sup>1</sup>, Ягодинець П.І.<sup>1</sup>, да Роша А.М.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Чернівецький національний університет, Україна

<sup>2</sup>Федеральний університет штату Мінас-Жерайс, Бразилія

[nightwatcher2401@gmail.com](mailto:nightwatcher2401@gmail.com)

Цікавість до хімії провідних полімерів зростає протягом останніх декількох десятиліть. Це пояснюється тим, що вони здатні поєднувати властивості пластмас із металічною провідністю, а також відносно легко модифікуються. Це надає їм широкий спектр властивостей, починаючи із протикорозійних покриттів і закінчуючи сенсорами та біосенсорами.

Один із найважливіших аспектів використання провідних полімерів – протикорозійні покриття. Оскільки провідні полімери в своїй переважній більшості нерозчинні, їхні плівки відгороджують металічну поверхню від агресивного середовища і навіть у переокисненому стані вони продовжують виконувати свою захисну функцію.

Проте у разі появи на поверхні розчинного провідного полімеру, наприклад самодопованого похідного політіофену, переокиснення відбувається із розчиненням полімерної плівки, що свою чергу оголює поверхню металу, піддаючи її дії агресивного середовища. Для політіофенів потенціал переокиснення може дорівнювати або бути нижчим за потенціал полімеризації відповідного мономеру (явище «політіофенового парадоксу»).

Така нестабільність провідного полімеру за умов процесу проявити себе у електрохімічних нестійкостях у даній системі, математичний опис яких дозволить визначити механізм їх появи, а його інтерпретація дозволить виявити за електрохімічними нестійкостями хімічну нестабільність полімеру.

Було побудовано математичну модель для потенціостатичного переокиснення ( $U=U_P>U_O$ ) розчинного провідного полімеру у сильнокислому середовищі, а також вказано поправку, яку слід внести в модель для випадку ацидофобного мономеру. Знайдені умови стійкості стаціонарних станів, монотонної та осциляторної нестійкостей, причому остання спричиняється поверхневим (притягуюча взаємодія адсорбованих молекул та катіон-радикалів) та автокаталітичним (автокаталітична дія протону за наявності).

**MP2/GIAO ТА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ХІМІЧНІ ЗСУВИ  
ЯДЕР  $^1\text{H}$  І  $^{13}\text{C}$  ГІДРОПЕРОКСИДУ ТРЕТ-БУТИЛУ**

*Шниці Т.В., Берестнева Ю.В., Ракша О.В., Туровський М.А.*

Донецький національний університет

[elenaraksha411@gmail.com](mailto:elenaraksha411@gmail.com)

Досліджено вплив розчинника на положення сигналів у  $^1\text{H}$  і  $^{13}\text{C}$  ЯМР спектрах гідропероксиду *трет*-бутилу ( $(\text{CH}_3)_3\text{COOH}$ ). В експериментальних дослідженнях використані розчинники – ацетонітрил- $d_3$ , хлороформ- $d$ , тетрахлорметан. Внутрішній стандарт – тетраметилсилан (ТМС). Зміна природи розчинника впливає на положення сигналів у спектрах  $^1\text{H}$  і  $^{13}\text{C}$  ЯМР гідропероксиду (Таблиця 1).

Таблиця 1

Параметри  $^1\text{H}$  і  $^{13}\text{C}$  ЯМР спектрів гідропероксиду *трет*-бутилу  
 $[(\text{CH}_3)_3\text{COOH}] = 0.03 \text{ моль} \cdot \text{дм}^{-3}$ , 298 К

Розчинник	$^1\text{H}$ ЯМР		$^{13}\text{C}$ ЯМР	
	$\delta(\text{CH}_3)$ , м.ч.	$\delta(\text{COOH})$ , м.ч.	$\delta(\text{CH}_3)$ , м.ч.	$\delta(\text{COOH})$ , м.ч.
$\text{CCl}_4$	1.14	8.05	26.03	80.21
$\text{CDCl}_3$	1.27	7.24	25.71	80.87
$\text{CD}_3\text{CN}$	1.18	8.80	26.27	80.53

Розрахунок хімічних зсувів ядер  $^1\text{H}$  і  $^{13}\text{C}$  гідропероксиду *трет*-бутилу виконано методом GIAO в наближенні моделі ізольованої частинки та з врахуванням розчинника в рамках моделі поляризаційного контініуму (PCM), яка дозволяє врахувати неспецифічну сольватацію. Для розрахунку використані рівноважні геометрії гідропероксиду, одержані на рівні MP2 з базисним набором 6-31G(d,p) для відповідного розчинника.

На основі одержаних в результаті розрахунку констант магнітного екранування ( $\chi$ , м.ч.) оцінювали величини хімічних зсувів ( $\delta$ , м.ч.) ядер  $^1\text{H}$  і  $^{13}\text{C}$  в молекулі гідропероксиду. Як стандарт використано ТМС, для якого було виконано повну оптимізацію молекулярної геометрії та розрахунок  $\chi$  з використанням однакового рівня теорії і базисного набору. Величини хімічних зсувів (Таблиця 2) ядер  $^1\text{H}$  і  $^{13}\text{C}$  знаходили як різницю констант магнітного екранування відповідних ядер ТМС і гідропероксиду.

Таблиця 2

Хімічні зсуви атомів  $^1\text{H}$  та  $^{13}\text{C}$  гідропероксиду *трет*-бутилу, розраховані методом  
 MP2/6-31G(d,p) з врахуванням впливу розчинника

Розчинник	$^1\text{H}$ NMR		$^{13}\text{C}$ NMR	
	$\delta_{\text{COOH}}$ , м.ч.	$\delta_{\text{CH}_3}$ , м.ч.	$\delta_{\text{COOH}}$ , м.ч.	$\delta_{\text{CH}_3}$ , м.ч.
-	6.805	1.226	79.379	27.163
$\text{CCl}_4$	7.544	1.236	79.708	27.303
$\text{CHCl}_3$	8.128	1.235	79.978	27.396
$\text{CH}_3\text{CN}$	8.771	1.250	80.311	27.455

Найкраще узгодження експериментальних і розрахованих величин  $\delta$  спостерігається при врахуванні впливу розчинника у квантово-хімічних розрахунках.

ПРИКЛАДНИЙ АНАЛІЗ ПАТЕНТНОЇ ІНФОРМАЦІЇ ПРО БІОЛОГІЧНІ  
ВЛАСТИВОСТІ НАБОРУ СПОЛУК ПІРАЗОЛО[3,4-С]ІЗОХІНОЛІНІВ

Суйков С.Ю., Яковлева Г.В.

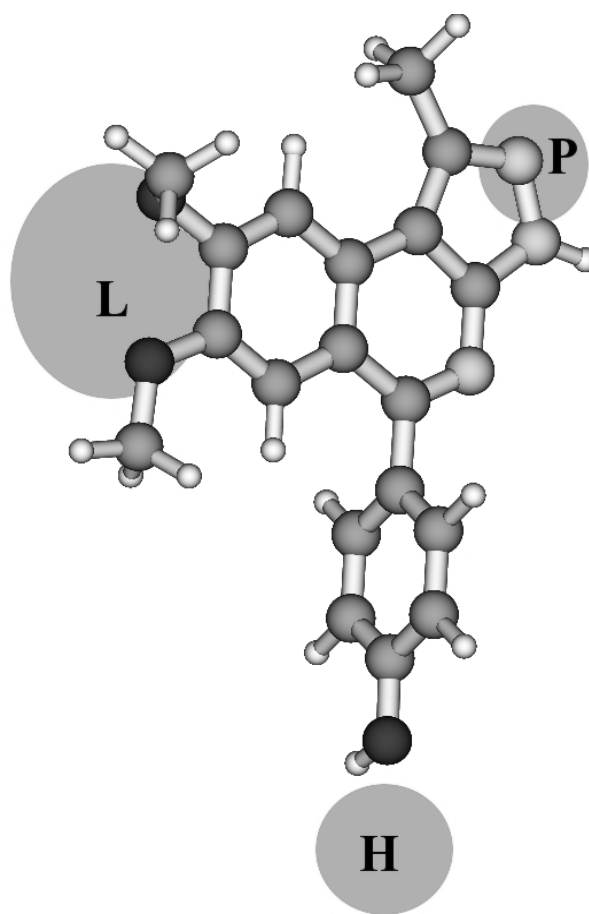
Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАН України  
[vya4eslavovna.ru@mail.ru](mailto:vya4eslavovna.ru@mail.ru)

Модулятори кіназ – відносно новий клас низькомолекулярних протиракових засобів які останнім часом привертають помітний синтетичний та практичний інтерес. Основна інформація щодо біологічних характеристик речовин міститься в патентах і є доволі обмеженою. Найбільшою активністю у цій галузі вирізняється фірма Exelixis. Зазвичай наведені у патентах дані представлено у ранжованому вигляді та зі значним рівнем інформаційного шуму. Ми проаналізували наявну структурну інформацію з відповідних патентів для сполук ряду піразоло[3,4-с]ізохіноліну з огляду на виділення суттєвих рис системи та зниження впливу суб'єктивних факторів представлення результатів. На підставі аналітичного розгляду візуальними методами прикладної статистики відповідності параметрів структура-активність виділено ключові ознаки використаного у патентах зниження інформаційної цінності масиву даних та проведена їх реструктуризація.

Показано, що наявні експериментальні дані відповідають трьохцентровій моделі фармакофору. Виділене можливе істотне модулювання спектру активності замісником у положенні 3 ядра. Для відповідного полярного центру зв'язування запропоновано найвірогідна «виделкова» структура з значними стеричними обмеженнями. Для Н-акцепторного сайту встановлено положення суворо на обертальній осі, що проходить через атоми С1 і С4 замісника в 5 положенні на відстані не більше 1.5-2 ангстрема від атома кисню.

На рисунку використано наступні позначення областей зв'язування:

- L – ліпофільний сайт,
- H – протоноакцепторний,
- P – полярний.



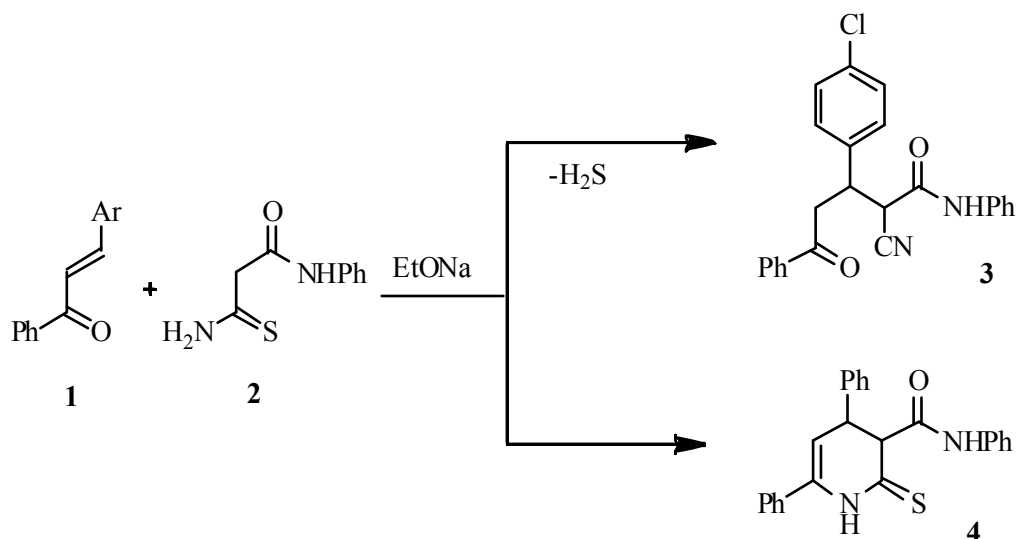
**SYNTHESIS OF NEW DERIVATIVES OF NICOTINIC ACID USING CHALCONES  
AND THEIR BEHAVIOUR IN PRESENTS OF ALKYLHALOGENIDES**

*Abdulsattar O.D., Saraeva T.A., Krasnikov D.A*

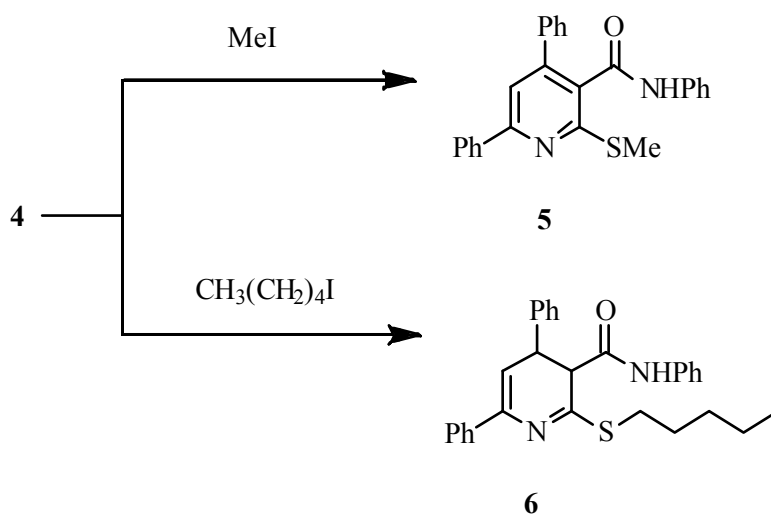
Lugansk Taras Shevchenko National University, Lugansk

[sara-chem@mail.ru](mailto:sara-chem@mail.ru)

Reaction of chalcone **1** with thiocarbamoylacetylides **2** in the presence of equimolar quantity of EtONa leads to products **3** and **4**.



Alkylation of compound **4** using iodomethane and iodopentane result to pyridine **5** and 3,4-dihydropyridine **6**, respectively.



Structures of synthesized compounds were confirmed on the basis of spectral data (MS, IR, <sup>1</sup>HNMR).

ИЗУЧЕНИЕ РЕАКЦИИ  $\alpha$ -D-ГЛЮКОЗАМИНИЛХЛОРИДА  
С ПИРАЗОЛИН-5-ОНАМИ В УСЛОВИЯХ  
МЕЖФАЗНОГО КАТАЛИЗА

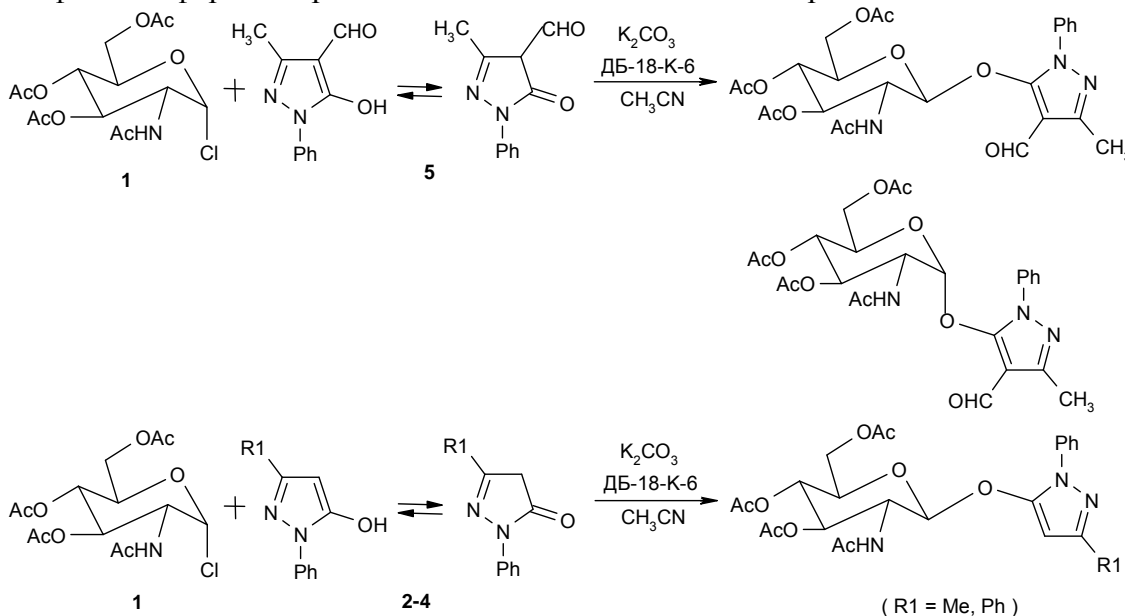
*Абдурахманова Э.Р.*

Таврический национальный университет имени В.И. Вернадского

[Esma146@mail.ru](mailto:Esma146@mail.ru)



В условиях межфазного катализа изучено гликозилирование 3-метил-1-фенил-пиразол-5-она **2**, 1,3-дифенил-пиразол-5-она **3**, 3-пропил-1-фенил-пиразол-5-она **4** и 3-метил-1-фенил-4-формилпиразол-5-она **5**  $\alpha$ -D-гликозаминилхлоридом **1**.



Гликозилирование проводили в безводном ацетонитриле при соотношении  $\alpha$ -хлорид **1** : пиразолоны **2-5** :  $K_2CO_3$  - 1:1:1 (моль), МФ катализатор [3.3]ДБ-18-К-6 – 0,2 моль. Реакции шли при комнатной температуре и завершались через 3-5 часов. Поскольку в ацетонитриле пиразолоны могут присутствовать в виде как NH-, так и OH-таутомеров, гликозилирование могло идти по одному из двух нуклеофильных центров с образованием смеси *O*- и *N*-гликозаминидов.  $^1H$  ЯМР анализ основных продуктов реакции показал, что во всех случаях исходные пиразолоны реагировали в OH-форме с образованием *O*- $\beta$ -D-гликозаминидов. 1,2-*транс*-Конфигурация гликозидной связи доказана величиной  $K_{SSB} J_{1,2} = 8,8$  Гц.

## ВЛИЯНИЕ pH НА АНТИРАДИКАЛЬНУЮ АКТИВНОСТЬ ФЕНОЛКАРБОНОВЫХ КИСЛОТ В РЕАКЦИИ С АВТС<sup>+</sup>

*Виноградова Н.А., Лебедкова О.С., Каниболоцкая Л.В., Шендрик А.Н.*

Донецкий национальный университет

[Arina0@meta.ua](mailto:Arina0@meta.ua)

Растительное сырье интенсивно используется в пищевой промышленности и медицине как источник веществ с высокой физиологической активностью, малой токсичностью и аллергенностью, мягкостью действия. В последнее время наблюдается значительный интерес к исследованию природных антиоксидантов из растительного сырья. Они являются более безопасными для здоровья по сравнению с их синтетическими аналогами.

Фенолкарбонные кислоты (ФКК) широко распространены в природе. Они встречаются в коре деревьев, листьях растений, соках фруктовых и овощных культур, являясь важными компонентами системы антиоксидантной защиты растений. ФКК (галловая кислота и ее эфиры, *n*-оксибензойная, протокатехиновая и ее производные, и др.) входят в состав лекарственных растений, чая и макромицетов. Широкое распространение ФКК в продуктах растительного происхождения обуславливает их важность как пищевых антиоксидантов, необходимых для поддержания антиоксидантной системы человека и животных. Антиоксидантная активность ФКК обусловлена, прежде всего, их антирадикальным действием (АРА).

Цель работы – исследование антирадикальных свойств фенолкарбонных кислот в реакции с катион-радикалом 2,2'-азинобис(3-этилбензотиазолин-6-сульфоновой) кислоты (АВТС<sup>+</sup>) при различных значениях pH среды.

Объекты исследования – *n*-гидроксибензойная, 2,4-дигидроксибензойная, 3,4-дигидроксибензойная, 2,5-дигидроксибензойная, 2,3-дигидроксибензойная, 2,3,4-тригидроксибензойная, галловая (3,4,5-тригидроксибензойная) кислоты, катехин. В качестве инициатора образования АВТС<sup>+</sup> использовали персульфат калия. Стандартом служил тролокс (6-гидрокси-2,5,7,8-тетраметилхроман-2-карбоновая кислота), который является водорастворимым аналогом витамина Е. Условия эксперимента: 0.2 М фосфатный буфер (pH=7.4) и 0.2 М ацетатный буфер (pH 4.6 и 5.4), T= (293±1) К. Метод исследования – UV-VIS – спектроскопия.

Получены линейные зависимости концентрации нейтрализованных катион-радикалов АВТС<sup>+</sup> от концентрации ФКК и катехина. Определена стехиометрия реакции в эквиваленте тролокса (ТЕАС). Исследована зависимость ТЕАС ФКК и катехина от pH (таб.).

Таблица. Антирадикальная емкость ФКК. T= 293 К

Объект исследования	ТЕАС		
	pH 4.6	pH 5.4	pH 7.4
2,4-дигидроксибензойная кислота	2.8±0.6	3.9±0.2	4.9±0.8
2,3,4- тригидроксибензойная кислота	2.4±0.5	2.6±0.3	2.9±0.4
2,3- дигидроксибензойная кислота	1.5±0.4	1.7±0.5	2.1±0.5
2,5- дигидроксибензойная кислота	2.1±0.2	2.6±0.6	3.4±0.2
3,4- дигидроксибензойная кислота	1.1±0.5	1.4±0.1	2.6±0.9
3,4,5-тригидроксибензойная кислота	2.1±0.5	2.9±0.1	3.1±0.8
4-гидроксибензойная кислота	0.0039±0.0009	0.3±0.1	0.4±0.1
катехин	3.5±1.1	5.4±0.9	4.8±0.5

Установлено, что АРА всех изученных ФКК (исключение – 4-гидроксибензойная кислота) выше, чем у тролокса. Активность ФКК повышается с увеличением значений pH среды. Катехин проявляет наибольшую активность при всех значениях pH.

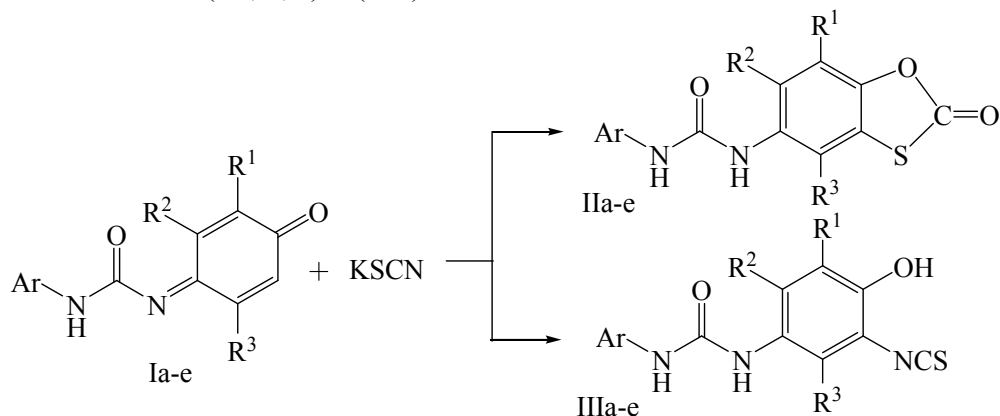
Таким образом, ФКК являются эффективными ловушками катион-радикала АВТС<sup>+</sup>. Их АРА зависит от pH среды.



## РОДАНИРОВАНИЕ N-АРИЛАМИНОКАРБОНИЛ-1,4-БЕНЗОХИНОНМОНОИМИНОВ

Коновалова С.А., Авдеенко А.П., Гончарова С.А.  
Донбасская государственная машиностроительная академия  
chimist@dgma.donetsk.ua

В результате реакции N-ариламинокарбонил-1,4-бензохинонмоноиминов (Ia–e) с роданидом калия получены смеси продуктов – 5-(ариламинокарбонил)амино-1,3-бензоксатиол-2-онов (IIa–e) и 4-амино-N-ариламинокарбонил-2-изотиоцианатфенолов (IIIa–e). После нескольких перекристаллизаций в индивидуальном виде удалось выделить соединения (IIa, в, г) и (IIIa).



Ar=Ph, 4-Tol; R<sup>1</sup>=Me, R<sup>2</sup>=R<sup>3</sup>=H (a), R<sup>1</sup>=R<sup>2</sup>=Me, R<sup>3</sup>=H (б), R<sup>1</sup>=R<sup>3</sup>=Me, R<sup>2</sup>=H (в), R<sup>1</sup>=H, R<sup>2</sup>=R<sup>3</sup>=Me (г), R<sup>1</sup>=*i*-Pr, R<sup>2</sup>=H, R<sup>3</sup>=Me (д), R<sup>1</sup>=Me, R<sup>2</sup>=H, R<sup>3</sup>=*i*-Pr (e).

Строение синтезированных соединений доказано на основании данных элементного анализа индивидуально выделенных соединений, ЯМР <sup>1</sup>H, ЯМР <sup>13</sup>C, ИК-спектроскопии. В ИК-спектрах соединений (II) присутствует полоса поглощения в области 1740–1760 см<sup>-1</sup>, характерная для группы C=O 1,3-бензоксатиол-2-онов, а в ИК-спектрах соединений (III) – в области 2040–2050 см<sup>-1</sup>, характерная для группы NCS. Химические сдвиги и характер сигналов в спектрах ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C полностью соответствуют предложенным структурам.

Ранее установлено, что направление реакции роданирования определяется энергией НСМО хинонмоноимина, вступающего в реакцию: для хинонмоноиминов с низкой энергией НСМО на первой стадии реакции происходит 1,4-присоединение роданид-иона атомом серы с орбитальным контролем, для хинонмоноиминов с высокой энергией НСМО – атомом азота с зарядовым контролем. Затем в реакционной смеси сразу протекает циклизация образовавшихся продуктов, причем промежуточные продукты 1,4-присоединения ранее выделить не удавалось.

Согласно квантово-химическим расчетам (метод DFT) значение энергии НСМО N-фениламинокарбонил-1,4-бензохинонмоноиминов [-359,35 кДж/моль для (Ia), -341,58 кДж/моль для (Iг),] сравнимо с энергией НСМО 1,4-бензохинонмоноиминов, для которых ранее также получены продукты, образующиеся через присоединения роданид-иона атомом азота (-354,42 кДж/моль для N-ацетил-2-метил-1,4-бензохинонмоноимина, -354,13 кДж/моль для N-[фенилсульфонилимино(метил)метил]-3,5-диметил-1,4-бензохинонмоноимина). На основании этого можно сделать заключение, что для N-замещенных 1,4-бензохинонмоноиминов, имеющих значение энергии НСМО от -340 до -360 кДж/моль возможно присоединение роданид-иона как атомом серы, так и атомом азота. При более низких значениях энергии НСМО преобладающим становится 1,4-присоединение роданид-иона атомом серы при орбитальном контроле.

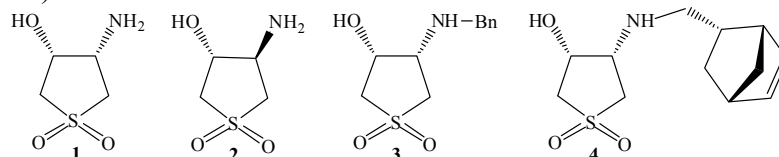
## ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СУЛЬФОЛАНСОДЕРЖАЩИХ АМИНОСПИРТОВ С С-ЭЛЕКТРОФИЛАМИ

*Заровная И.С., Садкова И.В., Кришень Д.А., Пальчиков В.А.*

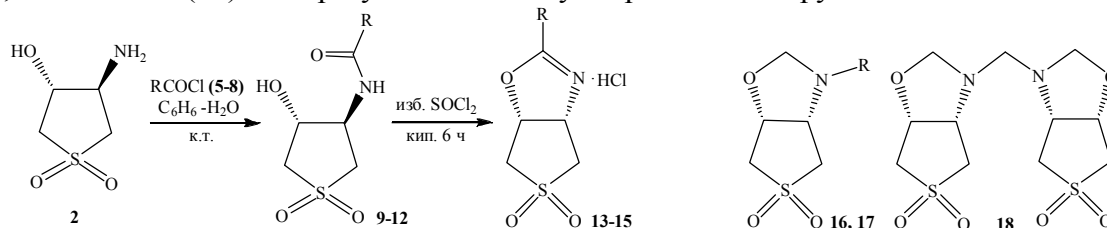
Днепропетровский национальный университет им. Олеса Гончара

[zarovir@yandex.ru](mailto:zarovir@yandex.ru)

Сульфолансодержащие соединения не являются природными, но известен ряд биологически активных веществ, содержащих сульфолановый цикл. Потому предствалает интерес получение новых соединений этой группы. В качестве исходных аминспиртов для трансформации в 1,3-оксазагетероциклы выбраны аминспирты (1-4).

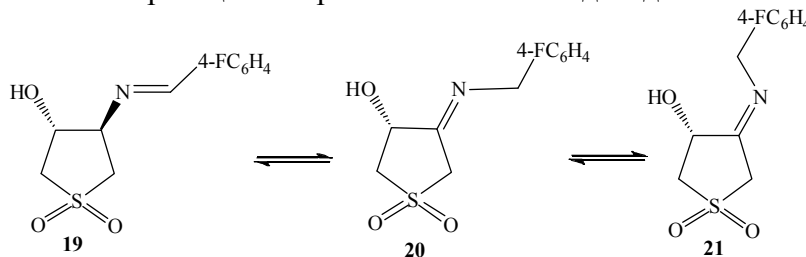


Взаимодействие *транс*-аминспирта (2) с хлорангидридами (R = Ph (5), 4-NO<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (6), 2-FC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (7), CH<sub>3</sub> (8)) в мягких условиях приводит к образованию N-моноацильных производных (9-12), в то время как при реакции с хлористым ацетилом получено смесь моно- и диацильных производных. Дальнейшее кипячение продуктов (9-11) в хлористом тиониле приводит к образованию гидрохлоридов оксазолинов (13-15); соединение (12) не образует цикл в виду стерических затруднений.



Аминспирты (3, 4) с 37% раствором формалина при комнатной температуре образуют оксазолидины (16, 17), а *цис*-3-гидрокси-4-аминсульфан (1) превращается в *бис*-оксазолидин (18).

Взаимодействие *транс*-аминспирта (2) с ароматическими альдегидами, содержащими заместители различной электронной природы (кипячение в абс. бензоле с насадкой Дина-Старка в присутствии TsOH, 24 ч), приводит к образованию смеси продуктов. Анализ спектров ЯМР <sup>1</sup>H, <sup>19</sup>F, COSY-90 и NOESY одного из продуктов, измеренных в различных растворителях, показал наличие смеси трех иминов (19-21), которые являются таутомерами; циклизация в соответствующие оксазолидины не наблюдается. Соотношение таутомеров различно и зависит от растворителя и природы заместителя в бензольном кольце. При введении в реакцию *цис*-аминспирта (1) также были получены имины, что показывает, что для получения циклических продуктов важна не только геометрия исходного аминспирта (*цис*- и *транс*-положение функциональных групп), но и строение образующегося имиона. Соединения (3, 4) оказались пассивными в реакциях с ароматическими альдегидами.



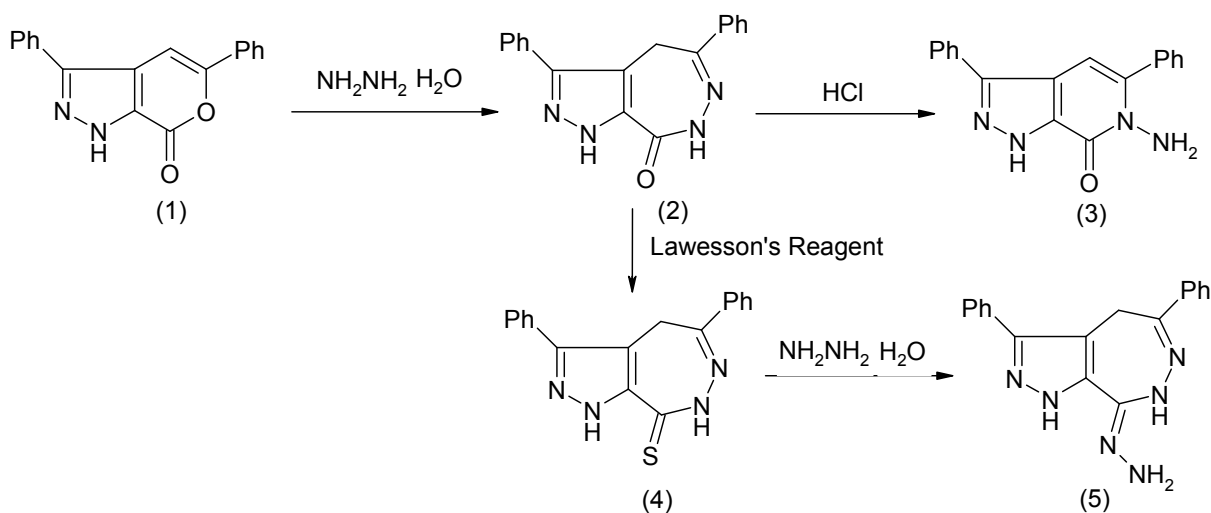
## СИНТЕЗ ПОХІДНИХ ПІРАНО[3,4-С]ПІРАЗОЛУ ТА ПІРАЗОЛО[3,4-D][1,2]ДІАЗЕПІНУ

*Ніколаєв О.С., Хижан О.І., Богза С.Л.*

Донецький національний університет

[a.nikolaev.chem@gmail.com](mailto:a.nikolaev.chem@gmail.com)

В останні роки стрімко розвивається застосування спеціальних хімічних препаратів обмеженого діапазону дії для лікування психічних захворювань, а також для припинення стресів та стимуляції нервової діяльності. Основною метою роботи було поєднання двох біологічно активних гетероциклічних систем, діазепінової та пірольної, які мають досить широкий спектр дії. Пірол є структурною одиницею багатьох біологічно активних сполук, як виділених з живих систем (антибіотики, феромони, токсини), так і штучно синтезованих. Пірольна система проявляє психотропні, антигіпертензивні, антигістамінні властивості. Діазепінова система є антагоністом йонотропних глутаматних АМРА-рецепторів, яка може бути застосована при лікуванні гострих дегенеративних розладів.



Нами було розроблено зручний синтез похідних гетероциклічних систем піразоло[3,4-d][1,2]діазепіну - гетероциклічних аналогів системи 2,3-бензодіазепіну, який полягає у взаємодії 3,5-дифенілпірано[3,4-с]піразол-7(1H)-ону з гідразингідратом у етилцелозольві. Отриманий з виходом 64% за даною методикою продукт (2), за даними  $^1\text{H}$  ЯМР спектрів, є досить чистим. Перехід від діазепінону (2) до діазепінтіону (4) відбувався за участі реагенту Лавессона в системі ТГФ-піридин у співвідношенні 95:5. Отримано тіон з виходом біля 85%. Одержання гідразиндіазепіну (5) відбувалось в розчині гідразингідрату при перемішуванні та нагріванні.

Усі проміжні та кінцеві продукти отримані з гарними виходами, їх структури підтверджено даними  $^1\text{H}$  та  $^{13}\text{C}$  ЯМР-спектрів та ІЧ-спектроскопії.

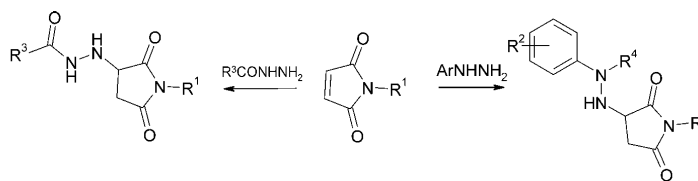
## СИНТЕЗ И РЕАКЦИИ ЗАМЕЩЕННЫХ 1-АРИЛ-3-(1-R-ГИДРАЗИН-2-ИЛ)ПИРРОЛИДИН-2,5-ДИОНОВ

*Орлов М.А.*

Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М.Литвиненко НАНУ  
[Orlovinfou@yandex.ru](mailto:Orlovinfou@yandex.ru)

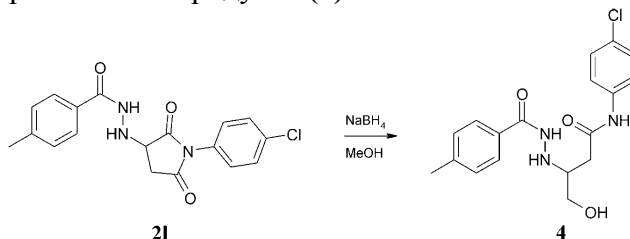
Замещенные 1-арил-3-(1-R-гидразин-2-ил)пирролидин-2,5-дионы являются потенциальными туберкулоостатическими, фунгицидными и антибактериальными препаратами, поэтому для химии биологически активных веществ большой интерес представляет разработка способов получения данных соединений и изучение реакций с их участием.

В настоящей работе по приведенной ниже схеме из N-арилмалеимидов (**1a-f**) были получены замещенные 1-арил-3-(ароилгидразин-2-ил)пирролидин-2,5-дионы (**2a-p**) и 1-арил-3-(арилгидразин-2-ил)пирролидин-2,5-дионы (**3a-c**).

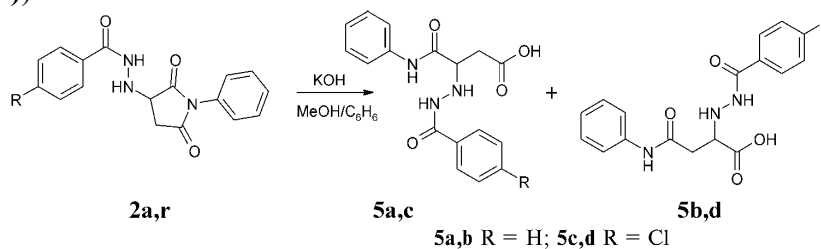


**1a** R<sup>1</sup> = C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>; **1b** R<sup>1</sup> = *n*-BrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>; **1c** R<sup>1</sup> = *n*-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>; **1d** R<sup>1</sup> = N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>; **1e** R<sup>1</sup> = 2,4-(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>3</sub>; **1f** R<sup>1</sup> = *m*-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>. **2a** R<sup>1</sup> = C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>, R<sup>3</sup> = C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>; **2b** R<sup>1</sup> = *n*-BrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, R<sup>3</sup> = *o*-CH<sub>3</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>; **2c** R<sup>1</sup> = *n*-BrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, R<sup>3</sup> = 3-пиридил; **2d** R<sup>1</sup> = *n*-BrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, R<sup>3</sup> = *o*-Br C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>; **2e** R<sup>1</sup> = *n*-BrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, R<sup>3</sup> = C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>CH<sub>2</sub>; **2f** R<sup>1</sup> = *n*-BrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, R<sup>3</sup> = *m*-CH<sub>3</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>; **2g** R<sup>1</sup> = *n*-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, R<sup>3</sup> = *o*-IC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>; **2h** R<sup>1</sup> = *n*-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, R<sup>3</sup> = 2-фурил; **2i** R<sup>1</sup> = *n*-BrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, R<sup>3</sup> = *o*-NO<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>; **2j** R<sup>1</sup> = N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, R<sup>3</sup> = *o*-CH<sub>3</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>; **2k** R<sup>1</sup> = *n*-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, R<sup>3</sup> = 2-пиридил; **2l** R<sup>1</sup> = *n*-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, R<sup>3</sup> = *n*-CH<sub>3</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>; **2m** R<sup>1</sup> = *n*-BrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, R<sup>3</sup> = *n*-CH<sub>3</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>; **2n** R<sup>1</sup> = *n*-BrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, R<sup>3</sup> = *m*-BrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>; **2o** R<sup>1</sup> = *n*-BrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, R<sup>3</sup> = *o*-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>; **2p** R<sup>1</sup> = 2,4-(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>3</sub>, R<sup>3</sup> = *n*-NO<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>; **2q** R<sup>1</sup> = 2,4-(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>3</sub>; R<sup>3</sup> = *m*-NO<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>; **2r** R<sup>1</sup> = C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>, R<sup>3</sup> = *n*-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>. **3a** R<sup>1</sup> = *m*-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, R<sup>2</sup> = R<sup>4</sup> = H; **3b** R<sup>1</sup> = *m*-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, R<sup>2</sup> = H, R<sup>4</sup> = CH<sub>3</sub>; **3c** R<sup>1</sup> = *m*-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, R<sup>2</sup> = *n*-CH<sub>3</sub>, R<sup>4</sup> = H

Для 1-арил-3-(ароилгидразин-2-ил)пирролидин-2,5-диона (**2l**) было показано, что его восстановление боргидридом натрия в смеси метанол-бензол протекает региоселективно с образованием продукта (**4**).



Действие на соединения (**2a,r**) гидроксида калия в смеси метанол-бензол с последующим подкислением приводит к раскрытию сукцинимидного кольца и образованию смеси двух изомерных кислот (**5a,b**) (при раскрытии (**2a**)) и (**5c,d**) (при раскрытии (**2r**)).



**5a,b** R = H; **5c,d** R = Cl

Структура, чистота и состав всех полученных соединений подтверждены данными <sup>1</sup>H ЯМР-спектроскопии, тонкослойной хроматографии, элементного анализа и масс-спектроскопии.

**8-АЛКІЛ-7-АЦЕТИЛ-3-ТІОКСО-2,3,5,6,7,8-ГЕКСАГІДРОІЗОХІНОЛІН-4-КАРБОНІТРИЛИ НА ОСНОВІ ДІАЦЕТИЛ-β-ЦИКЛОКЕТОЛІВ**

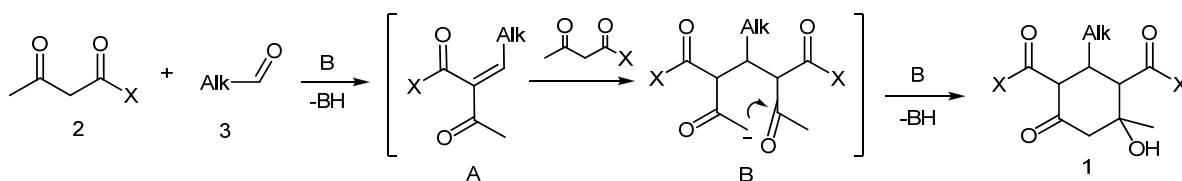
*Піна О.Г.*, Павшенко Л.Г., Карпов Є.М., Дяченко В.Д.

Луганський національний університет імені Тараса Шевченка

[fesfen@gmail.com](mailto:fesfen@gmail.com)

Метою даного дослідження стало отримання практично не вивчених 3-алкіл-2,4-діацетил(діетоксикарбоніл)циклогексанонів, з'ясування деяких особливостей їх будови, а також взаємодія з нуклеофільними реагентами.

Цільові продукти - β-циклокетони (1) утворюються при взаємодії ацетилацетона (2а) або ацетооцтового естеру (2б) з аліфатичними альдегідами (3).

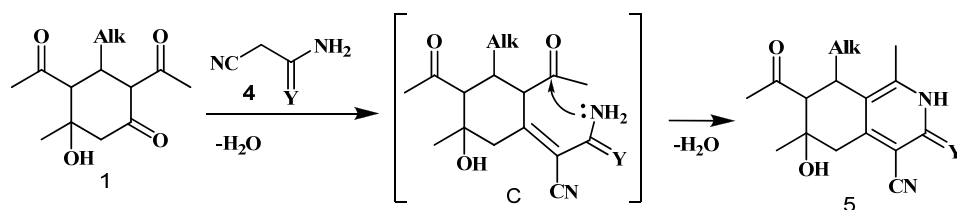


**1:** Alk= CH<sub>3</sub>, X= CH<sub>3</sub> (а); C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>, CH<sub>3</sub> (б); n-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>, CH<sub>3</sub> (в); i-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>, CH<sub>3</sub> (г); i-C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>, CH<sub>3</sub> (д); n-C<sub>6</sub>H<sub>13</sub>, CH<sub>3</sub> (є); i-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>, OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub> (ж); n-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>, OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub> (з); **2:** X=CH<sub>3</sub> (а), OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub> (б); **3:** Alk=CH<sub>3</sub> (а), C<sub>2</sub>H<sub>5</sub> (б), n-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub> (в), i-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub> (г), i-C<sub>4</sub>H<sub>9</sub> (д), n-C<sub>6</sub>H<sub>13</sub> (є)

Нещодавно нами була вивчена взаємодія 2,4-діацетил-5-гідрокси-5-метил-3-феніл(гетерил)циклогексанонів з ціанотіо(селено)ацетамідом в абсолютному етанолі в присутності органічної основи. Показано, що ця конденсація протікає з утворенням 7-ацетил-2,3,5,6,7,8-гексагідро-6-гідрокси-1,6-диметил-3-тіо(селено)оксо-8-феніл(гетерил)-ізохінолін-4-карбонитрилів, а алкілування останніх проходить за атомом сірки або селену.

В даній роботі досліджена поведінка отриманих нових 3-алкілциклогексанонів (1) в реакціях з ціанотіоацетамідом (4а) і ціаноселеноацетамідом (4б).

Схема реакції включає, ймовірно, атаку метиленактивної компоненти (4) за циклічною кето-групою вихідної сполуки (1) з послідувочою внутрішньомолекулярною циклізацією інтермедіата (С) з замиканням циклу і виділенням структури (5).



**5:** Alk= *i*-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>, Y=S (а), Alk= C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>, Y=S (б), Alk= CH<sub>3</sub>, Y=S (в), Alk= *i*-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>, Y=Se (г)

Структура вперш отриманих сполук підтверджена даними ІЧ-, ПМР- та хроматомас-спектроскопії.

**КРОСС-РЕЦИКЛИЗАЦИЯ 4-АЛКИЛ(АРИЛ)-2,6-ДИАМИНО-3,5-ДИЦИАНО-4H-ТИОПИРАНОВ С АЦЕТИЛАЦЕТАНИЛИДОМ**

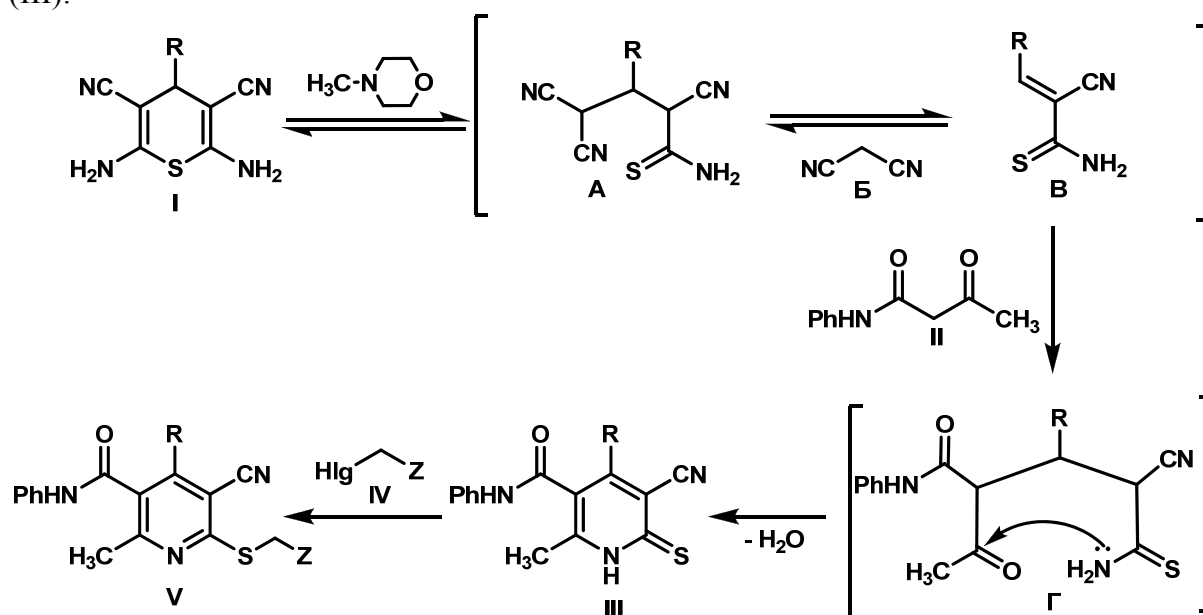
*Рыльская Т. А., Дяченко В. Д.*

Луганский национальный университет имени Тараса Шевченко  
rylskayaTA@gmail.com.

Ранее нами показано, что 2,6-диамино-4-алкил(арил, гетерил)-3,5-дициано-4H-тиопираны подвергаются рециклизации с образованием замещенных ароматических и частично гидрированных пиридинтионов, пиридинтиолятов и 2,6-бисалкил(арил)аминопиридинов. Реакция протекает при кипячении в органических растворителях, или в воде в присутствии неорганических, или органических оснований (гидроксидов щелочных металлов, растворов аммиака, первичных, вторичных и третичных аминов), СН-кислот, ангидридов алифатических кислот, алифатических кетонов и 1,3-дикарбонильных соединений.

В настоящем исследовании изучена *кросс*-рециклизация 4-алкил(арил)-2,6-диамино-3,5-дициано-4H-тиопиранов (I) с ацетилацетанилидом (II). В результате данной трансформации выделены 4-алкил(арил)-6-метил-5-фенилкарбамоил-3-цианопиридин-2(1H)-тионы (III), алкилирование которых галогенидами (IV) в основной среде привело к получению тиоэфиров (V).

Вероятно, схема реакции включает раскрытие тиопиранового цикла (I) с образованием интермедиатов А-Г и дальнейшей гетероциклизацией в пиридинтионы (III):



R = C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>, (C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>CH, 3,4-OMeC<sub>6</sub>H<sub>3</sub>, 3-OCH<sub>2</sub>Ph-4-OMeC<sub>6</sub>H<sub>3</sub>;

Hlg = Br, Z = винил; Hlg = Br, Z = C(O)OEt; Hlg = I, Z = H; Hlg = I, Z = C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>;

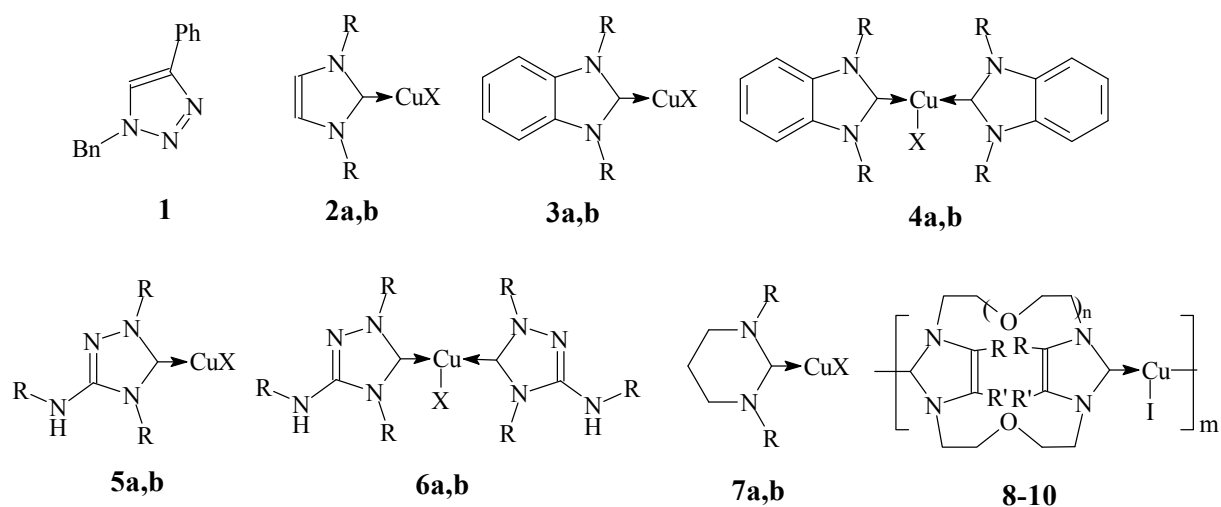
Hlg = Cl, Z = C(O)OCH<sub>2</sub>Ph; Hlg = Cl, Z = Ph; Hlg = Br, Z = C(O)4-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>.

Строение полученных соединений подтверждено методами ЯМР <sup>1</sup>H-, ИК-спектроскопии и масс-спектрометрии.

## КАТАЛІЗ КАРБЕНОВИМИ КОМПЛЕКСАМИ МІДІ(I) РЕАКЦІЇ Х'ЮСГЕНА–МЕЛЬДАЛЯ–ШАРПЛЕСА

*Сабєров В.Ш.*, Кисельов А.В., Марічев К.О., Глиняна Н.В., Кнішевицький А.В.  
Інститут фізико-органічної хімії та вуглехімії ім. Л.М. Литвиненко НАН України

Вивчено каталітичну дію карбенових комплексів міді(I) у реакції (3+2)-циклоприсєднання бензилазиду до фєнілацетилену, що приводить до 1-бензил-4-фєніл-1,2,3-триазолу **1**. Нові каталізатори синтезовано взаємодією з відповідними галогенідами міді(I): 1) стабільних карбенів в тетрагідрофурані (сполуки **2a,b,7a,b**), 2) 1,3-дизаміщених 2-ціанометил-2*H*-бензімідазолінів в ацетонітрилі (**3a,b, 4a,b**), 3) 1,4-дифєніл-1,2,4-триазолій-3-фєніліміду в диметилформаміді (**5a,b, 6a,b**), 4) *in situ* генерованих карбенів з ацетилацетонатів краун-бісбензімідазолію (**9**) або з перхлоратів краун-бісазолію і *трєт*-бутоксиду калію в ацетонітрилі (**8,10**).



**2a** R = Dipp, X = I; **2b** R = Dipp, X = BF<sub>4</sub>; **3a** R = Bn, X = Cl; **3b** R = Bn, X = I; **4a** R = Me, X = I; **4b** R = Me, X = BF<sub>4</sub>; **5a** R = Ph, X = Cl; **5b** R = Ph, X = I; **6a** R = Ph, X = Cl; **6b** R = Ph, X = I; **7a** R = Mes; X = Cl; **7b** R = Mes; X = I; **8** R, R' = H, n = 1; **9** R, R' = (CH)<sub>4</sub>, n = 1; **10** R, R' = (CH)<sub>4</sub>, n = 2. Dipp – 2,6-діізопропілфєніл

Найвищий на сьогодні каталітичний ефект виявляє комплекс **4b**, який при застосуванні 0.005 моль % забезпечує TON 20000, TOF 800 год<sup>-1</sup>. Спостєрігається такий ряд ефективності каталізаторів у реакції: **4b**>**4a**>**8b**> **8a**>**3b**>**3a**>**9**>**8**>**10**>**2b**>**2a**>**5b**>**5a**. Комплекси **5a,b** при завантаженнях менше 0.1 моль % не дозволяють досягти кількісних виходів триазолу **1**, а комплекси **6a,b** взагалі не каталізують реакцію. Полімерні комплекси міді(I) **8-10** є перспективними гетерогенними каталізаторами: в присутності 0.1 моль % комплексів досягаються кількісні виходи продукту, причому протягом 10 циклів зниження активності не спостєрігається.

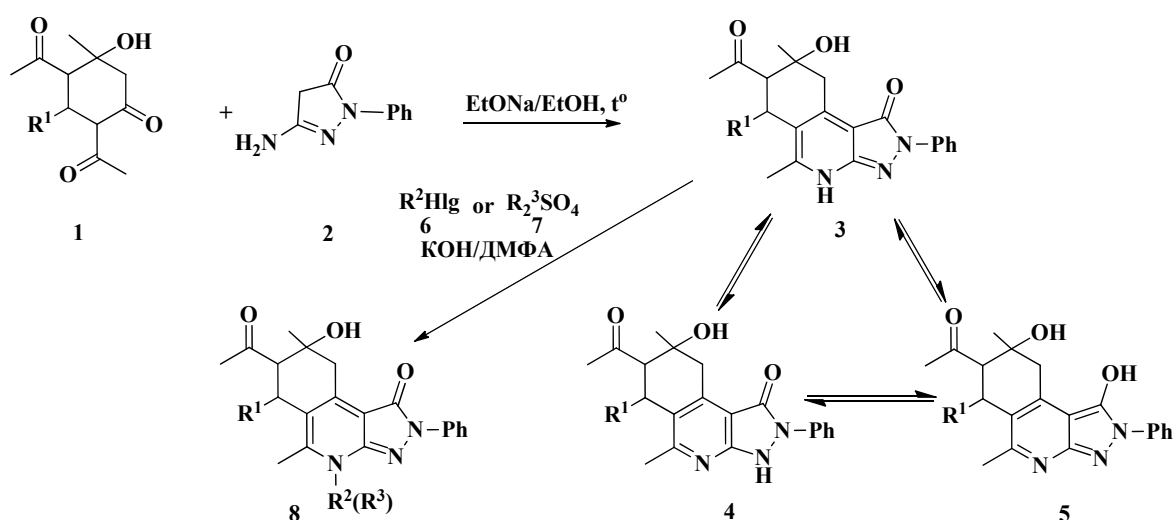
Робота виконана за підтримки НАН України (грант № 248/04.04.12).

**СИНТЕЗ ЗАМЕЩЕННЫХ 4-N-АЛКИЛТЕТРАГИДРОПИРАЗОЛО-  
ИЗОХИНОЛИНОВ НА ОСНОВЕ 2,4-ДИАЦЕТИЛ-5-ГИДРОКСИ-5-МЕТИЛ-  
3-R<sup>1</sup>-ЦИКЛОГЕКСАНОНОВ**

*Сукач С.М., Дяченко В.Д.*

Луганский национальный университет имени Тараса Шевченко  
Svetlana\_Genzyr@mail.ru

Производные 2-ацетилциклогексанонов (1) при кипячении в абсолютном этаноле в присутствии этилата натрия взаимодействуют с 3-амино-1-фенил-1*H*-пиразол-5(4*H*)-оном с образованием 7-ацетил-6-R<sup>1</sup>-6,7,8,9-тетрагидро-8-гидрокси-5,8-диметил-2-фенил-2*H*-пиразоло[3,4-*c*]изохинолин-1(4*H*)-онон (3), которые могут существовать в виде прототропных таутомеров (4) и (5). Для выяснения положения протона проведено рентгеноструктурное исследование, в результате которого установлено, что протон находится у атома азота изохинолинового кольца. Данное утверждение позволило предположить, что реакция соединений (3) с алкилирующими агентами (6) и (7) в растворе ДМФА в основной среде приводит к соответствующим 4-N-алкилтетрагидропиразолоизохинолинам (8).



R<sup>1</sup> = 2-фурил, 3-пиридинил, Ph, 4-MeC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>;

R<sup>2</sup>Hlg = PhCH<sub>2</sub>Cl, PhC(O)CH<sub>2</sub>Br, MeI;

R<sup>2</sup> = Me, Et.

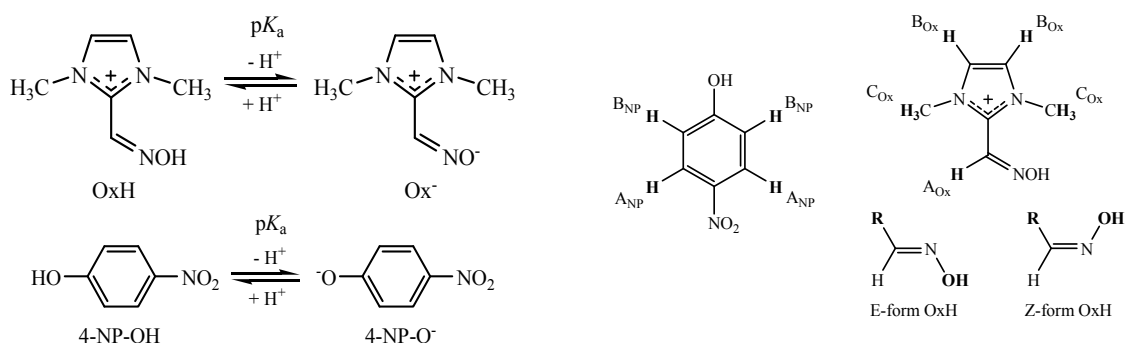
Строение синтезированных соединений (3), (8) подтверждено данными ИК-, масс-, ЯМР<sup>1</sup>H-, ЯМР<sup>13</sup>C-спектроскопии.

**ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ КИСЛОТНОСТИ СРЕДЫ НА СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РАСТВОРОВ 1,3-ДИМЕТИЛ-2-(ОКСИМИНОМЕТИЛ)-ИМИДАЗОЛИЙ ЙОДИДА И 4-НИТРОФЕНОЛА**

Капитанов И.В., Тучинская К.К.

Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко НАНУ  
Донецкий национальный университет  
[ivkapitanov@gmail.com](mailto:ivkapitanov@gmail.com)

С целью решения задачи идентификации продуктов взаимодействия 1-алкил-3-метил-2-(оксиминометил)имидазолий галогенидов с 4-нитрофениловыми эфирами кислот фосфора изучено поведение модельных объектов – индивидуальных водных растворов 1,3-диметил-2-(оксиминометил)имидазолий иодида (OxH) и 4-нитрофенола (4-NP-OH), а также смеси OxH / 4-NP-OH, при различных значениях pH среды с помощью <sup>1</sup>H ЯМР и UV-Vis спектроскопии. Анализ полученных данных позволил установить закономерности изменения спектральных характеристик растворов и рассчитать значения величин pK<sub>a</sub> для 4-NP-OH и OxH в различных экспериментальных условиях (см. таблицу).



**Таблица.** Кислотно-основные свойства (pK<sub>a</sub>) и некоторые спектральные характеристики 1,3-диметил-2-(оксиминометил)имидазолий иодида (OxH) и 4-нитрофенола (4-NP-OH) по данным <sup>1</sup>H ЯМР и UV-Vis спектроскопии (1M KCl; 25 °C)

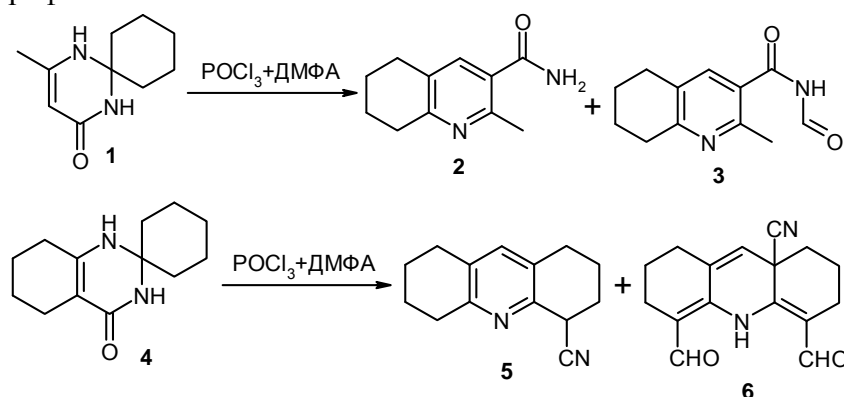
Вещество	4-NP-OH		OxH					
UV-Vis спектроскопия								
	Раствор инд. в-ва	В смеси с OxH	Раствор индивидуального в-ва			В смеси с 4-NP-OH		
pK <sub>a</sub>	7,00	7,01	8,38			8,47		
pK <sub>a</sub> (ср.)	7,00		8,43					
<sup>1</sup> H ЯМР-спектроскопия								
Сигнал	A <sub>NP</sub>	B <sub>NP</sub>	E-форма			Z-форма		
			A <sub>Ox</sub>	B <sub>Ox</sub>	C <sub>Ox</sub>	A <sub>Ox</sub>	B <sub>Ox</sub>	C <sub>Ox</sub>
δ <sub>0</sub> , м.д.	8,19	7,00	8,43	7,49	3,93	7,81	7,55	3,80
Δδ, м.д.	0,14	0,50	0,29	0,15	0,10	0,20	0,13	0,10
pK <sub>a</sub>	7,15	7,19	8,60	8,58	8,56	8,54	8,50	8,51
pK <sub>a</sub> (ср.)	7,17		8,58			8,52		

*Примечания.* Погрешность определения величин pK<sub>a</sub> ± 0,08; δ<sub>0</sub> – положение максимального смещения сигнала в спектре <sup>1</sup>H ЯМР, соответствующая анионной форме; Δδ – величина смещения сигнала; погрешность расчета величин δ<sub>0</sub> и Δδ составляла ± 0,01 м.д.; обозначение групп протонов в соединениях OxH и 4-NP-OH см. на схеме.

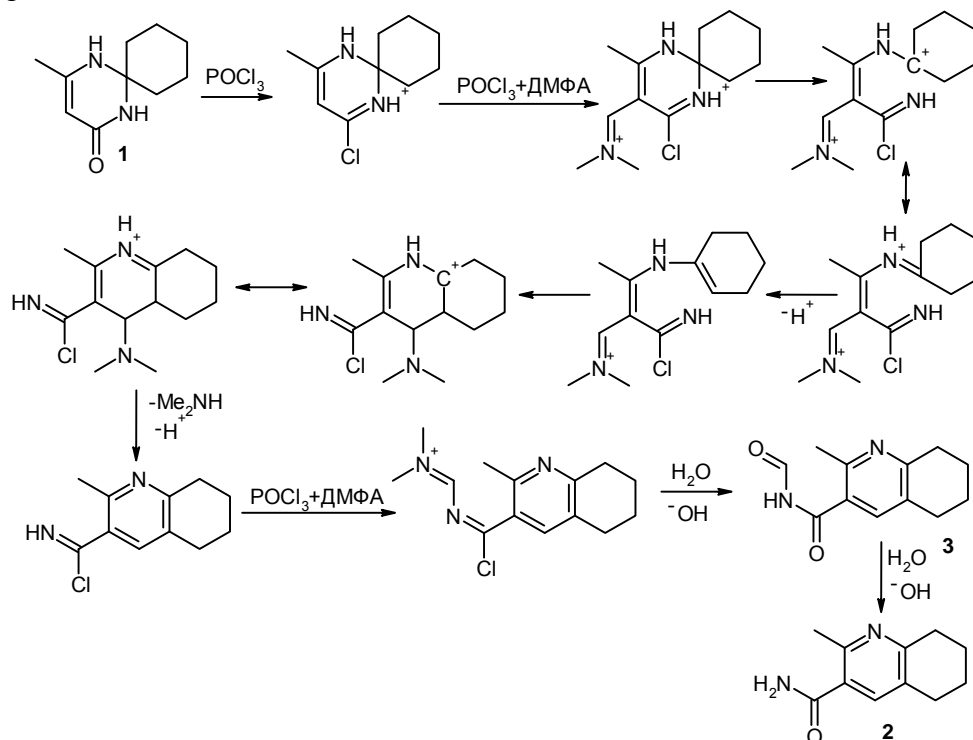
ДОМИНО-РЕАКЦИЯ НА ПРИМЕРЕ 4-МЕТИЛ-1,5-  
ДИАЗАСПИРО[5.5]УНДЕЦ-3-ЕН-2-ОНАМарков В.И., *Фарат О.К.*, Великая Е.В., Варениченко С.А.ГВУЗ «Украинский государственный химико-технологический университет»  
[faratok@mail.ru](mailto:faratok@mail.ru)

Методология домино-реакций в последние время находит все более широкое применение в органическом синтезе. Значительный потенциал имеют, в частности, домино-реакции, в которых на первой стадии происходит атака на субстрат электрофильным агентом приводящая в дальнейшем к рециклизации интермедиатов. Подобного рода перегруппировки, на наш взгляд, следует назвать АЕRОRС-процессом (Addition of the Electrophile, Ring Opening and Ring Closure) по аналогии с уже известным АNRORC.

В нашей работе мы установили, что в реакцию с раскрытием цикла и дальнейшей циклизацией вступают производные замещенных 2-спиропиримидин-4-онов под действием электрофильного агента.



На примере соединения 1 была рассмотрена возможная схема образования продуктов реакции.



В подобного рода перегруппировку вступают и другие производные этого класса.

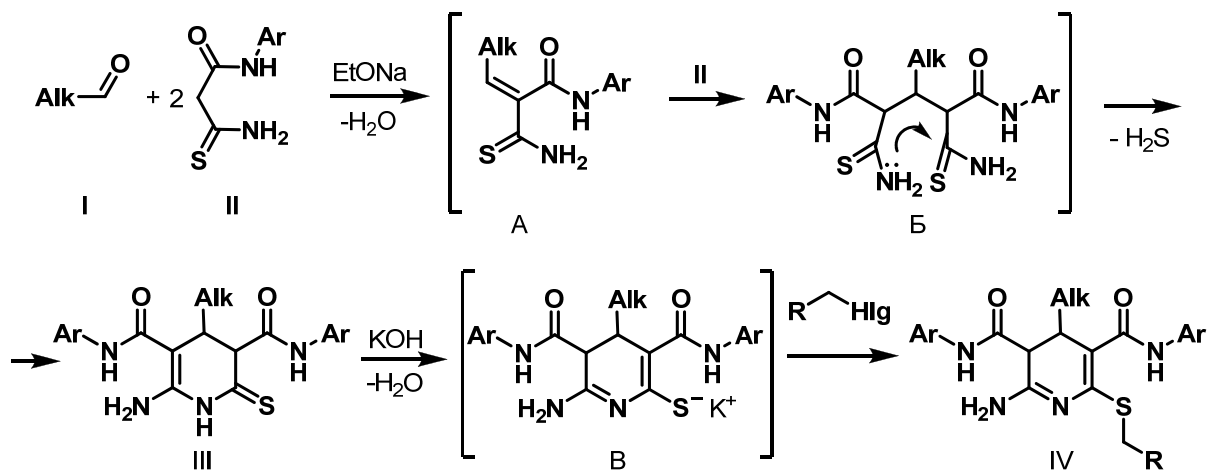
4-АЛКИЛ-3,5-ДИКАРБОМОИЛПИРИДИН-2(1*H*)-ТИОНЫ: СИНТЕЗ,  
СТРУКТУРА И НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА

Феськов И.А., Карпов Е.Н., Дяченко В.Д.

Луганский национальный университет имени Тараса Шевченка

[fesfen@gmail.com](mailto:fesfen@gmail.com)

В докладе рассматривается метод синтеза ранее неизвестных 4-алкил-3,5-дихлоромоил-2(1*H*)-тионов (III) взаимодействием алифатических альдегидов (I) с двукратным избытком 3-амино-3-тиоксопропананилидов (II). Взаимодействие протекает по схеме, включающей тандем нескольких реакций. По-видимому, первоначально образуется алкен (А) как результат реакции Кневенагеля, после чего реализуется реакция Михаэля. Возникший таким путем соответствующий аддукт (Б) хемоселективно трансформируется в результате внутримолекулярной циклоконденсации в конечный продукт (III). Установлено, что целевые продукты образуются независимо от соотношения реагентов (I) и (II). Алкилирование полученных соединений происходит, по-видимому, через образование промежуточной соли (В) и идет региоселективно по атому S, приводя к образованию соответствующих тиоэфиров (IV).



Alk = *i*-Bu, Et, *i*-Pr, Me, *n*-C<sub>6</sub>H<sub>13</sub>, CH(Ph)CH<sub>3</sub>.

Ar = Ph, 2-MeC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, 3-MeC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>.

R = COOEt, Ph, 4-BrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>NHC(O), 4-MeOC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>NHC(O), CH=CH<sub>2</sub>, *n*-C<sub>8</sub>H<sub>17</sub>.

В работе обсуждаются особенности молекулярного и кристаллического строения полученных соединений. А так же возможные пути получения аналогов соединений (III), которые содержат в 3 и 5 положении различные арилкарбомоильные заместители.

Структуры всех полученных соединений подтверждены при помощи ИК-, ЯМР <sup>1</sup>H-, <sup>13</sup>C- и хроматомасс-спекроскопии, а так же рентгеноструктурного анализа.

ПОВЕДЕНИЕ 6-АМИНО-4-АРИЛ-2-ОКСО-1,2-ДИГИДРОПИРИДИН-3,5-ДИКАРБОНИТРИЛОВ В УСЛОВИЯХ РЕАКЦИИ МАННИХА

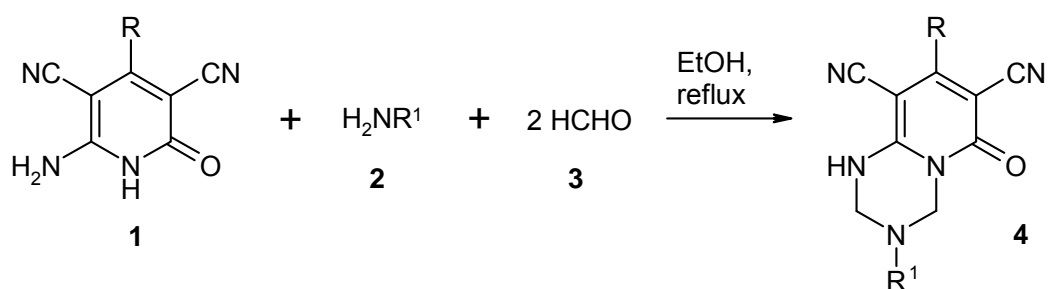
*Хрусталева А.Н., Фролов К.А., Доценко В.В., Кривоколыско С.Г.*

Лаборатория «ХимЭкс», ВНУ имени В. Даля, г. Луганск

[khrustaleva.anastasia@yandex.ru](mailto:khrustaleva.anastasia@yandex.ru)

Реакция Манниха занимает важное место в синтетической органической химии, поскольку открывает широкие перспективы для синтеза гетероциклических соединений. Продолжая исследования в области аминотетрагидропиридинирования O,S,Se,N-содержащих субстратов, мы решили проследить поведение замещенных 4-Аг-6-амино-2-оксо-1,2-дигидропиридин-3,5-дикарбонитрилов (**1**) в условиях данной реакции. Исходные пиридоны **1** были синтезированы многокомпонентной конденсацией малонитрила, ароматических альдегидов и цианоацетамида в кипящем этаноле в условиях основного катализа.

Установлено, что при взаимодействии производных пиридин-2-онов (**1**) с избытком первичного амина (**2**) и избытком формальдегида (**3**) образуются 8-R-3-R<sup>1</sup>-6-оксо-1,3,4,6-тетрагидро-2H-пиридо[1,2-a][1,3,5]триазин-7,9-дикарбонитрилы (**4**), которые представляют собой бледно-желтые кристаллические вещества, растворимые в ацетоне, ДМФА и плохо растворимые в EtOH. Реакция аминотетрагидропиридинирования протекает по эндоциклическому атому азота и аминогруппе производного пиридин-2-она и приводит к замыканию тетрагидро-1,3,5-триазинового цикла, аннелированного с фрагментом исходного пиридина. Выход продуктов реакции составляет 30–77%.



R = Ph, 4-MeOC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>;

R<sup>1</sup> = CH<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>, 4-MeC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, 4-F-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, Me.

Полученные соединения были проверены на чистоту и индивидуальность методом ТСХ. Строение полученных соединений подтверждено спектральными данными (ИК, <sup>1</sup>H ЯМР, <sup>13</sup>C ЯМР).

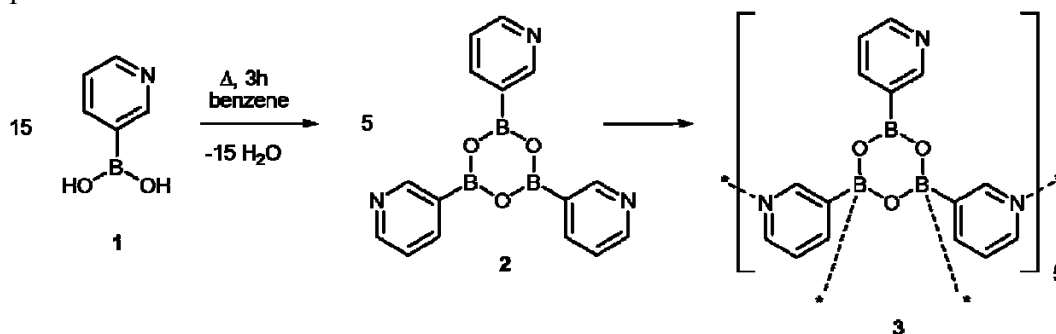
### 3-ПИРИДИНБОРОНОВАЯ КИСЛОТА КАК СТРОИТЕЛЬНЫЙ БЛОК ДЛЯ СОЗДАНИЯ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР

*Широкородова Ю.А., Савсуненко О.О., Карпичев Е.А.*

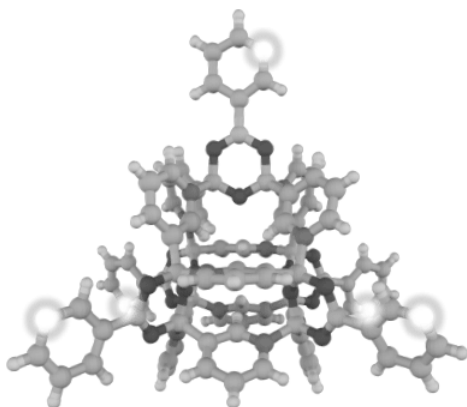
Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко НАНУ  
[savsunenko.sasha@gmail.com](mailto:savsunenko.sasha@gmail.com)

Способность атома азота в гетероциклических соединениях образовывать донорно-акцепторную связь с атомом бора бороновых кислот служит одним из ключевых факторов в создании ковалентных органических сетей – нового перспективного класса наноматериалов.

Пиридин-3-бороновая кислота **1** образует циклический триэфир (бороксин) **2**, который в апротонных растворителях формирует супрамолекулярную полостную структуру **3**, представляющую собой пентадекамер пиридин-3-бороновой кислоты с размером полости 5 Å.



Существование структуры **3** в кристаллах доказано методом РСА, а в растворе – методом  $^1\text{H}$  ЯМР-спектроскопии. Это соединение устойчиво и не диссоциирует на мономеры при нагревании до  $100^\circ\text{C}$  в  $\text{DMSO-d}_6$ , тогда как в  $\text{D}_2\text{O}$  и  $\text{CD}_3\text{OD}$  обнаруживается мономер пиридин-3-бороновой кислоты.



Структурной особенностью полостной супрамолекулярной структуры **3** является наличие пяти (из пятнадцати в целом) атомов азота, не принимающих участие в образовании донорно-акцепторных связей. Это свойство структуры **3** позволяет осуществлять избирательное алкилирование при избытке алкилирующего агента в апротонном растворителе с количественным выходом моноалкилпроизводного (N-алкилпиридин-3-бороксина). Косвенным подтверждением сохранения супрамолекулярной структуры является наличие продукта полного алкилирования (N,N',N''-триалкилпиридин-3-бороксин) в полярных протонных растворителях.

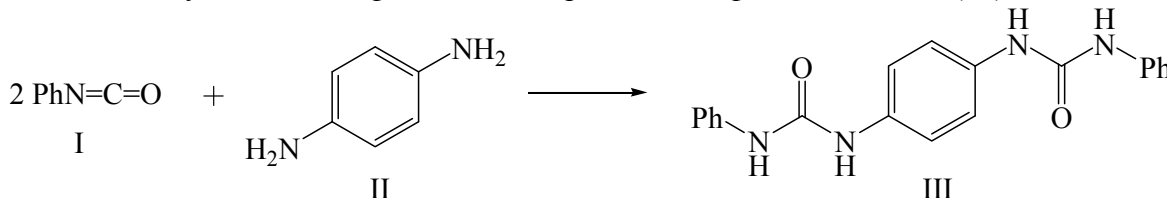
Полученные данные открывают перспективу использования соединений типа **3** для получения самоорганизующихся ковалентных органических сетей. С этой целью были подобраны алкилирующие агенты с двумя реакционными центрами («линкеры») с длиной цепи не более  $15\text{Å}$  (расстояние между атомами азота в структуре **3**) – дийоддекан и дийоддиэтоксиэтан, что позволило избежать алкилирования атомов азота, входящих в состав одного пентадекамера **3**, и, таким образом, объединить супрамолекулярные полостные структуры **3** в ковалентную органическую сеть.

## СИНТЕЗ N,N'-ДИФЕНИЛАМИНОКАРБОНИЛ-1,4-БЕНЗОХИНОНДИИМИНОВ

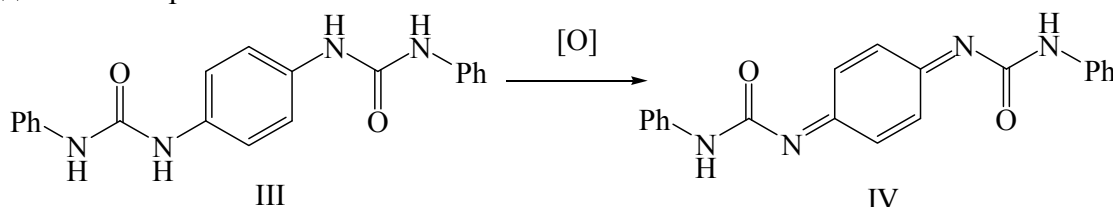
Коновалова С.А., Авдеенко А.П., Юсина А.Л.

Донбасская государственная машиностроительная академия,  
chimist@dgma.donetsk.ua

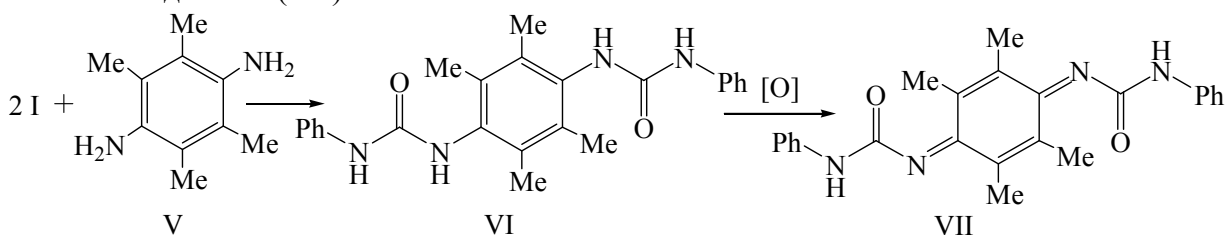
В результате реакции фенилизоцианата (I) с фенилендиамином (II) в среде диоксана получен N,N'-дифениламинокарбонил-1,4-фенилендиамин (III).



Окисление 1,4-фенилендиамина (III) тетраацетатом свинца в бензоле приводит к образованию соответствующего N,N'-ариламинокарбонил-1,4-бензохинондиимина (IV). Попытки провести окисление оксидом серебра(I) в диоксане или хлороформе оказались неудачными. 1,4-Бензохинондиимин (IV) является очень неустойчивым соединением и разлагается в течение нескольких часов.



Ранее установлено, что введение алкильных заместителей в ядро хинониминов значительно повышает их устойчивость, очевидно, из-за снижения окислительно-восстановительного потенциала. На основе тетраметилфенилендиамина (V) и фенилизоцианата (I) в среде диоксана синтезирован N,N'-дифениламинокарбонил-2,3,5,6-тетраметил-1,4-фенилендиамин (VI), окисление которого в хлороформе оксидом серебра(I) дает устойчивый N,N'-дифениламинокарбонил-2,3,5,6-тетраметил-1,4-бензохинондиимин (VII).



Строение синтезированных соединений доказано на основании данных ЯМР <sup>1</sup>H, ЯМР <sup>13</sup>C, ИК- спектроскопии и элементного анализа.

Полученные в настоящей работе 1,4-бензохинондиимины (IV, VII) являются аналогами синтезированных ранее N-ариламинокарбонил-1,4-бензохинонмоноиминов. Установлено, что наличие группы NH между арильным фрагментом и группой CO в N-ариламинокарбонил-1,4-бензохинонмоноиминов существенно образом влияет на их реакционную способность. Так, в результате реакции N-ариламинокарбонил-1,4-бензохинонмоноиминов со спиртами образуются продукты циклизации – 4,7a-диметил-1-арил-7,7a-дигидро-1H-бензимидазол-2,6-дионы.

На основании этого можно предположить, что новые N,N'-дифениламинокарбонил-1,4-бензохинондиимины (IV, VII) также легко будут вступать в реакции циклизации с образованием гетероциклических продуктов.

## AEROSOL TECHNOLOGY: “CRACKLING” COMPOSITIONS DEVELOPMENT

*Bilanov D.V., Malysh A.V., Shersheniuk I.A.*

LLC “Ukrainian aerosols”

[lab@ukraerosol.com](mailto:lab@ukraerosol.com)

Advances in aerosol science and technology have applications in many fields that include, but are not limited to, cosmetics, pharmaceuticals, household products, environment, nanotechnology and advanced materials.

Aerosol is sophisticated unique packaging. The development approach for aerosols must be more complex than in standard non-aerosol products. Standard aerosol container is a pressurized recipient containing:

- A propellant gas or a mixture of propellant gases (these can be compressed gases or liquefied gases);
- One or more solvents;
- Active ingredients dissolved or suspended in the liquid solvent concentrate.

We allocate some main systems to which it is necessary to pay attention when developing aerosol products:

- One compartment systems;
- Bag-in-can systems (or BOV “bag on valve”);
- Piston barrier systems;
- Two component systems.

It is of great research significance and highlights the importance of development one compartment aerosols with benefits of several different systems. One of these aerosols are “crackling” products. Such products is particularly desirable in personal care and cosmetic wherein the continued popping, pinging or bubbling effect produces a tingling sensation which is imparted to the body surfaces and the auditory effect acts as an indicator of the presence and continued action of the product. Heretofore bubbling or effervescent products have generally been limited to product types in which dissolved gases, such as carbon dioxide, are permitted to be released from solutions in which they have been previously dissolved, e.g. carbonated beverages, or where gases are created by chemical reaction during or immediately preceding the time of use of those products, such as for example, by the reaction of an acidic component with a carbonate or bicarbonate and the release of carbon dioxide thereby

The aerosol composition of the present technology has the advantages that a uniform dispersion can be easily formed with using various effective components, that it has an improved fast-drying property and produces an increased foam “crackling” sound and that it does not affect the environment adversely.

## СУЧАСНИЙ СТАН ТА ПЕРСПЕКТИВИ РОЗВИТКУ ЦИРКОНІЄВОЇ ПРОМИСЛОВОСТІ В УКРАЇНІ ТА СВІТІ

*Алексеєнко Г.В., Хлопицький О.О., Макарченко Н.П.*

ДВНЗ “Український державний хіміко-технологічний університет”, м. Дніпропетровськ  
oxidezr@rambler.ru

Цирконій – єдиний рідкісний метал, світове споживання якого обчислюється сотнями тисяч тонн. Більше 85% виробленої цирконієвої сировини використовується у мінеральній формі у вигляді циркону, який містить 65-69%  $ZrO_2$ . Підтверджені запаси цирконію в перерахунку на  $ZrO_2$ , за даними Геологічної служби США оцінюються в 65 млн.т. Найбільші запаси цирконію мають Австралія і ПАР (Південно Африканська республіка), далі слідують Україна і США. У цілому забезпеченість запасами великих розроблюваних розсипних районів відносно невисока і істотне виснаження їх запасів очікується вже у найближчі 15-20 років.

Виробництво цирконового концентрату в усьому світі зростає і, за оцінюваннями дослідної групи «Инфомайн», за підсумками 2008 р. склало близько 1,4 млн.т. Протягом останнього десятиліття виробництво цирконового концентрату збільшувалось (за винятком 1999 р., коли через кризу в Азії знизився попит на цю сировину). Зростаючі ціни й більша потреба в цирконовому концентраті стимулювали пошуки й розвідку нових родовищ і їх освоєння, а також ревізію раніше розвіданих родовищ.

Основними виробниками цирконового концентрату за підсумками у світі є Австралія (38%), ПАР (28%) і США (14,5%). За даними дослідної групи Minerals Yearbook, Китай імпортує колективні концентрати (циркон-ільменіт-рутилові) з Індонезії, Гамбії, Нігерії, В'єтнаму та переробляє на своїх фабриках з метою одержання готових продуктів.

В 2006-2008 рр. в експлуатацію введено 6 розсипних родовищ (з них 4 в Австралії) загальною проектною потужністю 325 тис.т у рік. А за період з 2008 – 2009 рр. (за умови відкриття фабрик з виробництва циркону в Австралії та Африці) виробництво цирконових концентратів збільшилося на 742 тис.т за рік, що становить 53% від рівня 2006 р. Такий приріст потужностей на думку деяких аналітичних агентств призведе до виникнення надлишку цирконового концентрату на світовому ринку. Агентство *Roskill Information Services* прогнозує зниження ціни на цирконовий концентрат до 450 доларів США/т на кінець 2012 р.

Найбільшою світовою компанією з видобутку та збагачення титаноцирконієвих розсипів є Pluka Resources LTD. Кампанія розробляє розсипи Західної Австралії, США (штати Флорида, Джорджія й Вірджинія), Індонезії та інших. Її частка становить 37%

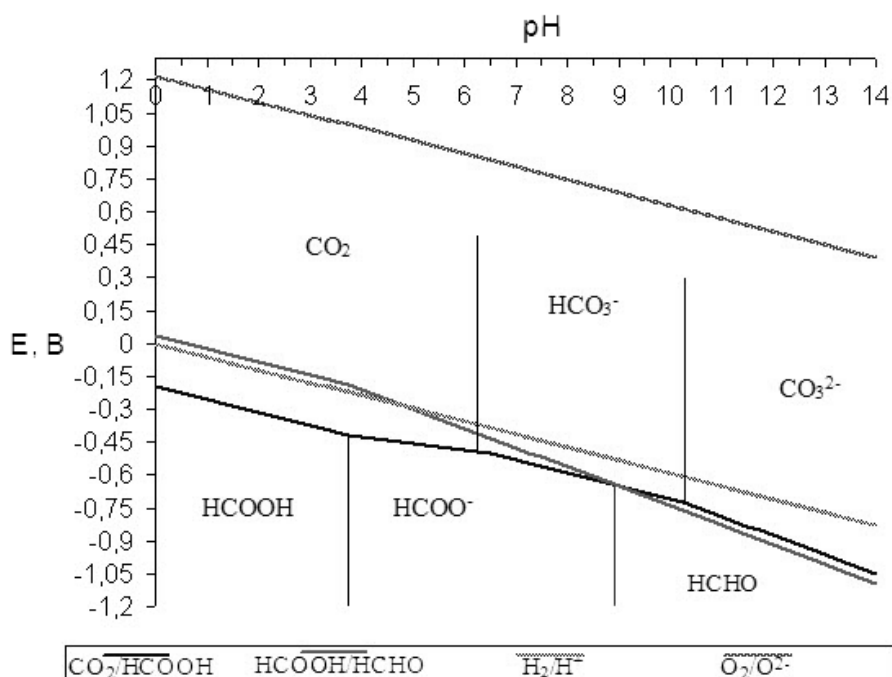
В Україні видобутком, збагаченням та переробкою титаноцирконієвих розсипів займається єдине підприємство ЗАТ «Кримський титан», філія Вільногірський гірничо-металургійний комбінат (ВГМК). За запасами циркону Україна займає третє місце у світі та єдине – у Європі. Однак якість кінцевих продуктів і особливо їх номенклатура, значно нижча світового рівня, що суттєво знижує попит на внутрішньому ринку України і не дає можливості її просування на міжнародний ринок цирконієвої продукції.

## ВЛИЯНИЕ КИСЛОТНОСТИ СРЕДЫ НА ПОЛНОТУ ОКИСЛЕНИЯ ФОРМАЛЬДЕГИДА КИСЛОРОДОМ ВОЗДУХА В ВОДНОМ РАСТВОРЕ

*Альами Д. А. М., Булавин В. И.*

Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт»  
[david.alami@gmail.com](mailto:david.alami@gmail.com)

С целью определения оптимальной кислотности среды для эффективного окисления формальдегида были произведены расчеты, на основании которых построена диаграмма Пурбе. Процедура построения диаграммы включала составление уравнений Нернста для всех возможных полуреакций в системе вода-формальдегид-кислород при различных значениях pH.



Области на диаграмме соответствуют термодинамической устойчивости частиц, а линии отображают границу перехода сопряженных форм. Верхняя линия на диаграмме представляет собой потенциал кислородного электрода при парциальном давлении кислорода  $p(O_2) = 0,21$  атм. Полноту протекания реакции окисления при данном pH определяет разность потенциалов кислородного электрода и данной редоксипары.

Анализ диаграммы позволяет заключить, что при значениях  $pH < 8,5$  формальдегид в большей мере окисляется непосредственно до углекислого газа и гидрокарбонат-ионов, минуя промежуточную муравьиную кислоту. Большей полноте окисления формальдегида способствует повышение pH выше 10, хотя при этом и образуется кинетически более устойчивый к окислению формиат-ион. Дополнительно степень превращения можно увеличить путем вывода продукта из зоны реакции – связывания образующихся в растворе карбонат-ионов (например, ионами кальция). Поэтому наиболее приемлемым реагентом для поддержания щелочной реакции среды и связывания карбонат-ионов является гидроксид кальция.

Данные выводы позволяют заключить, что при очистке сточных вод от формальдегида методом окисления, является целесообразным ввод в систему гидроксида кальция, что увеличивает полноту превращения.

## ПОЛУЧЕНИЕ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ТИТАН (IV) ОКСИДА

*Быканова В.В., Сахненко Н.Д., Герасимова В.В.*

Национальный технический университет “Харьковский политехнический институт”  
[foggymorning1@rambler.ru](mailto:foggymorning1@rambler.ru)

Функциональные материалы на основе титан (IV) оксида находят широкое применение в радиоэлектронной, медицинской и других отраслях современной промышленности благодаря уникальным свойствам: химической и биологической инертности, отсутствию токсичности, высоким антикоррозионным свойствам. Кроме того,  $TiO_2$  обладает фотокаталитической активностью в ряду промышленно важных реакций.

Анализ литературных источников показал, что в качестве фотокатализатора титан (IV) диоксид применяется, в основном, в виде порошка. Однако, это вызывает необходимость в дополнительных технологических операциях по удалению  $TiO_2$  из суспензии и ультразвуковой очистке конечного продукта на заключительных этапах. Кроме того, выход фотохимических реакций, как правило, не превышает 30-40%. Поэтому актуальной является задача получения на носителях с развитой поверхностью функциональных пленок титан (IV) оксида с высокой фотокаталитической активностью.

Целью работы являлось получение из суспензии титан (IV) оксида анатазной модификации пленок на керамическом носителе и исследование фотокаталитических свойств полученных покрытий.

В качестве пористого носителя применялся шамот следующего состава, %:  $SiO_2$  – 55,29;  $Al_2O_3$  – 42,00;  $Fe_2O_3$  – 1,20;  $K_2O$  – 0,70;  $TiO_2$  – 0,50;  $CaO$  – 0,16;  $Na_2O$  – 0,15. Предварительная подготовка носителя включала пропитку шамота водой, обезжиривание, травление и химическую активацию поверхности. Покрытия титан (IV) оксидом получали методом однократной непрерывной пропитки шамота в течение 80 минут суспензиями с различным содержанием  $TiO_2$  с последующим удалением избытка пропиточного раствора и сушкой в течение 100 минут при температуре 100°C.

Фотокаталитическую активность полученных материалов оценивали в модельной реакции окисления красителя метилоранжа в водном растворе с концентрацией 0,02-0,08 г/л.

В результате проведенных исследований синтезированы тонкослойные структуры титан (IV) оксида анатазной модификации на шамоте, которые характеризуются достаточно высокой адгезией и проявляют фотокаталитическую активность в модельной реакции. Установлено, что зависимость фотокаталитической активности от концентрации суспензии  $TiO_2$  носит экстремальный характер с максимумом в области содержания твердой фазы 30% масс. Степень фотокаталитической деградации метилоранжа на таких покрытиях в течение первых 20 минут составляет 73%, что превышает в 1,5 раза данные, известные из литературных источников.

## БИОДИЗЕЛЬНОЕ ТОПЛИВО ИЗ КУРИННОГО ЖИРА

*Везель С.В.,* Дубинин А.Ю., Елизарьева Ю.А.

Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского

*Pyrolis\_Chem@mail.ru*



Биодизель - топливо на основе растительных или животных жиров (масел), полученных в результате реакции переэтерификации. В отличие от обыкновенного дизельного, топливо из животных жиров экологически нетоксично, разлагается в естественных условиях, не содержит канцерогенного бензола, и в низких концентрациях содержит серу. Выхлопы от биодизеля низкие по сравнению с обыкновенным дизельным топливом. Агентство по охране окружающей среды и Министерство энергетики США назвали биодизель, на основе животных жиров, единственным видом альтернативного горючего, соответствующего требованиям по защите атмосферного воздуха и окружающей среды.

В процессе мясо- и птицепереработки образуется большое количество жировых отходов, которые часто организация не может реализовать и/или переработать. Поэтому была поставлена задача переработки отходов птицефабрики и получения метиловых эфиров жирных кислот, из куриного жира, реакцией переэтерификации исходного сырья метиловым спиртом в присутствии катализатора КОН становится еще более актуальной.

Сырьём для производства биодизеля являлся куриный жир, поставленный на производство из птицефабрики. Кислотное число поставляемого сырья колебался в интервале 7,1-7,5 мг КОН/г жира. Качественный состав куриного жира - это в основном триглицериды кислот: линоленовой около 38%, олеиновой 33%, пальмитиновой 18 % стеариновой 5%. Куриный жир при температуре 18-20<sup>0</sup>С загружался в реактор. В рубашке реактора находилась горячая вода, подогреваемая на котле. Котёл работал на техническом глицерине, полученном в результате производства биодизеля, что является экономически выгодно. Затем включалась мешалка, с числом оборотов 120 в минут и подавался раствор метилата калия 10,5% по массе. В реакторе имеется весло для более интенсивного перемешивания гетерогенной реакции. Температура процесса, при котором происходило интенсивное перемешивание реакционной массы 60-70<sup>0</sup>С. Через каждые 30 мин после смешивания жира и метилата калия, отбирали пробы по 100 мл, до постоянного объёма глицериновой фракции. Под конец реакции объём глицерина колебался от 23 до 24 мл. Время протекания реакции при 60<sup>0</sup>С составило 125-130 минут, а при 70<sup>0</sup>С 55-60 минут. После окончания реакции переэтерификации, включали вакуумный насос для полного извлечения избытка метанола из реакционной смеси т.к. он приводит к быстрому износу некоторых частей топливной системы. Выход биодизеля составил 73%, а глицериной фракции 27%.

По результатам лаборатории биодизель имеет следующие показатели: цвет – светло-жёлтый, плотность при 20<sup>0</sup>С =893 кг/м<sup>3</sup>, цетановое число 52, Содержание этиловых эфиров жирных кислот 96,8 %, Температура вспышки в закрытом тигле 95<sup>0</sup>С. Плотность глицерина при 20<sup>0</sup>С=1026 кг/м<sup>3</sup>, цвет – тёмно-коричневый.

Переработка животных жиров с получением вторичных энергоресурсов является необходимой для А.Р. Крым. Полученный биодизель из куриного жира зарекомендовал себя в качестве альтернативной замены обычного дизеля для сельхозтехники. Глицерин в качестве сырья для получения глицерина, калийного удобрения, а также жидкого топлива для котлов.

**ДОСЛІДЖЕННЯ УМОВ НАДАННЯ ШЛАМУ З ВИРОБНИЦТВА КАЛЬЦІЄВОЇ СЕЛІТРИ ВЛАСТИВОСТЕЙ МІНЕРАЛЬНОГО ДОБРИВА**

*Власян С.В., Біда О.О., Герасименко Л.В., Шестозуб А.Б., Волошин М.Д.*

Дніпродзержинський державний технічний університет

Svetlana\_08.08.87@mail.ru

На основі результатів досліджень хімічного складу шламу з виробництва кальцієвої селітри зроблено висновок про наявність в ньому кількості зв'язаного азоту достатньої для застосування як мінерального добрива. Для дослідження технологічних умов надання шламу властивостей характерних більшості мінеральних добрив виконані дослідження з гранулювання та сушки шламу.

З метою створення добрива пролонгованої дії гранули виготовляли розміром більше ніж 4 мм. Вологий шлам 40 - 45% завантажували у прес форму накладали решітку з отворами діаметром 5 мм і продавлювали через неї шлам зусиллям 0,14 МПа, зрізали «макарони» довжиною від 8 до 10 мм. Отримані гранули зважували і завантажували у лабораторну барабанну сушарку зі склянною трубою діаметром 80 мм. Джерелом тепла слугував закріплений на штативі електрофен потужністю 2 кВт. Сушка гранул проводилась протягом 1, 3 і 5 годин. Результати досліджень наведені у таблиці 1.

Таблиця 1- Технологічні параметри процесу сушки

№ досліджу	Час перебування у барабані добрива, год	Температура в барабані, °С	Вологість висушеного добрива, %
1	1	47	27,75
2	3	50	22,80
3	5	55	12,71
4	1	65	19,33
5	3	80	6,57
6	5	100	2,81

Як встановлено експериментально, істотними чинниками, що впливають на швидкість сушіння шламу і формування структури гранул є температура і час контактування добрива з гарячим повітрям у барабанній сушарці.

Сформовані та висушені гранули добрива використовували для визначення міцності гранул, кута природного нахилу, насипної щільності, розсипчастості і ін. характеристик, необхідних для проектування промислової установки отримання мінерального добрива зі шламу виробництва кальцієвої селітри.

Таким чином, експериментально відтворені умови надання азотовмісному шламу виробництва кальцієвої селітри характеристик товарного мінерального добрива та отримані необхідні дані для проектування промислової установки на ПрАТ «Хімдивізіон» м. Дніпродзержинськ.

## РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ РЕДИСПЕРСИОННЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ПОРОШКОВ - ДОБАВОК НА СВОЙСТВА ГИПСОВЫХ ВЯЖУЩИХ

Деревянко В.Н., Дрозд А.П., Шаповалова О.В., Гонайца В.А.

ГВУЗ «Приднепровская государственная академия строительства и архитектуры»  
[derev@mail.pgasa.dp.ua](mailto:derev@mail.pgasa.dp.ua)

Разработка редисперсионных полимерных порошков вызвана необходимостью расширения ассортимента отечественных добавок для производства сухих строительных смесей и, как результат, повышение их эксплуатационных свойств, снижение конкурентоспособности. Основой, одной из таких добавок, может быть применение поливинилацетатной дисперсии (ПВАД), которая широко используется для улучшения свойств растворов и бетонов.

Проблемой использования поливинилацетатов, в качестве полимерной добавки при производстве сухих строительных смесей, является отсутствие их в сухом состоянии. В данной работе сделана попытка разработки состава добавки на основе ПВАД в сухом состоянии для замедления сроков схватывания сухих гипсовых смесей.

Известные способы характеризуются сложной технологией изготовления, низкой производительностью и значительными потерями тепловой энергии.

Наиболее близким по технической сути к предлагаемому методу есть способ изготовления редисперсионных полимерных порошков, которые получают диспергированием полимера, смешиванием с водорастворимым агентом и сушкой эмульсии, вследствие чего создается защитная пленка на поверхности полимера и не дает им возможности слипаться.

Основой метода является задача усовершенствования способа производства редисперсионных полимерных порошков, в котором за счет особенностей выполнения основной технологической операции достигается исключение процесса сушки, повышение качества готового продукта и снижение его себестоимости.

Для получения РП (добавок), которые обеспечили бы замедление сроков схватывания гипсовых вяжущих и, как результат сухих строительных смесей на основе гипса, применяли негашеную известь, быстрогасящуюся, высокоэкзотермичную и поливинилацетатную дисперсию 50% концентрации (ПВАД).

Влияние добавок РП, на основе поливинилацетатной дисперсии, на свойства гипсовых вяжущих определяли по основным свойствам, определяющих эффективность добавок: нормальной густоте, срокам схватывания, пределу прочности при изгибе и сжатии. Содержание добавки (РП) варьировали в пределах от 1% до 3%.

Как показывают результаты исследований, введение в состав гипсовой смеси добавки улучшает основные свойства вяжущего. Увеличиваются сроки схватывания, уменьшается водопотребность. Однако увеличение количества вводимой добавки сверх 1,0% ухудшает прочностные показатели гипсовой строительной смеси.

Для повышения эффективности добавки следует увеличить содержание поливинилацетатной эмульсии в добавке в сухом виде.

**БІЛИЙ ЦЕМЕНТ НА ОСНОВІ ЗБАГАЧЕНОЇ СИРОВИНИ УКРАЇНИ***Дорогань Н. О., Черняк Л.П.*Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»  
[zaya\\_20082008@ukr.net](mailto:zaya_20082008@ukr.net)

Білий цемент відзначається важливим поєднанням фізико-технічних і декоративних властивостей, що дозволяє віднести його до будівельних матеріалів ХХІ століття. Проте виробництво білого цементу потребує застосування сировини з обмеженим вмістом оксидів заліза та виконання спеціальних операцій при випалі та охолодженні, котрі суттєво ускладнюють технологічний процес. Відновлення виробництва білого цементу в Україні та збільшення обсягів його використання у вітчизняному будівництві є актуальною задачею.

Об'єктами дослідження в даній роботі стали сировинні суміші для виготовлення білого портландцементного клінкеру на основі збагачених сировинних матеріалів родовищ України. В якості карбонатного компонента використовували збагачену новгород-сіверську крейду, як глинозем- та кремнеземвмісні компоненти, збагачений каолін КС-1 і кварцовий пісок.

Новгород-Сіверське родовище крейди є одним з найбільших в Європі. Крейда ММС-1, основним породотворюючим мінералом якої кальцит  $\text{CaCO}_3$ , відрізняється високими показниками білизни та дисперсності. Первинний каолін Глуховецького родовища містить після збагачення близько 90 мас.% каолініту  $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ . Кварцовий пісок родовища Харківської обл. після видобутку, подрібнення і збагачення містить незначні домішки оксидів заліза і глини.

Порівняння створених на основі вказаної сировини сумішей із виробничою сумішшю на основі крейди Здолбунівського родовища і полімінеральної глини дозволило виявити відмінності по структуроутворенню та показникам властивостей.

Встановлено, що коагуляційна структура шламу АМ2 білого цементу на основі досліджуваної сировини відрізняється від виробничої проби Zd меншим розвитком деформацій  $\varepsilon_0'$ ,  $\varepsilon_2'$  і  $\varepsilon_1'$ τ, які становлять відповідно  $0,29 \cdot 10^8$ ,  $0,14 \cdot 10^8$  і  $4,45 \cdot 10^8$  проти  $1,07 \cdot 10^8$ ,  $3,57 \cdot 10^8$  і  $66,66 \cdot 10^8$ . Кінетична стійкість, обумовлена коефіцієнтом  $K_u = \varepsilon_0' / C$  (де C - концентрація дисперсної фази), у шламі АМ2 істотно більше і складає 0,10 проти 0,02 для проби Zd. Проба шламу АМ2 відрізняється від Zd значно більшими величинами шведівської  $\eta_1$  і бінгамівської  $\eta_m^X$  в'язкості і умовного модуля деформації  $E_\varepsilon$ , що свідчить про більшу кількість контактів, розвитку сил молекулярної взаємодії і енергії зв'язку частинок дисперсної фази при їх рівній загальній концентрації. Наслідком цього є збільшення статичної  $R_{k1}$  і динамічної  $R_{k2}$  меж текучості, кінетичної стійкості. Отримані експериментальні дані показують, що при рівній концентрації дисперсної фази відмінності структурно-механічних і реологічних показників визначаються, головним чином, відмінністю мінералогічного складу порівнюваних сировинних сумішей - підвищенням концентрації каолініту в разі проби АМ2.

За даними термічного і рентгенофазового аналізу мають місце суттєві відмінності у ступені інтенсивності руйнування при випалі ґраток вихідних породотворюючих мінералів (кальциту і каолініту) та утворення при взаємодії продуктів руйнування ( $\text{CaO}$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{SiO}_2$ ) кристалічних фаз і склофази.

Комплексне використання збагачених тонкодисперсних компонентів у складі сировинної суміші сприяє підвищенню стійкості шламу, що має позитивне практичне технологічне значення, а мінімізація залізовмісних фаз клінкеру обумовлює підвищення білизни цементу.

## О МЕТОДАХ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ОГНЕУПОРОВ

*Дуникова Е. А.*, Питак Я. Н.

Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт»

Теплопроводность является одной из важнейших характеристик огнеупоров, определяющей в значительной мере область применения и расход огнеупоров, эффективность работы тепловых агрегатов, расход топлива в них и др.

Разработанные методы определения теплопроводности можно подразделить на две группы: стационарные методы, основанные на стационарном распределении температур в телах простой формы (метод пластины, метод цилиндра, метод шара, метод эллипсоида), и нестационарные методы, характеризующиеся большим разнообразием граничных условий и измерительных схем (метод горячей проволоки, метод периодического нагрева, методы монотонного нагрева). Каждый из методов характеризуется специфическими особенностями, определяющими условия его применения, неопределенность измерений и др. Поэтому методы, применяемые для определения теплопроводности различных материалов и, в частности, огнеупоров, унифицированы и стандартизованы.

Стандарты на методы определения теплопроводности огнеупоров:

- международный стандарт ISO 8894-1:1987 «Refractory materials – Determination of thermal conductivity – Part 1: Hot-wire method (cross-array) (Материалы огнеупорные. Определение теплопроводности. Часть 1. Метод горячей проволоки (крестообразной))»; метод применим к огнеупорным материалам, теплопроводность которых составляет менее 1,5 Вт/(м·К) и температуропроводность – менее  $10^{-6}$  м<sup>2</sup>/с;
- международный стандарт ISO 8894-2:2007 «Refractory materials – Determination of thermal conductivity – Part 2: Hot-wire method (parallel) (Материалы огнеупорные. Определение теплопроводности. Часть 2. Метод горячей проволоки (параллельной))»; метод применим к плотным и теплоизоляционным формованным изделиям и к измельченным или гранулированным материалам с теплопроводностью менее 25 Вт/(м·К);
- европейский стандарт EN 993-14:1998 «Methods of testing dense shaped refractory products – Part 14: Determination of thermal conductivity by the hot-wire (cross-array) method»; этот метод аналогичен методу в соответствии с ISO 8894-1:1987;
- европейский стандарт EN 993-15:1998 «Methods of test for dense shaped refractory products – Part 15: Determination of thermal conductivity by the hot-wire (parallel) method»; этот метод аналогичен методу в соответствии с ISO 8894-2:2007.

Действующие в Украине стандарты на методы определения теплопроводности огнеупоров:

- ГОСТ 12170-85 «Огнеупоры. Стационарный метод определения теплопроводности»; метод применим к огнеупорным изделиям с теплопроводностью от 0,13 Вт/(м·К) до 15 Вт/(м·К) и реализуется при стационарном одномерном температурном поле в плоском образце и при температуре на горячей стороне образца от 400 °С до 1350 °С;
- ГОСТ 23619-79 «Материалы и изделия огнеупорные теплоизоляционные муллитокремнеземистые стекловолокнистые. Технические условия»; в этом стандарте описаны метод определения теплопроводности огнеупорных плит и вставок (п. 5.7.1) и метод определения теплопроводности огнеупорного картона (п. 5.7.2).

Значение теплопроводности огнеупоров особенно возросло в последние годы в связи с интенсификацией металлургических и технологических процессов и необходимостью разработки новых более эффективных огнеупоров, а также в связи с необходимостью получения более точных данных температурной зависимости теплопроводности применяемых огнеупорных материалов для конструирования и эффективной эксплуатации современных тепловых агрегатов.

**ОРГАНІЗАЦІЯ ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО РЕЦИКЛІНГУ ПСЕВДОСПЛАВІВ ВОЛЬФРАМУ**

*Єрмоленко І.Ю., Андрощук Д.С.*

Національний технічний університет "Харківський політехнічний інститут"

[kirilesha72@yandex.ru](mailto:kirilesha72@yandex.ru)

Робота присвячена організації електрохімічного рециклінгу псевдосплавів ВК із застосуванням нестационарного електролізу і подальшим використанням напрацьованого електроліту для одержання каталітичних покриттів сплавами Co-W-Fe.

За результатами попередніх досліджень встановлено механізм анодного окиснення псевдосплаву ВК10 у полілігандному електроліті на основі калію дифосфату і натрію цитрату, обґрунтовано кількісний склад електроліту та визначено вплив параметрів імпульсного режиму (амплітуди струму (60–75 А/дм<sup>2</sup>), тривалості імпульсу/паузи (10–50/10–50 мс)) на швидкість розчинення сплаву, вихід за струмом, склад електроліту, що утворюється.

Анодне розчинення сплаву ВК10 в режимі гальваностатичних уніполярних імпульсів із застосуванням потенціостату ПІ-50-1.1 з програматором ПР-8. Катодне осадження сплаву Co-W-Fe з напрацьованого електроліту здійснювали від стабілізованих джерел постійного струму Б 5-44 і Б 5-50. із застосуванням двох типів радіально розташованих анодів – нерозчинного з нержавіючої сталі марки Х18Н10Т та розчинного – з попередньо обробленого протягом 2 годин бруску зі сплаву ВК. Елементний склад зразків визначали рентгенофлуоресцентним аналізом.

За результатами досліджень запропонована схема рециклінгу електрохімічним методом ( $j \neq 0$ ) за маршрутом  $S_1$  (рис. 1), яка принципово відрізняється від відомих можливістю електролітичного осадження в одному технологічному процесі покриттів сплавами  $[W-M]_{кр}$  з наперед заданими функціональними властивостями, широкий спектр яких може задовольняти потреби у зносо- та корозійностійких, каталітично активних та інших матеріалах.

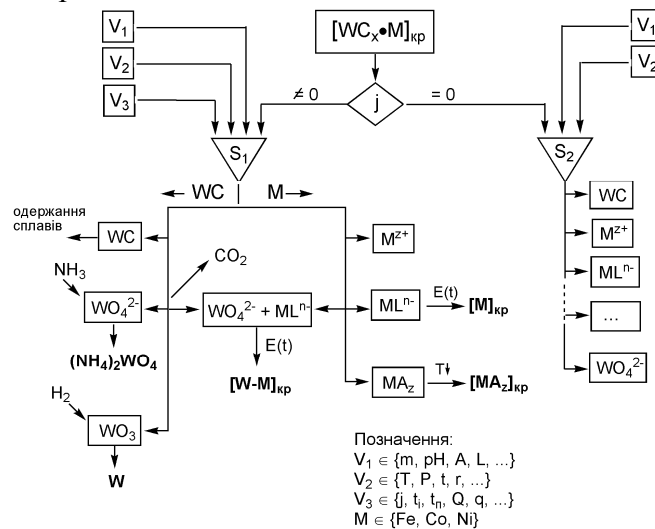


Рис. 1 Принципова схема рециклінгу вольфрамвмісних сплавів  
 $V_1$  – хімічний склад реакційної суміші;  $V_2$  – технологічні параметри процесу;  
 $V_3$  – параметри електролізу;  $S_1$  – електрохімічний спосіб переробки;  
 $S_2$  – хімічний спосіб переробки

Тестування електролітичних покриттів сплавом Co-W-Fe, одержаних з напрацьованого електроліту, довели їх високу корозійну стійкість, каталітичну активність у реакції окиснення карбону (II) оксиду, мікротвердість та магнітні властивості на рівні магнітом'яких матеріалів.

## ОДЕРЖАННЯ ОРГАНО – МІНЕРАЛЬНОГО ДОБРИВА З ОСАДІВ СТІЧНИХ ВОД ТА ВЕРХНЬОГО ШАРУ ЛІСОВОГО ҐРУНТУ

*Клименко І.В.*, Волошин М.Д., Іванченко А.В.

Дніпродзержинський державний технічний університет

[irisha.klimencko@yandex.ru](mailto:irisha.klimencko@yandex.ru)

Сучасне сільськогосподарське виробництво неможливо уявити без використання мінеральних добрив. Застосування добрив дає можливість збільшити врожайність і поліпшити якість продукції рослинництва. Підвищення врожайності сільськогосподарських культур досягають за рахунок внесення органо – мінерального добрива. Осади стічних вод можливо використовувати в якості складової органо – мінерального добрива, адже мул зі станцій очищення стічних вод являє собою найважливіше джерело органічних, поживних і біологічно активних речовин.

Таким чином, важливим науковим завданням є пошук нової технології одержання органо – мінерального добрива.

Для одержання органо-мінерального добрива використовували ущільнений активний мул та подрібнений верхній шар лісового ґрунту, який попередньо був насичений фосфатами. З метою підвищення якості органо – мінерального добрива, а саме збільшення концентрації фосфатів, активний мул диспергували з інтенсивністю 400 об/хв протягом 0,5 хв. Саме при таких параметрах диспергування концентрація фосфатів у вихідній сировині збільшилась на 31,5 %. В результаті анаеробного зброджування вихідних компонентів при температурі 33 °С отримали органо-мінеральне добриво, вихідний склад якого представлено в таблиці 1.

Таблиця 1 – Склад органо-мінерального добрива (в перерахунку на суху речовину)

Елемент	Концентрація, %	Елемент	Концентрація, %	Елемент	Концентрація, %
SiO <sub>2</sub>	0,117	ZnO	0,674	CuO	0,177
P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	2,035	BrO	0,205	TiO <sub>2</sub>	0,492
SO <sub>3</sub>	0,199	SrO	0,155	MnO <sub>2</sub>	1,417
Cl	0,447	ZrO	0,036	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	14,419
K <sub>2</sub> O	59,023	MoO <sub>3</sub>	0,029	ReO	0,071
CaO	20,436	SnO	0,069		

Згідно таблиці 1 вміст важких металів в отриманому ОМД відповідає санітарно – гігієнічним нормативам та не перевищує гранично допустимих концентрацій металів у ґрунті.

В таблиці 2 представленні вихідні компоненти органо – мінерального добрива, одержаного з осадів міських стічних вод лівобережних очисних споруд м. Дніпродзержинська потужністю 20 000 м/добу.

Таблиця 2 - Вихідні компоненти органо – мінерального добрива

Компонент	т/добу	т/рік	Вміст у ОМД, %
Ущільнений надлишковий активний мул	3,4	1241	4,5
Верхній шар лісового ґрунту, насичений фосфатами	72	26280	95,5

**ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕКТРОЛИЗА НА СОСТАВ ТРОЙНЫХ СПЛАВОВ**

*Козяр М. А., Гапон Ю. К., Глушкова М. А., Ведь М. В., Зюбанова С. И.,  
Каракуркчи А. В.*

Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт»  
kozyar.marina@mail.ru

В последнее время значительное внимание исследователей привлекает синтез новых материалов с повышенными физико-механическими и физико-химическими свойствами, в частности износо- и коррозионной стойкостью. Перечисленные свойства в определенной степени присущи электролитическим сплавам металлов подгруппы железа с вольфрамом и молибденом, чем и объясняется заинтересованность в их получении. Управление составом покрытия, а, значит, и свойствами сплавов осуществляется варьированием концентраций компонентов электролита и режимов электролиза. Изучение влияния параметров электроосаждения на структуру и свойства осадков Co-Mo и Co-W показало, что при одинаковой плотности тока содержание тугоплавких компонентов в сплаве при импульсной поляризации выше в сравнении со стационарным электролизом. Это является одним из преимуществ программированного электролиза и обуславливает перспективы его использования в практической гальванотехнике, а установление такой взаимосвязи предопределило направление исследования.

Сплав Co-Mo-W осаждали из комплексного полилигандного электролита, в который, кроме соединений сплавообразующих металлов (сульфат кобальта, вольфрамат и молибдат натрия), вводили лиганды (цитрат натрия, хлорид аммония) и компоненты, которые обеспечивающие увеличение электропроводности, достижение необходимого диапазона pH (сульфат и гидроксид натрия) и буферирование раствора (борная кислота). Катодную плотность тока варьировали в интервале 4-12,5 А/дм<sup>2</sup>, продолжительность импульса 1-20 мс, длительность паузы 2-20 мс. Соотношение длительности импульса и паузы изменяли в зависимости от требований, предъявляемых к покрытиям, их назначения и условий эксплуатации.

Электроосаждение гальванического сплава Co-Mo-Zr проводили из полилигандного электролита униполярным импульсным током. Значение pH электролита доводили до 8 – 9 введением гидроксида натрия, контролировали и корректировали в ходе экспериментов. Покрытия осаждали на подложки из медной фольги и стали 3, обработка которых включала стандартную процедуру шлифования, обезжиривания, промывок и последующего травления в смеси азотной и серной кислот.

Получены покрытия сплавом кобальт-молибден-вольфрам, компонентный состав которых в интервале варьирования параметров электролиза изменяли в пределах, % масс.: кобальт 67,5-74,8, молибден 10,4-18,8, вольфрам 11,4-15,7, выход по току сплава составляет 65-99,3%.

Впервые соосаждение редкоземельного элемента в сплав Co-Mo-Zr стало возможным благодаря использованию импульсного режима электролиза. Варьирование плотности тока и частоты поляризующих импульсов позволило формировать светлые и блестящие покрытия толщиной 1–2 мкм с содержанием сплавообразующих компонентов, % масс.: кобальт 77,2-84,8, молибден 13,7-22,4, цирконий 0,258-2,06, выход по току сплава составил 30 – 99 %.

Результаты исследований позволяют сделать вывод, что для управления составом покрытий сплавом Co-Mo-W и Co-Mo-Zr целесообразно использовать амплитудно-временные параметры импульсного электролиза.

## ОЦЕНКА КАЧЕСТВА ПОЛИМЕРНОГО КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА ШАХТНЫХ КОНВЕЙЕРНЫХ ЛЕНТ ПО ПОКАЗАТЕЛЯМ ПОЖАРООПАСНОСТИ

*Колосова М.А., Пастернак Е.Н., Бондаренко А.В.\**

Донецкий национальный университет

\*Научно-исследовательский институт горноспасательного дела и пожарной безопасности “Респиратор”, г. Донецк

Оценка качества конвейерных лент (КЛ) по параметрам пожароопасности имеет существенное значение для безаварийной работы угольных шахт. В первую очередь это связано с тем, что общая их протяженность на шахтах страны составляет более 2000 км.

В данном сообщении будут рассмотрены такие показатели пожароопасности, как определение группы горючести веществ и материалов, горючести КЛ в пламени газовой горелки, кислородного индекса (КИ).

По группе горючести материал КЛ относится к категории трудногорючих материалов, что отражает как общемировую тенденцию производителей, так и требования украинских нормативных документов.

Для испытаний горючести в пламени горелки готовили по шесть образцов КЛ с обкладками (тип А) и без обкладок (тип Б). В качестве показателя горючести фиксировали суммарное время самостоятельного горения после удаления пламени шести образцов типа А и Б и максимальное время горения одного из шести образцов типа А и Б ( $\tau$ , с). Полученные результаты представим в виде статистического распределения доли повторяемости ( $w$ , %) образцов КЛ по горючести в пламени газовой горелки. Пример такой обработки результатов для максимального времени горения одного из шести образцов типа А и Б показан на рисунке.

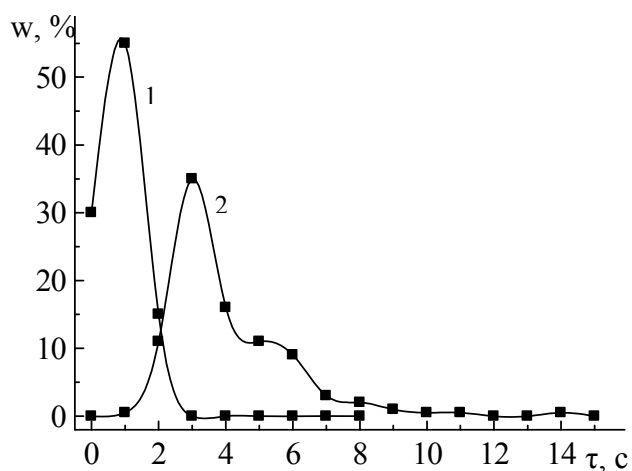


Рис. Данные о горении материала КЛ в пламени газовой горелки с обкладками (1) и без обкладок (2)

Как видно из рисунка горение образцов КЛ типа А прекращается практически к третьей секунде. В тоже время при переходе к образцам типа Б наблюдается сдвиг центра распределения в сторону увеличения времени самостоятельного горения, но превышения нормативного значения (15 с) при этом не зафиксировано. Наличие такой тенденции указывает на возможность снижения показателей пожаробезопасности в процессе эксплуатации при абразивном воздействии перевозимых грузов, трении и т.д. Следовательно, задача для производителей КЛ - обеспечить постоянство характеристик

пожаробезопасности на весь гарантированный период их эксплуатации.

Аналогичным образом был проведен анализ распределения КЛ по величине кислородного индекса (КИ). Результаты статистического анализа показывают, что центр распределения КЛ по КИ находится в интервале 33 – 35 %. Для сравнения нормативные значения КИ в Украине – 27 %, в России – 30 %.

Таким образом, проведенная оценка качества конвейерных лент по показателям пожароопасности показала, что они гарантируют их высокие эксплуатационные характеристики.

**БІОАКТИВНІ КАРБОНАТВМІЩУЮЧІ КАЛЬЦІЙСИЛІКОФОСФАТНІ  
СКЛОКРИСТАЛІЧНІ МАТЕРІАЛИ***Коник О.М., Щадрина Г.М., Саввова О.В.*

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»

[savvova\\_oksana@ukr.net](mailto:savvova_oksana@ukr.net)

На сьогоднішній день широко відомі карбонатвміщуючі композиційні матеріали на основі хітозану та гідроксіапатиту з високими антибактеріальними властивостями та біосумісністю, які у якості ортопедичних матеріалів використовуються в ортопедії. В щелепно-лицьовій імплантології при нанесенні на титанові імплантати хітозан сприяє прискоренню остеоінтеграції. Перспективність використання біоактивних карбонатвміщуючих кальційсилікофосфатних склокристалічних матеріалів для кісткового ендопротезування пов'язана з необхідністю одержання біосумісних імплантатів з високою біологічною сумісністю та механічними властивостями відповідними до складу натуральної кістки.

При створенні композиційних склокристалічних матеріалів з метою імітації кісткової тканини до складу кальційсилікофосфатної скломатриці додають карбопатит, як окремий матеріал, або вводять його в структуру ГАП шляхом часткової заміни гідроксильних і фосфатних груп карбонатами..

З метою синтезу біоактивного карбонатвміщуючого склокристалічного матеріалу були обрані кальційсилікофосфатні стекла, які відзначається інтенсивною кристалізацією ГАП, та хітозану при співвідношенні 90/10. Термообробка матеріалів була проведена при температурі 1050 °С з витримкою 0,5 год.

За даними ІЧ-спектроскопії у термооброблених зразках спостерігається присутність карбонатних іонів в апатитовій складовій склокристалічного матеріалу. Утворення і міграція карбонатних іонів пов'язана з піролітичним розкладанням хітозану і термоактивованим захопленням продуктів цього розкладання кристалічною ґраткою апатиту. В мінеральній частині композиції групи  $\text{CO}_3^{2-}$  спостерігаються як валентні антисиметричні коливання ( $\nu_{\text{as}}$ ) містків С—О в області 1600 – 1400  $\text{cm}^{-1}$  та деформаційні коливання ( $\sigma$ ) містків С—О—С в області 880 – 870  $\text{cm}^{-1}$ . Абсорбційні максимуми містків С—О—С в області 1152  $\text{cm}^{-1}$  і містків С—О в області 1088, 1035  $\text{cm}^{-1}$  характеризують його сахаридну структуру. Коливання С—О в області 1318 та 1384  $\text{cm}^{-1}$  відносяться до груп — $\text{CH}_2$ —ОН. Групи  $\text{CO}_3^{2-}$ , які локалізовані в позиціях аніону  $\text{PO}_4^{3-}$  ідентифікуються в області 1455, 1410, 875  $\text{cm}^{-1}$  і відносяться КАП типу В, заміна ОН груп на групи  $\text{CO}_3^{2-}$  спостерігаються в області 1450 – 1460, 1540 – 1570  $\text{cm}^{-1}$  і відносяться до КАП типу А. В дослідних матеріалах спостерігаються коливання  $\nu_{\text{as}}$  містків Р—О в області 1092 – 1090, 1049 – 1047  $\text{cm}^{-1}$  та  $\nu_s$  Р—О в області 962  $\text{cm}^{-1}$  та  $\sigma$  О—Р—О в області 602 – 573  $\text{cm}^{-1}$ . Для всіх дослідних зразків характерна наявність  $\nu_{\text{as}}\text{PO}_4$  та  $\nu_s\text{PO}_4$  в областях відповідно 980 – 1100 та 910 – 950  $\text{cm}^{-1}$ , що свідчать про наявність фосфатів в композиційних матеріалах. Абсорбційні максимуми ОН в області 1450 – 1460, 1540 – 1570  $\text{cm}^{-1}$  та  $\text{CO}_3^{2-}$  в області 1455, 1410, 875  $\text{cm}^{-1}$  підтверджують присутність карбонат-апатиту відповідно типу А та типу В у дослідних матеріалах.

При дослідженні композитів методами РФА та ДТА було встановлено, що термообробка зразків приводить до покращення ступеня кристалічності апатитової фази та видалення органічної фази в матеріалах біологічного походження.

Розроблені матеріали є перспективними при одержанні біосумісних кісткових імплантатів в ортопедії та щелепно-лицьовій хірургії

## МІНЕРАЛЬНІ В'ЯЖУЧІ МАТЕРІАЛИ ІЗ ЗОЛОЮ-ВИНОСУ

*Круш С.А.*, Носанчук Т.П., Черняк Л.П.

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»

[laiza92@mail.ru](mailto:laiza92@mail.ru)

Зола-виносу ТЕС знаходить певне застосування для виготовлення будівельних композиційних матеріалів. Проте обсяги накопичення таких відходів теплоенергетики значно перевищують кількість їх практичного використання. В цьому зв'язку перспективним є збільшення обсягів використання золи-виносу як техногенної сировини в хімічній технології мінеральних в'язучих матеріалів.

Об'єктом дослідження в даній роботі стала зола-виносу Бурштинської ТЕС та в'язучі матеріали з її застосуванням: романцемент і портландцемент. Такий вибір щодо романцементу обумовлюється можливістю його створення з дотриманням вимог ресурсозбереження по утилізації відходів промисловості та енергозаощадженню при відносно меншій температурі випалу (<1200<sup>0</sup>C), а щодо портландцементу – можливістю суттєвого збільшення використання техногенної сировини у багатотоннажному виробництві.

Встановлено особливості хіміко-мінералогічного складу золи-виносу та карбонатних компонентів сировинних сумішей. За хімічним складом досліджувана зола-виносу із вмістом, мас. %: 46,12 SiO<sub>2</sub>, 18,00 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 22,17 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 4,03 CaO належить до типу кремнеземних. Наявність 2,5 мас. % вуглецю вказує на залишкову теплотворну здатність, що важливо для зменшення питомих витрат палива при випалі сировинних сумішей. Мінералогічний склад проби золи-виносу включає алюмосилікати.

Критерієм визначення складу сировинної суміші для виготовлення романцементу є дотримання гідравлічного модулю НМ в межах 1,1-1,7. Відповідно до цього створені склади романцементу на основі композиції вапняку з золою-виносу які характеризуються вмістом, мас. %: 12-17 SiO<sub>2</sub>, 4-6 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 5-8 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 38-43 CaO.

ДСТУ Б В.2.7-46-96 передбачає використання золи-виносу для виробництва портландцементу як добавки до клінкеру при його помелі. Разом з тим, відзначений вміст оксидів кремнію, алюмінію та заліза вказує на можливість застосування такої техногенної сировини як компоненту сировинної суміші для виготовлення портландцементного клінкеру. Створений на основі композиції вапняку з золою-виносу, склад клінкеру характеризуються вмістом, мас. %: 19-20 SiO<sub>2</sub>, 6-7 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 8-9 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 63-64 CaO, що відповідає раціональному значенню коефіцієнта насичення 0,9 і визначає наявність після випалу кристалічних фаз C<sub>3</sub>S, C<sub>2</sub>S, C<sub>3</sub>A, C<sub>4</sub>AF та відповідно - задані властивості цементу.

Виконані дослідження та розробки дозволяють збільшити обсяги практичного використання золи-виносу ТЕС, як техногенної сировини для виготовлення мінеральних в'язучих матеріалів, комплексно вирішуючи при цьому питання ресурсозбереження, екології та хімічної технології силікатів.

**ВПЛИВ ОБРОБКИ ВИСОКИМ ТИСКОМ НА СТІЙКІСТЬ  
ВЕРШКОВОГО МАСЛА В ПРОЦЕСІ ЗБЕРІГАННЯ***Кухарчук Т.П.<sup>1</sup>, Жильцова С.В.<sup>1</sup>, Сукманов В.О.<sup>2</sup>*<sup>1</sup>Донецький національний університет<sup>2</sup>Донецький національний університет економіки і торгівлі  
імені Михайла Туган-Барановського  
[tatyanaKuharchuk@mail.ru](mailto:tatyanaKuharchuk@mail.ru)

Починаючи з 90-х років ХХ століття значно зріс інтерес до технологій впливу високого тиску (ВТ) на різноманітні біологічні об'єкти та їх композиції з метою консервації та поліпшення їх споживчих властивостей (в основному на харчові продукти). Відомо, що застосування ВТ для обробки харчових продуктів дозволяє здійснювати контроль над ферментативними процесами, значно збільшує тривалість зберігання продуктів харчування шляхом інактивації патогенних мікроорганізмів, при цьому в порівнянні з термічною обробкою дозволяє зберегти органолептичні (натуральний запах, смак, колір), поживні і структурно-механічні властивості харчових продуктів. На сьогоднішній день обсяг ринку харчових продуктів, оброблених високим тиском, досягає \$2 мільярдів щорічно.

Вершкове масло – одне із цінних продуктів харчування за вмістом жирів, вітамінів та амінокислот, тому метою цієї роботи було вивчити вплив тиску 100–350 МПа на фізико-хімічні показники вершкового масла в процесі зберігання.

В якості об'єкта дослідження було обрано вершкове масло "Селянське" жирності 72,5% вироблене способом перетворення високожирних вершків на Мар'їнському молокозаводі ПАО "Лактіс".

Обробку вершкового масла високим циклічним тиском здійснювали на дослідницькому комплексі високого тиску.

Для оцінки впливу ВТ на вершкове масло були визначені: дисперсність вологи; співвідношення форм зв'язку вологи; кислотне число; число омилення; перекисне число і йодне число.

Встановлено, що в ході обробки вершкового масла високим тиском відбувається збільшення дисперсності плазми і перерозподіл форм зв'язків вологи у бік збільшення вмісту міцно зв'язаної вологи, недоступної для протікання гідролітичних процесів і діяльності мікроорганізмів. Спостерігається підвищення стійкості до окислювального згірнення через зміни у характері розподілу компонентів та структурі продукту.

Таким чином, обробка вершкового масла високим тиском позитивно позначається на стійкості до гідролітичного та окислювального згірнення, сприяючи подовженню терміну зберігання продукту.

## ГАЛЬВАНИЧЕСКИЙ ЭЛЕМЕНТ С АЛЮМИНИЕВЫМ АНОДОМ, СОЛЕВЫМ КАТОДОМ И МЕТАНОЛЬНЫМ РАСТВОРОМ СОЛЕВОГО ЭЛЕКТРОЛИТА

*Линник Д.С.*

Донецкий национальный технический университет

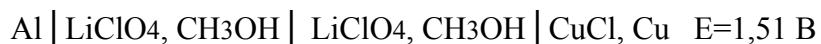
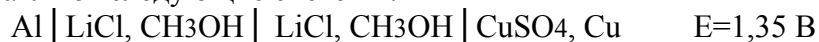
[Linnikus\\_911@mail.ru](mailto:Linnikus_911@mail.ru)

В связи с возникновением новых источников электрической энергии и больших количеств устройств ее потребления необходимым является создание новых электрохимических систем с высокими энергетическими показателями, главным образом ЭДС, энергоемкостью, температурным режимом работы, минимальным саморазрядом и наибольшей токоотдачей. Достичь этого можно только с применением более активных веществ, как в роли катода, так и анода. Однако возникает необходимость замены водных растворов электролитов на неводные растворители вследствие большей устойчивости.

В работе проведены исследования нового типа ЭХС с алюминиевым анодом, из-за его большей активности, взамен классическим материалам (цинк, кадмий, железо). Применение воды как растворителя недопустимо вследствие малого КПД, выделения водорода и низкой ЭДС (1,2 В макс. напротив 2,7 В из теор.расч.). Поэтому в качестве растворителя был выбран безводный спирт (метанол) во многом схожим с водой, главным образом из-за высокой диэлектрической проницаемости (37), низкой вязкости, хорошей диссоциирующей способности многих электролитов с высокой электропроводностью растворов и амфотерностью. Однако спирт имеет такие преимущества, как больший спектр применяемых основных и кислотных электролитов без корродирующего действия и меньшей доли паразитных реакций на алюминиевом аноде.

В качестве электролитов выбраны соли лития и аммония, которые хорошо диссоциируют в метаноле, растворы имеют высокую электропроводность и удачно работают с солевыми катодами. Солевой катод представляет собой смесь порошков галогенида или сульфата малоактивного металла (медь, свинец, висмут) с графитом (или медной стружкой) в контакте с графитовым или металлическим токоотводом. Следует отметить, что скорости катодного и анодного процессов велики и поэтому система реализует большие значения ЭДС и токоотдачи, выделение водорода, гораздо меньше, чем в водном растворе этих солей, а продукты окисления анода растворимы в метаноле, что в свою очередь не препятствует замедлению перехода алюминия в окисленную форму.

Полученные ЭХС имеют ЭДС в диапазоне от 1,07 до 1,9 В, значения которых остается на протяжении долгого времени постоянным. Мощность систем соизмерима с мощностями многих систем, используемых в технике. Наибольший интерес представляют следующие системы:



в связи с тем, что имеют высокие ЭХП и стабильность, просты в изготовлении и имеют дешевую и широкую сырьевую базу, легко утилизируются. Также легко модернизируются путем введения специфических добавок (увеличение основности раствора, активация или стабилизация металлического анода путем легирования, применение ППЭ и ПЭ в составе катодной пасты) и необходимых конструкционных воплощений системы.

## ДИСПЕРГУВАННЯ КОМПОЗИТНИХ РОЗЧИНІВ У ПРОЦЕСІ ГРАНУЛОУТВОРЕННЯ

*Михальчук О.Д., Корнієнко Я.М.*

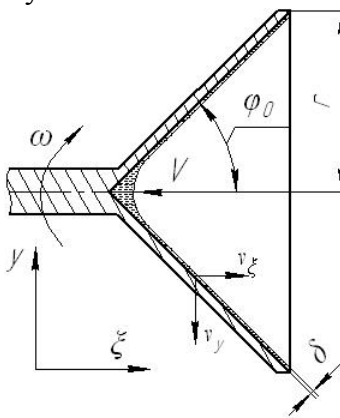
Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»

На сьогоднішній день постає проблема збільшення врожайності ґрунтів. Для того щоб не спричинятих надмірну мінералізацію необхідно щоб надходження поживних речовин відбувалося поступово. Нами запропонована нові композитні добриваз пошаровою структурою та заданими властивостями.

При детальному аналізі проблеми було визначено, що на ефективність процесу гранулоутворення суттєво впливають спосіб введення та розподіл гетерогенної фази у псевдозрідженому шарі.

Якість диспергування гетерогенних систем визначається мінімальною товщиною плівки, яка сходить з крайки диспергатора.

За основу конструкції було прийнято конічний диспергатор який зображено на рисунку 1.



- $\zeta$  – координата вздовж осі диспергатора;
- $y$  – координата перпендикулярно до вісі ротора;
- $R$  – радіус;
- $V$  – витрата рідини;
- $V_{\xi}, V_y$  - швидкість руху плівки вздовж та перпендикулярно осі барабану відповідно;
- $\varphi_0$  - кут розкриття конуса;
- $\delta$  - товщина плівки що сходить з кромки ротора;
- $\omega$  - кутова швидкість обертання.

Рисунок 1 – Фізична модель руху рідини по конічній поверхні диспергатора

Метою досліджень є підвищення ефективності процесу одержання гуміново-азотно-кальцієвих твердих композитів із пошаровою структурою шляхом покращення якості диспергування гетерогенної фази механічним диспергатором.

Для досягнення поставленої мети необхідно:

- розробити фізичну та математичну модель руху рідкої фази по внутрішній поверхні диспергатора;
- створити прототип диспергатора та експериментальний стенд для дослідження ефективності його роботи;
- перевірити одержані результати на пілотній установці гранулятора псевдозрідженого шару;
- перевірити адекватність математичної моделі з урахуванням результатів досліджень.

## ДОСЛІДЖЕННЯ ВЗАЄМОДІЇ КОМПОНЕНТІВ СУМІШІ ДЛЯ ВІДНОВЛЕННЯ КЛАДКИ КАМЕРИ КОКСУВАННЯ

*Пащенко Ю.Є., Пітак Я.М., Горбатко С.В.*

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»

Донецький національний технічний університет

[sergio\\_sv8@bigmir.net](mailto:sergio_sv8@bigmir.net)

Тривала експлуатація коксових батарей породжує проблему стійкості кладки камер коксування, тому збереження кладки, максимально можливе подовження терміну її служби - вельми актуальне завдання, від успішного вирішення якої залежать найважливіші техніко-економічні показники роботи підприємства.

В активі коксохіміків є значний арсенал методів гарячого ремонту кладки коксових печей і пристроїв для його здійснення. До гарячих ремонтів відносять ремонт, які проводять без виведення печей з експлуатації та відключення від системи обігріву.

Метод керамічної наплавки відноситься до гарячих методів і полягає в тому, що сухий вогнетривкий мертель в суміші з металевих порошком подається струменем кисню на розпечену поверхню кладки. Відбувається екзотермічна реакція окислення паливної складової торкрет - маси. Під дією тепла, що виділяється, вогнетривка частина торкрет - маси розплавляється и разом з продуктами реакції окислення паливних компонентів заповнює дефекти кладки.

В якості сировинних матеріалів в цих сумішах використовуються динасовий мертель (SiO<sub>2</sub> – 93,2 %, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> - 2,04 %, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – 3,50 %, CaO - 1,2 %), діабаз (SiO<sub>2</sub> – 50,30 %, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – 19,00 %, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – 12,50 %, CaO – 4,57 %). В якості паливних компонентів використовуються кремній (Si – 96,00 %, Al – 0,30 %, Fe – 0,69 %, Ca – 0,16 %, Ti – 0,04 %) та алюміній (Al – 99,00 %, Si – 0,40 %, Fe – 0,5 %).

Були проведені термодинамічні розрахунки взаємодії компонентів суміші для відновлення кладки камер коксування. Результати розрахунків приведені у таблиці 1.

Таблиця 1 Термодинамічні величини реакцій, T = 1773 °K

Рівняння реакцій	$\Delta G_T^0$ , кДж/моль
$Si + O_2 \rightarrow SiO_2$ (α – кварц)	- 462,886
$Si + O_2 \rightarrow SiO_2$ (α – тридиміт)	- 490,749
$Si + O_2 \rightarrow SiO_2$ (α – кристобаліт)	- 468,476
$4Al + 3O_2 \rightarrow 2Al_2O_3$	-1989,88
$6Si + 3 Al_2O_3 \rightarrow 3Al_6Si_2O_{13} + 8 Al$	- 6049, 96
$2Si + 3Al_2O_3 + 2O_2 \rightarrow 3Al_2O_3 \cdot 2SiO_2$	+ 5440,98
$3Al_2O_3 + 2 SiO_2 \rightarrow 3Al_2O_3 \cdot 2SiO_2$	- 220,14
$Al + Fe_2O_3 \rightarrow Fe + Al_2O_3$	- 1956,19
$Si + Fe_2O_3 \rightarrow Fe + SiO_2$	- 1226,53
$Al + CaO \rightarrow Ca + Al_2O_3$	- 1969,26
$Si + CaO \rightarrow Ca + SiO_2$	- 1209,60
$SiO_2 + Fe \rightarrow Fe_2O_3 + Si$	- 1285,91
$Al_2O_3 + Fe \rightarrow Fe_2O_3 + Al$	- 1943,88

Подальші дослідження фазового та хімічного складу матеріалу отриманого методом керамічного наплавлення підтвердили термодинамічні розрахунки.

**ДОСЛІДЖЕННЯ СКЛАДУ РІДКИХ ПРОДУКТІВ ПІРОЛІЗУ  
БУРОГО ВУГІЛЛЯ**

*Попов О.А., Гуртова О.М, Суйков С.Ю., Білий О.В.*

Донецький національний університет

[axelpopov@gmail.com](mailto:axelpopov@gmail.com)

Для аналізу складних сумішей органічних сполук широко використовують газохромато-мас-спектрометричний аналіз. Але його використання до хімічно лабільних систем потребує окремого дослідження.

Нами розглянуто можливість аналізу за допомогою цього методу рідкої частини продуктів піролізу бурого вугілля з метою модифікації методики, необхідної для аналізу широкої фракції і отримання високовірогідних результатів, а також встановлення групового складу продуктів. Ще одне завдання - виявлення присутності в зразках фракцій речовин, що представляють цінність для подальшого промислового використання (наприклад,  $\alpha$ -олефінів – сировини для виробництва ПАР).

До цього часу продукти піролізу бурого вугілля досліджувалися з попереднім фракціонуванням. Але для таких хімічно активних об'єктів це може призводити до викривлення складу об'єкту. Пропонована методика спрямована на мінімізацію таких ускладнень і усунення систематичних похибок аналізу.

Робота виконувалась шляхом сумісного використанням газового хроматографу і хромато-мас-спектрометра. При аналізі хроматограм з газохромато-мас-спектрометра (ГХ-МС) не ставилось за мету встановлення точної площі піку та інтерпретації їх як кількісного складу. Даний аналіз є лише якісною характеристикою фракцій бурого вугілля. Поєднання у межах однієї методики високої ідентифікаційної здатності ГХ-МС та загальновідомого надширокого лінійного діапазону класичних газохроматограмних датчиків дозволяє отримати кількісні результати з високою надійністю.

У роботі проаналізовані результати піролізу за двох наборів умов. Показано, що кожен з досліджуваних об'єктів містить більше сотні компонентів, більшість з яких можуть мати цінність для подальшого промислового використання.

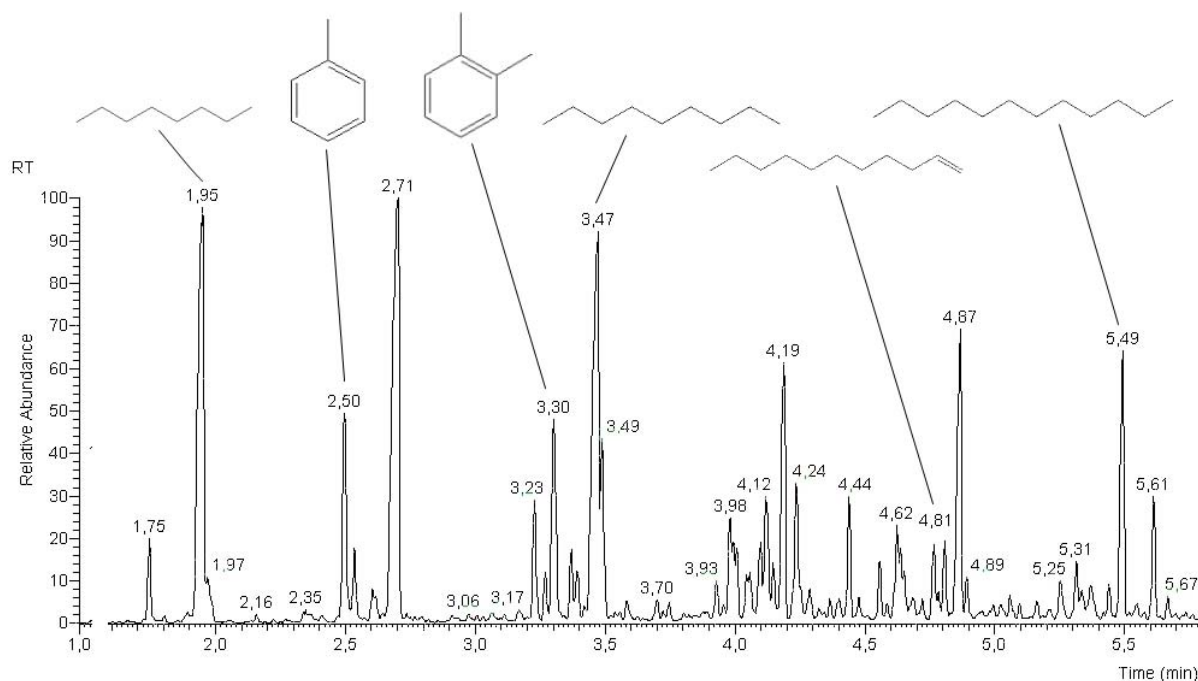


Рис. Фрагмент хроматограми з позначеними піками ідентифікованих сполук

## ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСУ КОНВЕРСІЇ ФОСФОГІПСУ КАРБОНАТОМ НАТРІЮ ДЛЯ ОДЕРЖАННЯ РЗЕ І СТРОНЦІЮ

*Семяник С.В., Власян С.В., Волошин М.Д.*

Дніпродзержинський державний технічний університет

[Semyanik\\_Svetlana@mail.ru](mailto:Semyanik_Svetlana@mail.ru)

Рідкоземельні елементи (РЗЕ) і сполуки на їх основі володіють унікальними властивостями, що робить їх незамінними в багатьох галузях техніки. Їх використовують у вигляді каталізаторів при переробці нафти, каталітичних нейтралізаторів для автомобілів, у виробництві сплавів для батарей, кераміки і магнітів, а також обробці оптичних матеріалів, радіо - і квантовій електроніці, ядерній техніці та інші. У зв'язку з бурхливим розвитком цих галузей зростає потреба промисловості в РЗЕ. Останнім часом визначилося використання їх як мікродобрив в сільському господарстві.

Існує достатньо велика кількість відомих і нових методів вилучення РЗЕ із фосфогіпсу (ФГ), нами був обраний один з методів – переробка фосфогіпсу на сульфат натрію, карбонат кальцію, сполуки РЗЕ і карбонат стронцію.

Результати процесу конверсії ФГ содою при постійних температурі і обертах мішалки наведені в таблиці 1.

Таблиця 1 - Результати дослідів з конверсії фосфогіпсу содою  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  при температурі  $70^\circ\text{C}$ .

№ досліду	1	2	3	4	5	6	7	8
Наважка ФГ, г	240 (170)	240 (170)	240 (170)	240 (170)	240 (170)	240 (170)	240 (170)	240 (170)
Витрата $\text{Na}_2\text{CO}_3$ , мл	510	600	600	425	425	425	425	425
Час конверсії, хв	45	45	45	60	120	60	60	60
Вихід крейди (вол.), г	198,205	199,106	202,305	231,109	252,580	226,868	231,594	216,237
Вихід крейди (сух.), г	149,257	156,012	185,057	180,587	195,580	170,389	171,052	175,380
Вихід $\text{Na}_2\text{SO}_4$ , мл	525	550	558	258	260	310	329	338
Об'єм пром. води, мл	200	195	220	195	288	192	200	192
Густина пром. води, г/см <sup>3</sup>	1,170	1,175	1,180	1,170	1,150	1,093	1,093	1,072

З отриманих дослідних даних розраховали ступінь конверсії фосфогіпсу кальцинованою содою, який становить 68%, перехід стронцію і РЗЕ у крейду 100 % .

Досліджено за допомогою спектроскану склад крейди, %: 0,72 РЗЕ; 2,42 стронцію; 8,5 сірки; 27,1 кальцію; 0,18 заліза; 0,02 марганцю; 0,02 цинку та 0,39 фосфору, що говорить про доцільність подальшого вилучення РЗЕ і стронцію, як цінних компонентів і мікроелементів.

## ІНГІБУВАННЯ ФЕРМЕНТАТИВНОЇ АКТИВНОСТІ БІЛКІВ ПАТОГЕННИХ МІКРООРГАНІЗМІВ ІОНАМИ ВАЖКИХ МЕТАЛІВ

*Фесенко О.І., Саввова О.В.*

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»  
[savvova\\_oksana@ukr.net](mailto:savvova_oksana@ukr.net)

З врахуванням поширення епідемій різної етіології антибактеріального захисту потребують місця громадського користування – лікарні (операційні та реанімаційні блоки, пологові та інфекційні відділення, медичні та фармацевтичні лабораторії), громадські їдальні (харчоблоки, холодильне устаткування, ємності для зберігання і підігріву води, санітарно-технічне обладнання), метро (личкування стін емальованими архітектурно-будівельними деталями), тощо. На сьогоднішній день велика увага приділяється створенню і використанню в різних галузях промисловості і побуту антибактеріальних матеріалів: пластмас, спеціальних стекл, а також композиційних, металічних, полімерних, склокерамічних і склоемалевих покриттів. Одним із способів забезпечення бактерицидних властивостей матеріалів є введення до їх складу активних денатуруючих агентів – солей важких металів. Механізм інгібуючої дії іонів важких металів залежить від їх концентрації і полягає у пригніченні активності ферментів за рахунок блокування сульфгідрильних груп, порушенні структури та функціонування біомембран та клітинних стінок, за рахунок створення електричного поля та утворення альбумінатів на поверхні клітини, а також з'єднання із ДНК клітин шляхом каталітичного окиснення.

З метою встановлення впливу інгібуючої здатності катіонів  $\text{Sn}^{4+}$  та  $\text{Zn}^{2+}$  відносно санітарно-показового умовно-патогенного мікроорганізму *Escherichia coli* до складу скло емалевих титанвміщуючих покриттів були введені мікропорошки оксидів олова та цинку. Оцінку ігібуючої здатності скло емалевих покриттів з вмістом оксидів олова та цинку у кількості 1 – 6 мас. % на 100 мас. % фрити проводили кількісним методом в умовах бактеріального забруднення з вихідною концентрацією ( $C_{\text{вих}}$ ) КУО (колонеутворюючих одиниць) *Escherichia coli* від  $10^3$  до  $10^6$  кл/мл за час експозиції 24 години.

За результатами проведених досліджень встановлено, що бактерицидна дія активних катіонів цинку та олова збільшується зі зростанням вихідної концентрації КУО *Escherichia coli*. Даний факт пояснюється наступним: зі збільшенням  $C_{\text{вих}}$  КУО зростає ефективність бактерицидної дії активних катіонів а рахунок збільшення контактної площі між патогенними мікроорганізмами і склоемалевим покриттям. Зі зростанням  $C_{\text{вих}}$  КУО ( $K_{\text{культури}}$ ) патогенних мікроорганізмів також створюється можливість підвищення активності бактерицидних компонентів внаслідок зниження енергетичного обміну між мікробами в межах дії інгібуючих факторів.

Найвище інгібування ферментативної активності *Escherichia coli*, яке характеризується як зниження концентрації мікробу за час експозиції відносно  $K_{\text{культури}}$  для дослідних склоемалевих покриттів спостерігається при введенні 4 мас. ч на 100 мас. ч фрити  $\text{SnO}_2$  та  $\text{ZnO}$ . Одержані антибактеріальні скло покриття за існуючою кваліфікацією відносяться до матеріалів зі відмінною антимікробною дією, яка складає 80 – 90 %..

Отже, введення екологічно безпечних оксидів олова та цинку до складу скло емалевих покриттів дозволить забезпечити високий бактерицидний захист об'єктів життєдіяльності людини при виключенні забруднення навколишнього середовища.

## ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСУ ОДЕРЖАННЯ БІОГАЗУ З ОСАДІВ СТІЧНИХ ВОД

*Хабера К.В., Іванченко А.В.*

Дніпродзержинський державний технічний університет

[katya-habera@mail.ru](mailto:katya-habera@mail.ru)

Одним з перспективних напрямків одержання органо-мінеральних добрив є метанове зброджування осадів стічних вод (активного мулу і відходів після реагентно-адсорбційної доочистки) та інших відходів рослинного і тваринного походження в біогазовому реакторі. Головним аргументом використання біореакторів – одержання незаражених високоефективних добрив. Добрива, що утворюються в біореакторах мають гарну удобрювальну дію, фосфор та калій знаходяться в формі, яка краще засвоюється рослинами.

Отже, метою даної роботи є дослідження наукових основ одержання органо-мінерального добрива із осадів стічних вод шляхом інтенсифікації процесу анаеробного зброджування з отриманням біогазу. Суттєвою відмінністю рекомендованої нами технології є використання диспергатора потужністю 1000 об/хв. для підвищення швидкості виходу біогазу.

Поставлена мета удосконалення процесу одержання органо-мінерального добрива шляхом метанового зброджування досягається при зменшенні об'ємів осадів активного мулу, заданому ступеню розпаду органічної речовини з отриманням підвищеної кількості біогазу, що виділяється для його використання на обігрів самого біореактору та додаткового отримання інших видів енергії. Завдяки тому, що органічні відходи в процесі попереднього диспергування піддаються подрібненню, утворюється гомогенізована маса, що сприяє безперешкодному обміну речовин на поверхні розділу рідкої та твердої фази і є запорукою високої активності реакції бродіння та робить ефективнішою анаеробну переробку.

На рис. 1 представлена залежність об'єму біогазу, який виділився від часу.

Тривалість експерименту становила 15 діб.

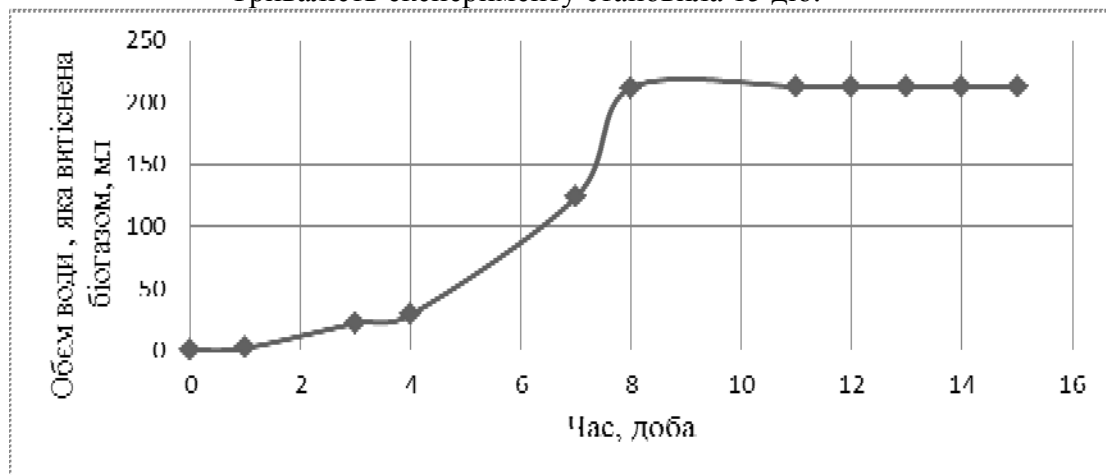


Рисунок 1 – Залежність виходу біогазу від часу

Встановлено, що найбільш інтенсивний вихід біогазу спостерігається в період часу з 4 до 8 діб. На 11 добу швидкість виходу біогазу знизилася, в це говорить про те, що процес анаеробного зброджування закінчився.

Таким чином, експериментально показано, що застосування процесу диспергування осаду стічних вод дало можливість одержати максимальну кількість біогазу за короткий термін часу (11 діб) в порівнянні з класичними установками (30 діб).

## ИНГИБИРОВАНИЕ КОРРОЗИИ МАЛОУГЛЕРОДИСТОЙ СТАЛИ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИМИ ПРЕПАРАТАМИ

*Хоменко А.О., Бондарь Е.С.*

Черниговский национальный педагогический университет имени Т.Г.Шевченка  
[amian007@mail.ru](mailto:amian007@mail.ru)

Применение ингибиторов – один из эффективных способов борьбы с коррозией металлов. Разработка эффективных ингибиторов особенно актуальна для защиты металлов от биокоррозии, поскольку микроорганизмы способны адаптироваться к токсикантам, и кислотной коррозии, приводящей к значительным потерям металла при его травлении. Эта задача может быть решена либо синтезом новых соединений, которые, как правило, являются дорогостоящими продуктами, либо поиском ингибиторов среди известных препаратов, в том числе фармакологических, что позволит избежать проблемы создания технологии промышленного производства.

Цель работы – изучение ингибирующего действия препаратов *Норфлоксацин* и *Этамзилат* при коррозии малоуглеродистой стали в кислой хлоридной среде и среде с бактериальной сульфатредукцией.

Исследование проведено коррозионными (гравиметрический, волюмометрический, электрохимический) и микробиологическими (десятикратных разведений, диффузия в агар) методами с использованием образцов малоуглеродистой стали СтЗпс в кислой (1М HCl) и водно-солевой среде Постгейта «В», инокулированной сульфат-восстанавливающими бактериями (СВБ) с титром  $10^9$  кл/мл. Определены показатели защитного действия ингибиторов - коэффициент торможения коррозии ( $\gamma$ ) и защитный эффект ( $Z, \%$ ), значения которых представлены в таблице.

Таблица

Ингибирующее действие *Норфлоксацина* и *Этамзилата* при коррозии стали СтЗпс

Коррозионная среда	С, г/л	$\tau$ , час	Т, К	<i>Норфлоксацин</i>		<i>Этамзилат</i>	
				$\gamma_m$	$Z_m, \%$	$\gamma_m$	$Z_m, \%$
1 М HCl	0,7	24	293	4,9	79,6	2,1	52,4
	1,4	24	293	5,6	82,1	2,3	56,5
	2,8	24	293	5,7	82,5	2,4	58,3
	5,7	24	293	7,4	86,5	2,5	60,0
	1,4	1	313	2,0	50,0	1,3	23,1
Постгейт «В» +СВБ	2,8	240	310	22,4	95,5	1,3	23,1

Установлено, что защитное действие *Норфлоксацина* выше, чем *Этамзилата*, и согласно классификации ингибиторов коррозии указанный препарат проявляет удовлетворительную эффективность (6 класс). Увеличение концентрации приводит к усилению защитного действия, а повышение температуры до 313К – к уменьшению ингибирующего эффекта. Это может быть объяснено физической адсорбцией молекул действующих веществ исследованных препаратов на поверхности стали. Наибольшее значение *Норфлоксацин* представляет как ингибитор микробной коррозии, что обусловлено его биоцидным действием на СВБ.

Электрохимическим методом показано, что *Норфлоксацин* смещает потенциал электрохимической коррозии в анодную область на 30 мВ и преимущественно тормозит анодный процесс растворения металла.

Ингибирующее действие исследованных препаратов объясняется особенностями распределения зарядов в молекулах их действующих веществ, а также энергетическими характеристиками, которые рассчитаны нами с применением программы Frank J.Seiler Res. Lab. US Air Force Academy, COLO. SPGS., CO. 80840 (метод MNDO-PM 3).

**МОДИФІКУВАННЯ ПОКРИТТІВ ДОСТУПНИМИ ВУГЛЕЦЕВИМИ  
НАНОСТРУКТУРНИМИ ОБ'ЄКТАМИ ДЛЯ ПІДВИЩЕННЯ ЇХ  
ФУНКЦІОНАЛЬНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ**

<sup>1</sup>Шепеленко О.С., <sup>1</sup>Сахненко М.Д., <sup>2</sup>Зеленський О.І., <sup>2</sup>Шмалько В.М., <sup>1</sup>Якуба К.В.

<sup>1</sup>Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»

<sup>2</sup>Український державний науково-дослідний вуглехімічний інститут «УХІН», м. Харків  
shepelenko@kpi.kharkov.ua

Одним з найбільш застосованих методів протикорозійного захисту матеріалів є ізолювання їх від агресивного впливу оточуючого середовища різноманітними покриттями, найпоширенішими серед яких є металеві та лакофарбові. Розповсюдженість таких покриттів пояснюється високою ефективністю їх використання, простотою нанесення, доступністю. Очевидно, що підвищення стійкості захисних плівок є запорукою зростанню рентабельності їх застосування та ресурсу об'єктів, котрі захищають.

Відомим способом удосконалення функціональних властивостей матеріалів, зокрема покриттів, є їх модифікація нано- та мікророзмірними матеріалами. Різними дослідниками багаторазово показано високий рівень фізико-хімічних та механічних властивостей вуглецевих нанорозмірних структур (ВНС), що робить привабливим їх застосування як армуючого компонента. Через високу собівартість ВНС, зумовлену складністю та витратністю способів їх отримання і розділення, такі сполуки досі не використовуються у виробництві. Дешевою альтернативою ВНС, отриманим за класичними способами, можуть стати наноструктури, екстраговані з продуктів коксування кам'яного вугілля. Вивчення впливу модифікування покриттів несепарованими ВНС, отриманими з продуктів коксохімічного виробництва, на властивості плівок і становить мету цієї роботи.

ВНС з коксового пилу екстрагували водними розчинами або органічними розчинниками. Виділення ВНС інтенсифікували ультразвуком (22 кГц) за допомогою диспергатора УЗДН-2Т. Отримані суспензії упарювали вдвічі та на їх основі готували електроліти для осадження нікелевих та цинкових покриттів або вводили до складу пентафталевої емалі ПФ-115 та водоемульсійної фарби ВД-АК-111. Показники лакофарбових покриттів визначали у відповідності до ГОСТ 26196-89 та ГОСТ 6465-76.

За результатами вольтамперометрії, гравіметрії, хронопотенціометрії та імпедансометрії металеві ВНС-вмістні осадки демонструють суттєве підвищення корозійної стійкості порівняно з індивідуальними металевими покриттями. Армування ВНС лакофарбових покриттів скорочує час їх висихання вдвічі, при цьому стійкість до статичного впливу води в залежності від природи полімерного компонента зростає у 2–3 рази.

## СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ЭПОКСИДНО-СИЛОКСАНОВЫХ КОМПОЗИТОВ АМИННОГО ОТВЕРЖДЕНИЯ

*Ананьева Д.Ю., Гуртовой Д.В., Михальчук В.М*

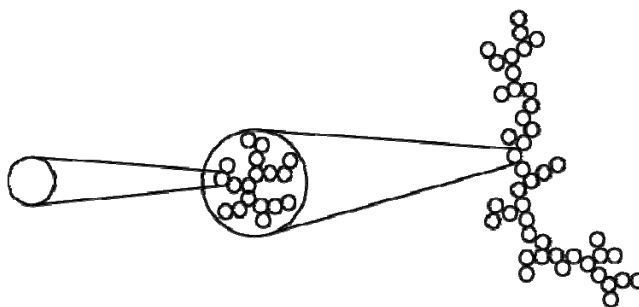
Донецкий национальный университет

[ananeva.d@mail.ru](mailto:ananeva.d@mail.ru)

Золь-гель технологии представляет собой научный интерес, поскольку она дает возможность комбинировать свойства материалов, варьируя состав неорганической и органической фаз. Полученные таким образом органо-неорганические гибридные материалы обладают совмещением механической прочности и гибкости органического матрицы с твердостью и термической стабильностью неорганической компоненты. При этом неорганическая составляющая может быть связана с полимером, что позволяет повысить деформационную прочность, эластичность, и т.д.

В данной работе исследовали органо-неорганические гибридные материалы, которые были получены на основе эпоксидной смолы EPONEX 1510 и аминного отвердителя Jeffamine T403. Наполнитель формировали *in situ* на основе двух этоксисиланов (ТЭОС и АПТЭС) путем гидролитической поликонденсации их в среде ацетона. Образцы были приготовлены с варьированием количества силановых прекурсоров ТЭОС:АПТЭС в соотношениях: 1:0; 1:1; 0:1.

Структуру и морфологию полученных материалов оценивали с помощью сканирующей электронной микроскопии на поверхности сколов блочных образцов. Полученные данные показали, что формирование ПСЧ в соотношении ТЭОС:АПТЭС 1:1 и способствует более равномерному распределению наполнителя в объеме матрицы. По данным малоуглового рассеивания рентгеновских лучей было установлено, что ПСЧ представляют собой агрегаты двухуровневой организации, которые формируются из частиц с высокой степенью разветвленности.



Изменение вязкости системы «эпоксидная смола – амин - наполнитель» исследовали с помощью вискозиметрии при температуре 60°C. В качестве критерия сравнения было выбрано время гелеобразования. В ходе исследования было установлено, что при введении больших концентраций наполнителя, данный параметр снижается. Это позволяет утверждать, что данные композиты можно использовать при заделке/заливке в строительных и ремонтных работах.

С помощью термомеханического анализа были определены термомеханические характеристики композитов: температура стеклования, температур высокоэластичности, эффективная концентрация сшивающих узлов сетки и модуль высокоэластичности. Результаты эксперимента показали, что увеличение количества кремнезема вызывает уменьшение температуры стеклования и способствует увеличению концентрации сшивающих узлов сетки и модуля высокоэластичности.

Результаты проведенных исследований дали возможность установить, что предпочтительными характеристиками изученных параметров обладает система с концентрацией SiO<sub>2</sub> 3масс.% и соотношением ТЭОС:АПТЭС 1:1.

## ВЛИЯНИЕ СОСТАВА МОНОМЕРНОЙ СМЕСИ НА КИНЕТИКУ СОПОЛИМЕРИЗАЦИИ ВИНИЛАЦЕТАТА С АКРИЛОВОЙ КИСЛОТОЙ

*Батуз С.М., Мельниченко В.И.*

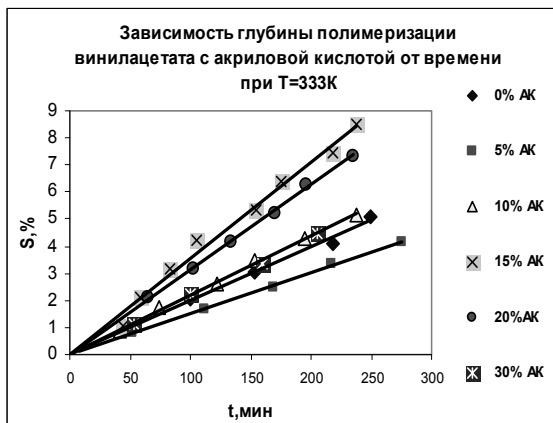
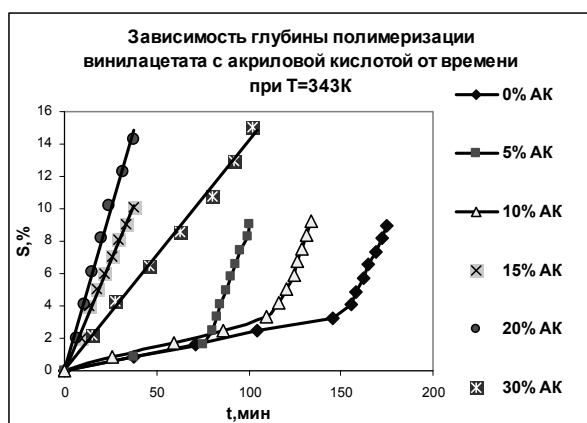
Донецкий национальный университет

[SvetlanaB-g@mail.ru](mailto:SvetlanaB-g@mail.ru)

Сополимеры винилацетата с акриловой кислотой, полученные в среде метанола, обладают влаго- и кислотостойкостью, что представляет интерес его использования в качестве защитного покрытия. Эти свойства в значительной степени определяются молекулярно-структурными параметрами исходной мономерной смеси, температурой процесса, выбором инициатора, влиянием растворителя. Целью данной работы было изучение влияния состава исходной мономерной смеси на кинетику сополимеризации винилацетата (ВА) с акриловой кислотой (АК) в присутствии метанола в качестве растворителя.

Сополимеризация очищенных и перегнанных ВА и АК проводилась при температурах 323 - 343 К в присутствии 0,05% мольных бензоилпероксида для составов мономерной смеси содержащих 5, 10, 15, 20, 30% мольных АК, а также чистого ВА в присутствии 30% массовых метанола в качестве растворителя. Кинетику полимеризации изучали dilatометрическим методом. Скорость инициирования рассчитали на основе данных о распаде бензоилпероксида при данных температурах.

На кинетических кривых полученных при 343 К для составов содержащих 5, 10% мольных АК и чистого ВА наблюдается ускорение процесса полимеризации. Отсутствие самоускорения при малых глубинах превращения в основном связано с заметным уменьшением скорости инициирования уже при небольшой конверсии мономера. Это вызвано снижением эффективности инициирования  $f$  вследствие рекомбинации первичных радикалов. При достижении конверсий, соответствующих началу самоускорения, уменьшение  $f$  замедляется, а диффузионный контроль реакции обрыва цепи становится заметным при вязкости среды близкой к вязкости ВА. При содержании в исходной мономерной смеси АК 15% мольных и выше явление гель-эффекта не наблюдается, что связано с преимущественной полимеризацией АК вследствие её большей активности в реакции полимеризации и на начальных стадиях сополимер обогащен АК. С большей скоростью полимеризуются составы содержащие 15 и 20% моль АК, так как при большем её содержании становится заметным влияние образования её комплексов с метанолом устойчивых при температуре полимеризации. Это снижает общую скорость процесса, а сополимер становится более однородным по составу. При более низких температурах, где роль межмолекулярных взаимодействий возрастает, явление гель-эффекта не наблюдается, а активность АК уменьшается.



**ВИВЧЕННЯ ОСОБЛИВОСТЕЙ ПРОВІДНОСТІ ПОЛІМЕРНИХ  
ЕЛЕКТРОЛІТІВ НА ОСНОВІ ПОЛІЕТАРІВ**

Лисенков Е., Голованець В., Кобилянська Т., Семенів Д.  
Миколаївський національний університет ім. В.О. Сухомлинського  
[calisenkov@mail.ru](mailto:calisenkov@mail.ru)

Полімерні електроліти на основі поліетиленоксиду (ПЕО) є предметом інтенсивних досліджень на протязі багатьох років. Дослідження впливу концентрації солей лужних металів на структуру та динаміку полімерних комплексів на основі ПЕО мають як фундаментальний інтерес, так і є важливими з прикладної точки зору, оскільки, такі матеріали є перспективними для створення електролітів для батарей акумуляторів та інших пристроїв.

Метою роботи було вивчення впливу типу неорганічних солей на електричні характеристики полімерних електролітів на основі поліетарів. Як полімерну матрицю у роботі використовували частково-кристалічний поліетиленгліколь-1000 (ПЕГ-1000), поліетиленгліколь-10000 (ПЕГ-10000) та аморфний поліпропіленгліколь-400 (ППГ-400). В якості неорганічних солей використовували перхлорат літію ( $\text{LiClO}_4$ ) та тетрафторборат літію ( $\text{LiBF}_4$ ). Для дослідження були приготовані серії полімерних електролітів наповнених різними типами неорганічних солей з вмістом 2%, 5%, 10%, 20% та 30%. Зразки готувалися методом розчинення у розплаві. Провідність полімерних електролітів досліджували методом діелектричної релаксаційної спектроскопії.

У результаті проведених досліджень було встановлено:

- Тип неорганічної солі значно впливає на провідність полімерних електролітів. Оскільки одним із основних факторів, які визначають провідність полімерних електролітів є рухливість носіїв зарядів, то системи, наповнені  $\text{LiClO}_4$  показали вищі характеристики провідності ніж системи наповнені  $\text{LiBF}_4$ . Ця відмінність пояснюється розмірами аніонів, які у перхлорату набагато менший ніж у тетрафторборату. Оскільки аніон менший, то він має більшу рухливість, що і приводить до вищої провідності.
- Молекулярна маса полімерної матриці помітно впливає на провідність полімерних електролітів. Оскільки перенос носіїв зарядів у полімерних електролітів відбувається переважно в аморфній фазі, то системи, на основі ПЕГ-1000 показали вищі характеристики провідності ніж системи на основі ПЕГ-10000. Цей ефект пояснюється тим, що ПЕГ-1000, має меншу молекулярну масу, а отже і нижчу ступінь кристалічності, яка складає для ПЕГ-1000 – 72%, а для ПЕГ-10000 – 85%.
- Кристалічність полімерної матриці значно впливає на провідність полімерних електролітів. Оскільки перенос носіїв зарядів у полімерних електролітів відбувається переважно в аморфній фазі, то системи, на основі аморфного ППГ-400 показали вищі характеристики провідності ніж системи на основі ПЕГ-1000, який є частково-кристалічним зі ступенем кристалічності 72%.
- Провідність досліджуваних полімерних систем зростає зі збільшенням вмісту солі, що пояснюється зростанням кількості носіїв заряду.

**ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ СТРУКТУРИРОВАНИЯ  
ЭПОКСИДНЫХ ОЛИГОМЕРОВ В ПРИСУТСТВИИ РАЗЛИЧНЫХ  
ПЛАСТИФИЦИРУЮЩИХ ДОБАВОК**

*Гриб М.П., Попова Н.Г., Черкашина А.Н.*

Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт»  
[lebedev@kpi.kharkov.ua](mailto:lebedev@kpi.kharkov.ua)

Благодаря высокой реакционной способности эпоксидные олигомеры могут модифицироваться в широких пределах, что дает возможность получить полимеры с заранее заданными свойствами. Нами проводились работы по исследованию композиций холодного отверждения для изготовления крупногабаритных изделий из стеклопластиков методом контактного формования. Исследовалась кинетика структурирования эпоксидного олигомера ЭД-20 в присутствии таких добавок как триэтиленгликоль (ТЭГ-1), диэтиленгликоль (ДЭГ-1), олигоэфир МГФ-9, тиokol, диоктилсебацинат (ДОС). В качестве отвердителя применялся полиэтиленполиамин.

Исследования проводили следующими методами : химико-аналитическим, методом ИК-спектроскопии , графоаналитическим методом по изменению удельного объемного сопротивления в процессе отверждения. Термомеханические исследования проводили на вискозиметре Хепплера. Густоту шивки определяли методом набухания в парах инертного растворителя. Методом вынужденных резонансных колебаний определяли температуру релаксационных переходов по положению максимума на кривых зависимости тангенса угла механических потерь от температуры.

При определении кинетики отверждения графоаналитическим методом по изменению зависимости  $\lg \rho_v = f(\tau)$  установлено, что наиболее высокие значения  $\rho_v$  как при комнатной так и при повышенных температурах, имеет композиция без пластификатора. Все исследованные пластифицирующие добавки понижают значение  $\rho_v$ , повышая конформационную подвижность и существенно меняя ход кривых зависимости  $\lg \rho_v = f(\tau)$ .

Данные по исследованию глубины превращения эпоксидных групп по результатам ИК-спектроскопии показали, что при комнатной температуре даже через 360 часов после введения отвердителя в эпоксидной композиции без пластификатора остается еще 47,5 % неизрасходованных эпоксидных групп. После термической обработки при 80<sup>0</sup> С в течение 3 часов у композиции с ДОС остается 21,4 %, с МГФ-9 и тиokolом 31,4 %, с ТЭГ-1 15,3 %, а без пластификатора 24,5 % непрореагировавших эпоксидных групп.

По результатам ТМК установлено, что при комнатной температуре максимальная степень шивки достигается примерно через 30 суток после изготовления образцов. Результаты набухания данных образцов в парах инертного растворителя показали, что степень их набухания фактически одинакова и лежит в пределах 26,3 – 26,7 %.

Из зависимости изменения процессов релаксации методом вынужденных резонансных колебаний видно, что он протекает в три стадии, то есть характеризуется тремя константами скорости процесса.

В результате установлено, что все исследованные пластификаторы в разной степени изменяют процесс образования сетчатой структуры.

Проведенные исследования дают возможность регулировать структуру образующегося полимера, кинетику процесса отверждения и положение гель-точки, что важно при применении композиций для изготовления крупногабаритных изделий методом контактного формования.

**ПРИМЕНЕНИЕ ГЛИЦЕРИНОВЫХ ЭФИРОВ  
1,1,7 –ТРИГИДРОДОДЕКАФТОРПЕНТИЛОВОГО СПИРТА В  
ПОЛИУРЕТАНОБРАЗУЮЩИХ ОЛИГОМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИЯХ**

*Гугина С.Ю., Титова Е.Н., Сазанов Л.А.*

ФГБОУ ВПО «Волгоградский государственный технический университет»  
[Svetlana-gugina@mail.ru](mailto:Svetlana-gugina@mail.ru)

В настоящее время для производства покрытий строительного назначения широко применяются наполненные уретанобразующие олигомерные композиции, экономически выгодно использовать минеральные и органические наполнители. Для наполненных композиций остро стоит проблема улучшения совместимости разнополярных компонентов. А для полиуретановых материалов существенными недостатками являются недостаточная термическая и гидролитическая устойчивость. Эффективным путем решения вышеописанных проблем является введение в олигомерную композицию би- и трифункциональных фторсодержащих глицериновых эфиров. Благодаря наличию гидроксильных групп они легко взаимодействуют с изоцианатными группами полиметиленаполифенилизоцианата, в результате чего образует полиуретан в основной цепи которого содержатся атомы фтора. Помимо того, было показано, что данные вещества обладают значимой поверхностной активностью в малополярных углеводородных средах, а в частности в олигодиендиоле марки Krasol – LBH 3000. Оптимальное количество фторированных эфиров определялось:

- по физико-механическим свойствам отвержденного материала. С увеличением содержания бифункционального эфира происходит увеличение условной прочности при разрыве проходящая через максимум, соответствующий введению в композицию 0,4-0,5 масс.ч. на 100 масс.ч. олигомера ( содержание мела 20 масс.ч.). Данный показатель увеличивается на 22 % . Аналогичная зависимость наблюдается при определении прочности при раздире. Упрочнение материала обусловлено увеличением плотности сшивки, это вызвано высокой реакционной способностью эфира по отношению к изоцианатному компоненту.

- по изотермам поверхностного натяжения в системе олигомер-глицериновый эфир на границе раздела фаз воздух-жидкость. Данная часть исследования позволила определить концентрацию при которой происходит снижение поверхностного натяжения олигомера (с 62 до 48 мН/м), что позволяет улучшить смачиваемость наполнителя олигомером, улучшить адсорбционное взаимодействие на границе раздела фаз олигомер-наполнитель, т.е использовать предложенные соединения как компатибилизаторы уретанобразующих составов.

Известно, что введение фторированных фрагментов в структуру полимерных цепей позволяет добиться повышения термической и химической устойчивости материалов. Так 20% потеря массы наблюдается при температуре на 35<sup>0</sup>С выше, чем у материала не содержащего фторированные фрагменты. Что касается водопоглощения, то наблюдается увеличение стойкости материала к действию воды вследствие повышения гидрофобизации материала, за счет встраивания атомов фтора в макромолекулу ПУ и возросшему уровню адсорбционного взаимодействия.

Таким образом, использование глицериновых эфиров 1,1,7-тригидрофторгептанола способствует повышению термической устойчивости, увеличению водостойкости и химической стойкости отвержденных наполненных полиуретанов, а так же позволяет улучшить совместимость между наполнителем и связующим.

## ИССЛЕДОВАНИЕ РЕОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕРНЫХ И ОРГАНИЧЕСКИХ ОТХОДОВ

*Карев А.И., Чавров С.А., Лебедев В.В.,*

Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт»  
[vladimirlebedev@bk.ru](mailto:vladimirlebedev@bk.ru)

В настоящее время проблема утилизации промышленных отходов различных отраслей промышленности является наиболее важной с точки зрения безопасности и успешности будущих поколений. Значительную долю во всем объеме отходов составляют полимерные материалы, которые применяются практически во всех сферах жизнедеятельности человека. Последнее время находят широкое распространение полимерные композиционные материалы на основе отходов термопластов (полиэтилена (ПЭ), полипропилена (ПП) и др.) с применением органических отходов (опилки, отходы орехов и т.п.). Интересным является оптимизация их составов с целью получения материалов и изделий с высокими технологическими и эксплуатационными характеристиками.

Целью работы является исследование реологических характеристик древесно-полимерных материалов на основе отходов полипропилена (ВПП) и органических отходов и подбор оптимального их состава для переработки их методом литья под давлением в зависимости от состава, содержания наполнителей, его вида и дисперсности.

На одношнековом лабораторном экструдере был получен древесно-полимерный материал на основе ВПП и органических отходов (древесная мука, мука хвой, лиственная мука) с содержанием древесной составляющей от 10 до 50%. Реологические свойства материала определялась при скоростях сдвига, характерных для переработки методом литья под давлением. Изучение реологических характеристик образцов проводили на капиллярном вискозиметре постоянного тока марки ИИРТ-АМ-1.

Были проведены исследования реологических характеристик материала с древесной мукой, мукой хвой и листы. Результаты исследований представлены на рис. 1.

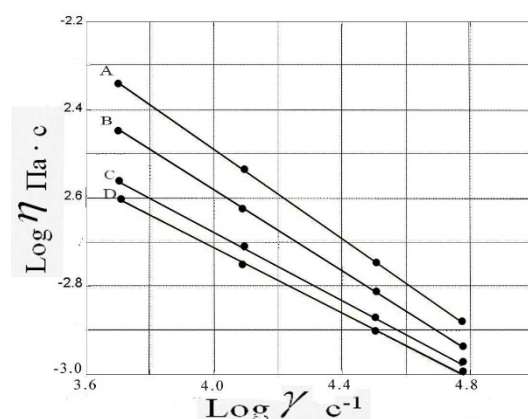


Рис. 1. Зависимость эффективной вязкости от градиента скорости древесно-полимерных материалов при различных видах органического наполнителя: А - древесная мука, В - мука хвой, С - мука листы, D - полипропилен.

## КІНЕТИЧНІ ЗАКОНОМІРНОСТІ (КО)ПОЛІМЕРИЗАЦІЇ МЕТИЛАКРИЛАТУ З ДЕЦИЛМЕТ- ТА ДЕЦИЛАКРИЛАТОМ В ЕМУЛЬСІЇ

*Коваленко Т.П., Сердюк В.О.*

Національний університет “Львівська політехніка”

[serdjuklvov@gmail.com](mailto:serdjuklvov@gmail.com)



Полімери, одержані на основі одного мономера, часто не можуть задовольнити цілого комплексу вимог до сучасних матеріалів. У зв'язку з цим все ширше застосування знаходять композиції на базі різноманітних за природою і функційністю мономерів. Шляхом підбору відповідних компонентів і регулювання їх співвідношення можна одержувати кополімери, що відповідають цільовим практичним вимогам. Так, кополімери на основі моно- і поліфункційних акрилатів та метакрилатів характеризуються низкою цінних експлуатаційних властивостей, а тому знаходять широке використання в різних галузях промисловості, зокрема, у поліграфії для отримання фотополімерних друкарських форм, в цифрових інформаційних технологіях при виготовленні оптичних дисків для лазерних систем зчитування інформації, в медицині: ортопедії як кісткові цементи, стоматології при виготовленні фотополімерних пломб, офтальмології для виготовлення внутріочних лінз (IOL), в будівництві та побуті (захисні покриття, ґрунтовки, клеї, гелі, герметики, лакофарбові матеріали, високопроникні полімерні мембрани і т. д.).

У зв'язку з цим було поставлено завдання – дослідити особливості кінетики емульсійної (ко)полімеризації метилакрилату (МА) з децилмет- та децилакрилатом (Д(М)АК) з метою одержання багатофункційних полімерів.

Емульсійну полімеризацію Д(М)АК досліджували з метою отримання гребенеподібних полімерів з більшими значеннями молекулярної маси, ніж одержані під час полімеризації у розчині та з метою збільшення виходу полімерів до 100 %.

Ініціювання гомополімеризації здійснювали водорозчинним персульфат амонієм та розчинним у мономерах ініціатором – пероксидом бензоїлу. Для стабілізації колоїдної системи використовували як аніонактивний емульгатор – сульфонол, так і емульгатор змішаного типу – САФ 9-10, а полімеризацію здійснювали за температур 70, 80 та 90 °С. Виявилося, що незалежно від використаних співвідношень компонентів та температури емульсійна гомополімеризація Д(М)АК не відбувалася.

Застосування МА для залучення Д(М)АК до емульсійної кополімеризації з концентрацією останнього 50 – 95 % мас. не дало позитивного результату. Натомість емульсійна полімеризація МА з Д(М)АК відбувалася за вмісту останнього мономера менше за 50 % мас.

Проведені кінетичні дослідження полімеризації МА з Д(М)АК в емульсії показали, що ДАК та ДМАК стрімко сповільнюють емульсійну полімеризацію та зменшують вихід полімеру.

Водні дисперсії МА з вмістом Д(М)АК до 25 % мас. синтезували дозуванням мономерної суміші з передемульсії за температури 70 °С. За цих умов досягалося повне перетворення мономерів на полімер, що забезпечувало відповідність складу кополімеру складу вихідної мономерної суміші. Застосування Д(М)АК у вказаних концентраціях не впливало на стабільність колоїдної системи під час синтезу та мало впливало на розмір частинок.

Враховуючи, що сухий залишок у всіх синтезованих дисперсіях має близькі значення, розмір частинок приблизно однаковий, можна вважати, що основним чинником, який впливає на реологічні властивості дисперсій гребенеподібних полімерів є характер взаємодії частинок з водною фазою, який в свою чергу залежить від складу кополімерів.

## ЙОННІ РІДИНИ НА ОСНОВІ ДИЧЕТВЕРТИННИХ АМОНІЄВИХ СОЛЕЙ (ПОХІДНІ МОРФОЛІНУ) ЯК КОМПОНЕНТИ РІДКИХ ПОЛІМЕРНИХ ЕЛЕКТРОЛІТІВ ДЛЯ ЕЛЕКТРОХІМІЧНИХ ПРИСТРОЇВ

Свердліковська О.С., Бурмістр М.В., *Коваль К.Ю.*

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»

[osverdlikovska@rambler.ru](mailto:osverdlikovska@rambler.ru)

У теперішній час актуальним є синтез нових низькотемпературних йонних рідин (ЙР), які використовуються в якості компоненти рідких і полімерних електролітів для різних електрохімічних пристроїв (в літєвих батареях, конденсаторах, сонячних батареях).

Нами синтезовано ряд дичетвертинних амонієвих солей – похідних морфоліну з аніонами галогенів (ДЧАСГ). Виявлено, що ДЧАСГ є йонними рідинами нового типу, що розчинні у воді, органічних розчинниках. Встановлено, що синтезовані ЙР мають температуру склування у діапазоні від  $-128^{\circ}\text{C}$  до  $-75^{\circ}\text{C}$  та високу йонну провідність  $\sim 10^{-2}-10^{-3}$  См·см $^{-1}$ . Тобто йонна провідність таких ДЧАСГ на три порядки нижче при значно меншій температурі склування порівняно з раніше відомими сполуками.

Тому направлений синтез нових ЙРДЧАС з аніоном фосфату (ЙРДЧАСФ) загальної формули



Синтезовано нові ЙРДЧАС на основі морфоліну та ортофосфорної кислоти. Проведено реакцію заміщення аніонів хлору або броду у ДЧАС на гідроксид аніон.

Структуру синтезованих нових ЙРДЧАСФ підтверджено елементним аналізом, ІЧ-спектроскопією.

Досліджено фізико-хімічні властивості ЙРДЧАСФ пікнометричним, оптичним методами. Виявлено, що шляхом варіювання катіон/аніонного складу ЙРДЧАСФ та їх співвідношення у складі багатокомпонентних композицій є можливим отримати імерсійну рідину з різними коефіцієнтами заломлення. Тому ДЧАС можуть бути рекомендованими як імерсійні рідини у повірочних методиках для різного типу рефрактометрів замість  $\alpha$ -бромнафталіну.

Досліджено питому та молярну йонну провідність нових ЙРДЧАСФ. Встановлено, що йонна провідність ЙРДЧАСФ складає  $10^{-6}-10^{-3}$  См·см $^{-1}$ . Тобто йонна провідність таких ЙРДЧАСФ на один-три порядки нижча порівняно з раніше відомими ЙРДЧАСГ.

Виявлено вплив температури, симетричності та наявності різних функціональних груп у радикалі катіонної частини нових ЙРДЧАСФ на їх йонну провідність.

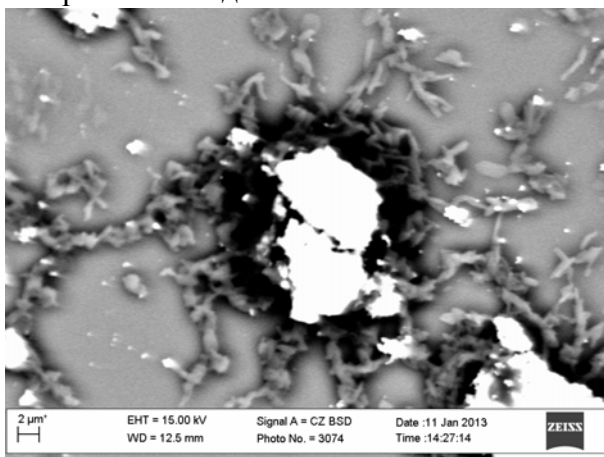
Нові ЙРДЧАСФ можуть бути рекомендованими до застосування як компоненти електролітів мембран для високотемпературних паливних елементів нового типу; розчинника, реагенту та каталізатора у каталітичних реакціях з участю комплексів перехідних металів; як імерсійні рідини у різних оптичних вимірюваннях.

ЕЛЕКТРОХІМІЧНА АКТИВНІСТЬ КОМПОЗИТУ ПОЛІАНІЛІН-СРІБЛО  
ОТРИМАНОГО ЕМУЛЬСІЙНОЮ ПОЛІМЕРИЗАЦІЄЮ*Корень Я.М.*

Львівський національний університет імені Івана Франка

[koryar@ukr.net](mailto:koryar@ukr.net)

Шляхом емульсійної полімеризації в водно-органічному середовищі було отримано композит поліанілін-срібло. До першого розчину (4,5 г натрій додецилсульфату розчиненого в 15 мл 1М НСІ) додавали 0,64 г  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_8$ , 3 мл  $\text{C}_4\text{H}_9\text{OH}$ , 40 мл  $\text{C}_6\text{H}_{14}$ . Перемішували на протязі 20 хв до однорідного стану після чого по краплях при перемішуванні додавали 0,5 мл аніліну і розраховану кількість розчину  $\text{AgNO}_3$ . Реакцію проводили при постійному перемішуванні, за кімнатної температури на протязі 24 год.



Для отриманого композиту було знято зображення електронної мікроскопії. Розмір окремих частинок становив близько 10 мкм, ядро складається із срібла, згідно результатів елементного аналізу. Від центрального утворення відходять дендритоподібні відростки.

Для перевірки електрохімічної активності композиту була обрана реакція окиснення глюкози в лужному середовищі. Дослідження проводилися за допомогою спеціально сконструйованого

платиновий мікроелектрод із циліндричним заглибленням, куди поміщався досліджуваний зразок.

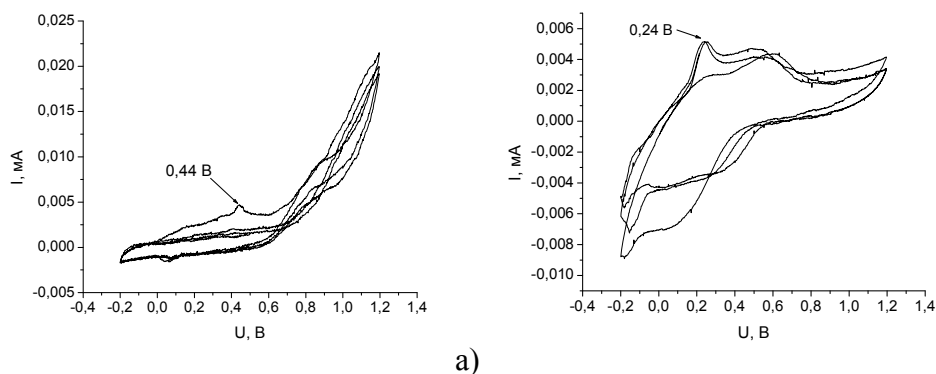


Рис. 1. - ЦВА зняті в середовищі 0,1М NaOH + 0,1М  $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$ ; швидкість розгортки – 50 мВ/с. а) – платиновий електрод; б) – композит.

Реакція окиснення глюкози на поверхні платиновий електроду відбувається при потенціалі 0,4 В. В присутності композиту, що містить дрібнодисперсне срібло потенціал окиснення зміщується в катодну область до 0,24 В, при цьому струми окиснення зростають приблизно в два рази.

Отриманий композит можна використати, як електродний матеріал при конструюванні глюкозетричних сенсорів, так як його собівартість менша, ніж у чистої платини, а електрохімічний відклик більший при нижчих потенціалах.

## ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ ЭПОКСИДНО-КРЕМНЕЗЕМНЫХ КОМПОЗИТОВ АМИННОГО ОТВЕРЖДЕНИЯ

*Кучер Я.Ю., Лыга Р.И., Гуртовой Д.В., Михальчук В.М.*

Донецкий национальный университет

lygarita@mail.ru

Получение нанокмпозиционных материалов по-прежнему остается перспективным направлением химии высокомолекулярных соединений. Использование золь-гель технологии позволяет формировать многокомпонентные полимерные системы высокой степени однородности и дает возможность контролировать размер наночастиц наполнителя в процессе их синтеза. Полученные золь-гель методом органо-неорганические композиты на основе эпоксидных смол и алкоксисиланов обладают рядом ценных эксплуатационных свойств: термической и химической стойкостью, высокой адгезией к различным поверхностям и др. Поэтому такие системы могут быть использованы в качестве эффективных защитных покрытий, в том числе, для алюминиевых сплавов, применяемых в самолетостроении.

Целью данной работы было получить прозрачные тонкие (10 мкм) эпоксидно-кремнеземные покрытия на поверхности пластин алюминиевого сплава Д16 (на закрытой поверхности) и оценить их устойчивость к воздействию агрессивной среды и антикоррозионные свойства. Полимерные системы формировали на основе диглицидилового эфира дициклогексилпропана (смолы EPONEX 1510) и аминопропилтриэтоксисилана (АПТЭС). Отверждение эпоксидной смолы проводили с использованием поли-(оксипропилен)триамина (отвердитель Jeffamine® T403). Концентрация кремнеземных частиц, образующихся в результате кислотного гидролиза АПТЭС и последующей поликонденсации, составляла от 0,5 до 1,0 мас.% относительно массы эпоксидной составляющей в композите.

Методом решетчатых надрезов установлено, что адгезия органо-неорганических композитов к поверхности алюминиевого сплава Д16 составляет максимальный 1 балл. После выдерживания пластин с нанесенными на них покрытиями в 3 %-ном водном растворе NaCl в течение нескольких суток адгезия композитов не снижается. Однако на устойчивость покрытий к воздействию солевого раствора оказывает влияние содержание кремнеземного наполнителя в композите. Покрытия, содержащие 0,5 мас.% кремнезема, начинали заметно отслаиваться от металлической подложки через 6 суток экспозиции, тогда как при 1 мас.% наполнителя по истечении 21 суток полимерное покрытие не отслоилось.

Изучение антикоррозионных свойств композиционных покрытий проводили электрохимическим методом в 3 %-ном водном растворе NaCl. Установлено, что использование данных эпоксидно-кремнеземных покрытий повышает антикоррозионное сопротивление подложки на порядок: от 0,25 кОм·см<sup>2</sup> для непокрытой пластины до 1,81 – 2,39 кОм·см<sup>2</sup> для покрытого сплава. Плотность тока коррозии при содержании кремнеземного наполнителя в покрытии 0,5 – 1,0 мас.% составила  $1,38 \cdot 10^{-5}$  –  $1,05 \cdot 10^{-5}$  А·см<sup>-2</sup> по сравнению с плотностью тока коррозии сплава без покрытия  $1,00 \cdot 10^{-4}$  А·см<sup>-2</sup>. Кроме того, значения потенциала коррозии и потенциала питтинговой коррозии алюминиевого сплава, покрытого композиционным покрытием, увеличиваются от -660 и -650 мВ (для субстрата без покрытия) до -603, -645 мВ и -578, -610 мВ соответственно. Это также является признаком меньшей восприимчивости покрытого субстрата к коррозии. Рассчитанная эффективность антикоррозионной защиты алюминиевого сплава Д16 эпоксидно-кремнеземными покрытиями аминного отверждения, содержащими 0,5 – 1,0 мас.% наполнителя, составила 86,2 – 89,5 %.

**ВПЛИВ ПОЛІМЕРНОГО МОДИФІКАТОРА НА ВИВІЛЬНЕННЯ  
ДИЕСТЕРФТАЛАТНИХ ПЛАСТИФІКАТОРІВ  
З ПОЛІВІНІЛХЛОРИДНИХ ПЛАСТИКАТІВ**

*Ларук Ю.В., Кобзар Т.М., Левицький В.Є.*

Національний університет "Львівська політехніка"

[akerlem@gmail.com](mailto:akerlem@gmail.com)

Сьогодні підвищена увага приділяється пластифікованим полівінілхлоридним (ПВХ) матеріалам. Направлено регулювати технологічні та експлуатаційні властивості пластифікованих ПВХ матеріалів можна в широкому діапазоні суміщенням з іншими термопластами. Серед методів одержання таких матеріалів технологічно доцільним і економічно обґрунтованим вбачається попереднє розчинення термопласту у пластифікаторі з подальшим введенням дрібнодисперсного ПВХ.

Серед пластифікаторів для виробництва еластичних матеріалів на основі ПВХ широко використовують диестери фталевої кислоти, які мають підвищену спорідненість до ПВХ, значну пластифікаційну здатність, високі температури кипіння. Поряд з цим, вони мають не достатньо низьку міграційну здатність з об'єму полімеру. Слід також відзначити, що ці пластифікатори здатні розчиняти цілий ряд термопластичних полімерів, зокрема суспензійний і удароміцний полістирол, акрилонітрилбутадієнстирольний (АБС) пластик. Модифікування ПВХ термопластичними полімерами з розчину пластифікатора дає можливість рівномірно розподілити полімер-модифікатор в об'ємі ПВХ. Цей метод дозволяє направлено регулювати необхідні властивості матеріалів без ускладнень технологічного процесу.

Під час пластифікації ПВХ пластифікаторами різної природи, зокрема диестерами фталевої кислоти – дибутилфталатом (ДБФ), диоктилфталатом (ДОФ), дтізононілфталатом (ДІНФ) – вирішальну роль відіграють явища, пов'язані з сумісністю компонентів. Виявлено, що введення полімеру-модифікатора, який попередньо розчинений в пластифікаторі, збільшує змочуваність полівінілхлориду пластифікатором, що у свою чергу покращує сумісність компонентів і технологічність приготування композицій. Кут змочування пластифікатором полівінілхлоридної поверхні та робота адгезії при цьому в значній мірі залежить від природи пластифікатора та розчиненого в ньому полімеру (суспензійний і удароміцний полістирол, АБС пластик). Слід відзначити, що значення змочуваності ПВХ поверхні досліджуваними пластифікаторами зростає у ряду пластифікаторів: ДБФ – ДІНФ – ДОФ, про що свідчить значення кута змочуваності поверхні та значення роботи адгезії. При цьому використання суміші пластифікаторів призводить до усереднення значення кута змочування. Введення полімерного модифікатора в кількості 2 мас. % в пластифікатор, незалежно від його природи, призводить до зменшення значення кута змочування, тобто до підвищення змочуваності полівінілхлоридної поверхні, що, швидше за все, пов'язано зі зміною термодинамічних характеристик.

Встановлені кінетичні закономірності процесу вивільнення пластифікаторів залежно від їх природи та природи полімера-модифікатора. Обґрунтовано вплив полімеру-модифікатора на ступінь вивільнення пластифікатора. Встановлено, що введення термопласту в суміш призводить до зменшення ступеня мігрування пластифікатора, що особливо проявляється для більш еластичних матеріалів.

Отже, введення полістирольних пластиків, розчинених в пластифікаторі, в полівінілхлоридні композиції призводить до підвищення технологічної сумісності компонентів і до значного пониження ступеня мігрування диестерфталатних пластифікаторів з об'єму матеріалу, що дозволяє зберігати тривалий термін необхідні властивості виробів під час їхньої експлуатації.

## ОСОБЛИВОСТІ ЕЛЕКТРИЧНОЇ ТА ОПТИЧНОЇ ПЕРКОЛЯЦІЇ В СИСТЕМАХ НА ОСНОВІ ПОЛІПРОПІЛЕНГЛІКОЛЮ ТА ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБОК

Яковлев<sup>1</sup> Ю.В., Лисенков<sup>1,2</sup> Е.А., Клепко<sup>1</sup> В.В.

<sup>1</sup>Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України

<sup>2</sup>Миколаївський національний університет ім. В.О. Сухомлинського  
[ealisenkov@mail.ru](mailto:ealisenkov@mail.ru)

Більшість аномалій фізичних властивостей (магнітних, оптичних, електричних, механічних та інших) спостерігаються в нанонаповнених композитах з концентрацією наповнювача поблизу порогу перколяції ( $p_c$ ), коли наночастки формують провідну кластерну структуру в діелектричній матриці.

У даній роботі основна увага була зосереджена на двох фундаментальних фізичних властивостях нанонаповнених систем: електропровідність і оптична прозорість. Дослідження саме цих властивостей викликає як фундаментальний інтерес, так і є важливим з прикладної точки зору, завдяки застосуванню таких систем для створення прозорих електропровідних покриттів.

В результаті проведених досліджень було показано, що в системі ППГ-ВНТ при невеликому додаванні нанотрубок відбуваються два процеси перколяції: електрична та оптична. Було показано, що явища оптичної та електричної перколяції значно відрізняються як за механізмами так і за отриманими параметрами. Перколяційні параметри для електричної та поточної перколяції, такі як пороги перколяції та критичні індекси були отримані відповідно до класичної та решіткової перколяційних теорій відповідно. Поріг електричної перколяції становить 0,45%, а поріг оптичної перколяції – 0,01%.

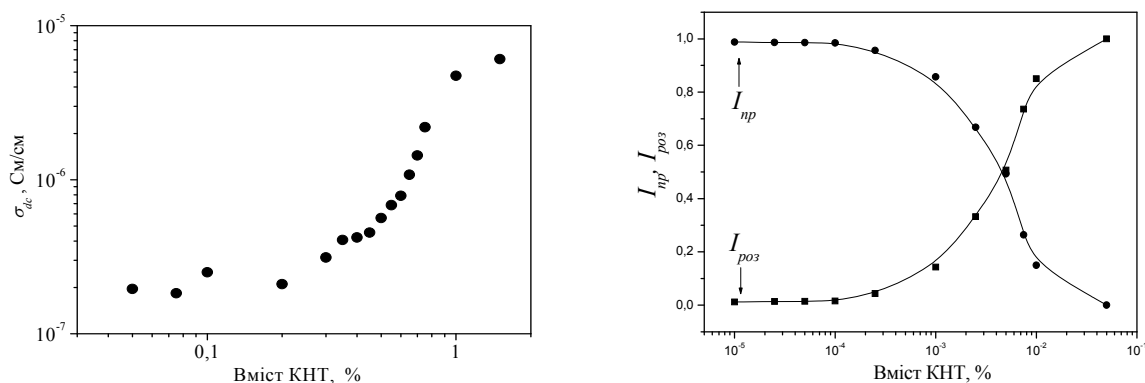


Рис. 1. Перколяційні криві для систем на основі ППГ-400 наповнених ВНТ: а) електрична перколяція; б) оптична перколяція.

Аналіз величин порогів перколяції показав, що для системи ППГ-ВНТ поріг оптичної перколяції на порядок нижчий за пороги, отримані для інших систем. Цей факт робить даний матеріал дуже перспективним для використання у виробництві полімерних покриттів з контрольованою прозорістю та оптичних сенсорів.

Було встановлено, що поріг електричної перколяції лежить у концентраційному діапазоні, в якому повністю зникає прозорість системи. Цей ефект робить систему ППГ-ВНТ перспективною для використання у оптичних електропровідних матеріалах, тобто візуально спостерігаючи за прозорістю матеріалу можна контролювати його електропровідність.

## СИНТЕЗ ПОЛІУРЕТАНСЕЧОВИН З ІММОБІЛІЗОВАНИМ ФОЛАТ-КОН'ЮГОВАНИМ ФЕРОЦЕНОМ

*Макеєва Л.В., Гладир І.І., Демченко І.Б.*

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України

[lyudmila.makeeva@gmail.com](mailto:lyudmila.makeeva@gmail.com)

Мета роботи – розробка методів синтезу та дослідження нових біологічно активних плівкових матеріалів на основі поліуретансечовин (ПУС) та фолат-кон'югованого фероцену (ФКФ).

Поліуретансечовини з фізично іммобілізованим ФКФ синтезували на основі поліоксипропіленгліколю (ПОПГ, ММ = 1002) та 2,4-;2,6-толуїдендіізоціанату (ТДІ 80/20), з використанням як подовжувачів макроланцюга ді- і триамінів, а саме: 1,6-гексаметилендіаміну (ГМДА), 4,4'-диамінодифенілметану (ДАДФ) та 2,4,6-триамінопіримідину (ТАПР). Плівковий матеріал отримували із 20 %-го розчину полімеру у диметилацетаміді (ДМАА) з подальшим висушуванням при  $(70 \pm 5)$  °С протягом 72 год.

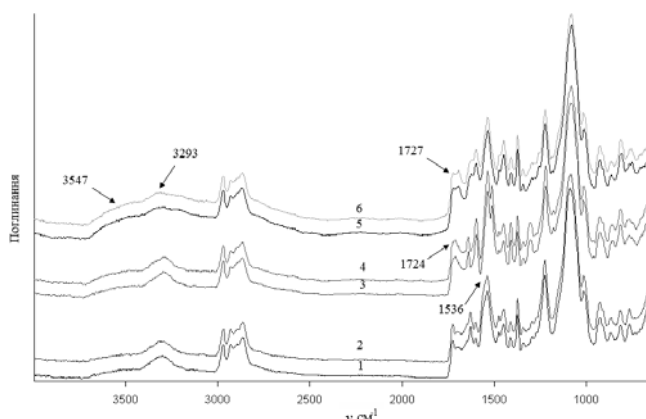


Рис. 1. ІЧ-спектри:

- 1 – МДІ+ГМДА;
- 2 – МДІ+ГМДА+0,5%ФКФ;
- 3 – МДІ+ДАДФ;
- 4 – МДІ+ДАДФ+0,5%ФКФ;
- 5 – МДІ+ТАПР;
- 6 – МДІ+ТАПР+0,5%ФКФ.

усі одержані полімерні матеріали є поліуретансечовинами. На ІЧ-спектрах спостерігається поява широкої смуги в інтервалі від 3400 до 3700  $\text{cm}^{-1}$  з приблизним максимумом при 3547  $\text{cm}^{-1}$ , що свідчить про утворення водневих зв'язків NH-групами.

Фізико-механічні характеристики синтезованих полімерних матеріалів представлені у таблиці.

№	Зразок	$\sigma$ , МПа	$\epsilon$ , %
1	МДІ+ГМДА	4,14±0,02	130±2,6
2	МДІ+ГМДА+0,5%ФКФ	3,71±0,13	144±0,8
3	МДІ+ДАДФ	1,66±0,02	30±1,4
4	МДІ+ДАДФ+0,5%ФКФ	2,56±0,03	60±1,3
5	МДІ+ТАПР	0,62±0,02	64±0,7
6	МДІ+ТАПР+0,5%ФКФ	0,53±0,01	39±1,0

Проведені фізико-механічні дослідження дозволили встановити, що високу міцність при розриві ( $\sigma$ , МПа) і відносьне подовження ( $\epsilon$ , %) мають зразки, у яких як подовжувач макроланцюга був використаний 1,6-гексаметилендіамін та наповнені фолат-кон'югованим фероценом.

## ЙОННІ РІДИНИ НА ОСНОВІ ЧЕТВЕРТИННИХ АМОНІЄВИХ СОЛЕЙ (ПОХІДНІ МОРФОЛІНУ) ЯК КОМПОНЕНТИ ПОЛІМЕРНИХ ЕЛЕКТРОЛІТІВ ДЛЯ ЕЛЕКТРОХІМІЧНИХ ПРИСТРОЇВ

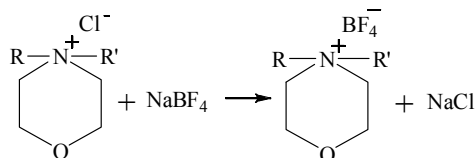
Свердліковська О.С., Бурмістр М.В., *Матійчук А.І.*

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»

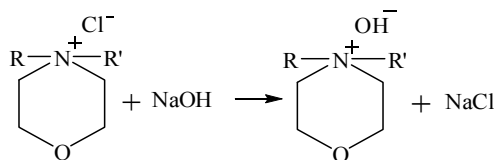
[osverdlikovska@rambler.ru](mailto:osverdlikovska@rambler.ru)

Метою даної роботи направлений синтез нових йонних рідин на основі четвертинних амонієвих солей (похідних морфоліну) з аніоном тетрафторборату (ЙРЧАСМТ) та фосфату (ЙРЧАСМФ), які можуть бути використані як компоненти полімерних електролітів для різних електрохімічних пристроїв.

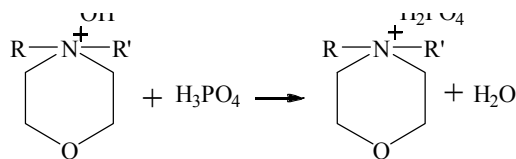
Загальна схема синтезу ЙРЧАСМТ має наступний вигляд



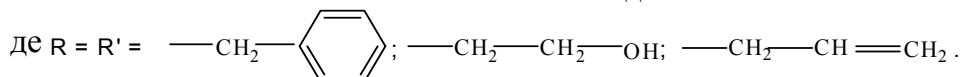
Загальна схема синтезу ЙРЧАСМФ має наступний вигляд



I стадія



II стадія



Структуру синтезованих ЙРЧАСМТ та ЙРЧАСМФ підтверджено елементним аналізом, ІЧ-спектроскопією. Досліджено фізико-хімічні властивості ЙРЧАСМТ та ЙРЧАСМФ пікнометричним, оптичним, потенціометричним та аргентометричним методами.

Показано, що для розглянутого ряду ЙРЧАСМТ та ЙРЧАСМФ характерний високий рівень йонної провідності. Встановлено, що йонна провідність йонних рідин на основі четвертинних амонієвих солей – похідних морфоліну з аніоном тетрафторборату та фосфату складає  $10^{-2}$ – $10^{-3}$  См·см<sup>-1</sup>. Виявлено, що заміна аніонів хлору у ЙРЧАСМ на аніон тетрафторборату або фосфату приводить до збільшення йонної провідності на порядок. Досліджено вплив зовнішніх факторів і структурних властивостей на питому та молярну йонну провідність нових ЙРЧАСМТ та ЙРЧАСМФ. Показано, що температурна залежність йонної провідності досліджуваних ЙРЧАСМТ та ЙРЧАСМФ відповідає рівнянню Арреніуса. Виявлено вплив симетричності катіонної частини, наявності функціональних груп у радикалі катіону ЙРЧАСМТ та ЙРЧАСМФ на їх йонну провідність. Встановлено аналогічну залежність йонної провідності ЙРЧАСМ з аніоном галогену від симетричності їх катіонної частини, однак протилежний вплив функціональних груп йонної провідності ЙРЧАСМ з аніоном галогену на їх йонну провідність.

**ВПЛИВ НАНОНАПОВНЮВАЧА НА ТЕПЛОФІЗИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ  
ПОЛІМЕРНИХ КОМПОЗИТІВ НА ОСНОВІ ПОЛІЕТИЛЕНУ**Дінжос Р.В., *Новак Л.І.*Миколаївський національний університет ім. В.О. Сухомлинського  
[dinzhos@mail.ru](mailto:dinzhos@mail.ru)

Вивчення кінетики кристалізації з одного боку має велике значення для визначення умов формування та переробки виробів з полімерів, що здатні до кристалізації. З іншого боку, фізичні властивості полімерних матеріалів сильно залежать від їх мікрокристалічності [1,2]. Саме тому, наразі велика увага приділяється регулюванню кристалічності як одного із методів отримання матеріалів з напередзаданими властивостями [3].

Карбонатрубки (КНТ) є ефективними наповнювачами для полімерних матриць завдяки їх високій спорідненості до карбонанцюговим полімерів [4,5]. Саме завдяки цьому, а також їх малим розмірам при високій питомій поверхні та власній теплопровідності вони здатні значним чином впливати на процеси структуроутворення при кристалізації полімерів [6].

Дана робота присвячена вивченню впливу КНТ на механізм та кінетику кристалізації поліетилену (ПЕ)

Об'єктами дослідження слугували чистий ПЕ і нанокомпозити (НК) що містять 0,5; 1; 2; 5; 10 масових відсотка КНТ. Багатошарові КНТ (виробник <sup>TM</sup>FIBRIL Trademark of Hyperion Catalysis International, Inc., USA) мають зовнішній діаметр 10-15 нм, довжину 10 мкм та густину 2200 кг/м<sup>3</sup>.

Неізотермічну кристалізацію було досліджено в процесі охолодження методом ДСК (установка Перкіна Елмера DSC-2, модернізована, обладнана програмним забезпеченням від IFA Gmb, Ulm).

Кожен зразок був спочатку нагрітий до 450 К та витриманий у розплаві на протязі трьох хвилин. Термограми ДСК отримували в процесі охолодження до 340 К при швидкостях  $q = 0,5; 1,0; 2,0; 5,0; 10,0$  К/хв).

1. *Min-Kang Seo, Jae-Rock Lee, Soo-Jin Park.* Crystallization kinetics and interfacial behaviors of polypropylene composites reinforced with multi-walled carbon nanotubes// Materials Science and Engineering .– 2005. –V. A 404. – P. 79–84.
2. *Bhattacharyya Arup R., Sreekumara T.V., Liua Tao and at.* Crystallization and orientation studies polypropylene/single wall carbon nanotube composite //Polymer. – 2003. –V. 44, – P. 2373–2377.
3. *Razavi-Nouri M., Ghorbanzadeh-Ahangari M., Fereidoon A., Jahanshahi M.* Effect of carbon nanotubes content on crystallization kinetics and morphology of polypropylene // Polymer Testing.– 2009. – V. 28, № 1. – P. 46-52.
4. *Hammel E., Tang X., Trampert M., Schmitt T., Mauthner K., Eder A. and Pötschke P.* Carbon nanofibers for composite applications// Carbon.– 2004.– V. 42, № 5-6.– P. 1153-1158.
5. *Sishen X., Li W., Pan Z., Chang B., Sun L.* Carbon nanotube arrays// Materials Science and Engineering .– 2000.–V. 286, № 1.– P. 11-15.
6. *Valentini L., Biagiotti J., M. A. Lopez-Manchado, Santucci S. and Kenny J. M.* Effects of Carbon Nanotubes on the Crystallization Behavior of Polypropylene. – Polymer Eng. and Sci., 2004, Vol. 44, No. 2. – P. 303-311.

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОСТАВА И СТРУКТУРЫ ВОЛОКОН, ВХОДЯЩИХ В  
СОСТАВ ИЗВЕСТКОВО-КРЕМНЕЗЕМИСТЫХ  
ТЕПЛОИЗОЛЯЦИОННЫХ ИЗДЕЛИЙ**

*Носова А.Н.*

ООО «Донецкая компания инноваций «Технические пластические массы»

[zhesilver@rambler.ru](mailto:zhesilver@rambler.ru)

Одним из важнейших путей экономии топливно-энергетических ресурсов является минимизация тепловых потерь через конструкции котловых агрегатов, технологического оборудования и трубопроводов.

К числу перспективных направлений относится разработка жесткоформованных теплоизоляционных материалов, обладающих высокими теплоизолирующими свойствами, сохраняющимися на протяжении не менее 20 лет при эксплуатации в температурном интервале  $-170\div+600^{\circ}\text{C}$ , прекрасными физико-механическими свойствами, возможностью механической обработки, 100% ремонтпригодностью и безопасностью при использовании.

Всем этими характеристикам отвечает известково-кремнеземистая теплоизоляция.

Известково-кремнеземистые изделия производятся путем формования и последующей гидротермальной обработки водной суспензии тонкоизмельченной смеси извести и кремнеземистого материала с небольшим количеством (до 4%) хризотил-асбеста, выполняющего армирующую функцию.

В настоящее время вопрос о неблагоприятном воздействии на организм человека волокон хризотил-асбеста продолжает вызывать оживленную дискуссию и окончательно не решен. Поэтому представляло интерес исследовать влияние на структуру волокон хризотил-асбеста, входящих в состав известково-кремнеземистых изделий, технологических факторов, которым подвергаются волокна (температура до  $200^{\circ}\text{C}$ , щелочная среда, давление до 10 атм).

Исследования, проведенные совместно с Белгородским государственным национальным исследовательским университетом, которые включали в себя электронную микроскопию: светодипольное исследование суспензий в сочетании с микродифракцией электронов и энергодисперсионным определением химического (элементного и оксидного) составов – показали, что в результате воздействия технологических приемов, используемых при производстве известково-кремнеземистых теплоизоляционных изделий, асбестовые волокна частично разрушаются, поверхность волокон корродирует (происходит выщелачивание ионов магния из верхнего и последующих октаэдрических слоев) и покрываются слоем гидросиликата и карбоната кальция. Гидросиликат кальция образуется в результате хемосорбции ионов кальция в вакантные позиции октаэдрического слоя с образованием сначала промежуточного магний-кальциевого октаэдрического слоя, на котором хемосорбируются кремнекислородные анионы с созданием кремнекислородного тетраэдрического слоя, на который в свою очередь адсорбируются кремнекислородные анионы, с созданием следующего кремнекислородного тетраэдрического слоя.

Таким образом, волокна, входящие в состав известково-кремнеземистых изделий, представляют собой новую фазу с поверхностью, соответствующей карбонизированному гидросиликату кальция, и не могут быть отнесены к группе серпентинов, в частности к хризотил-асбесту.

**ФОТОКАТАЛІТИЧНА ДЕГРАДАЦІЯ МЕТИЛОРАНЖУ З ВИКОРИСТАННЯМ ДІОКСИДУ ТИТАНУ ТА РІЗНИХ ПОХІДНИХ  $\beta$ -ЦИКЛОДЕКСТРИНУ***Опанасенко О.А., Сінельников С.І., Рябов С.В.*

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України

[lena\\_opanassenko@mail.ru](mailto:lana_opanassenko@mail.ru)

Однією з головних проблем сьогодення є постійне зростання кількості органічних забруднювачів в навколишньому середовищі (в першу чергу повітрі та воді). Гетерогенний фотокаталіз з використанням напівпровідникових матеріалів є перспективним методом очистки природних вод від забруднюючих речовин природного та техногенного походження.

Нами була досліджена фотокаталітична деградація метилоранжу в присутності діоксиду титану з кристалічною модифікацією анатаза (Degussa P25) та  $\beta$ -циклодекстрину ( $\beta$ -ЦД) і його функціоналізованих похідних.

Циклодекстрини (ЦД) – циклічні олігосахариди, які завдяки своїй будові здатні формувати комплекси типу «господар/гість» з іншими сполуками. Оскільки внутрішня порожнина макроциклу ЦД є гідрофобною, то він здатен утворювати комплекси включення у водних розчинах з великою кількістю молекул органічної і неорганічної природи. Введення похідних ЦД в середовище, де проходять фотокаталітичні процеси за участі діоксиду титану, дозволяє прискорити фотодеградацію органічних сполук за рахунок збільшення їх адсорбції на поверхні  $\text{TiO}_2$ .

Для експериментів нами було використано низку фізико-хімічних методів, а саме ІЧ-спектроскопію, УФ-спектроскопію, адсорбцію.

Спочатку була досліджена швидкість фотодеградації метилоранжу без додавання  $\beta$ -ЦД та його похідних. Практично повне знебарвлення барвника відбувалося через 4 години, при опроміненні УФ-лампю потужністю 26 Вт з максимумом випромінювання при довжині хвилі  $\lambda=365$  нм.

В якості похідних  $\beta$ -ЦД використовували НР- $\beta$ -CD,  $\beta$ -CD-(Ac)<sub>7</sub>,  $\beta$ -CD(Ac)<sub>16</sub>,  $\beta$ -CD(Mal)<sub>8</sub>, які містять різні функціональні групи.

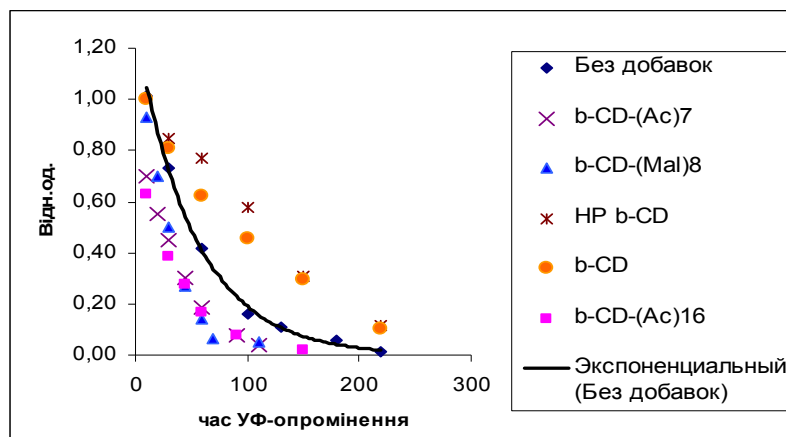


Рис. 1. Вплив похідних  $\beta$ -CD на фотодеградацію метилоранжу.

Результати досліджень свідчать про те, що фотодеградації метилоранжу сприяють такі похідні  $\beta$ -ЦД:  $\beta$ -CD(Ac)<sub>16</sub>,  $\beta$ -CD-(Ac)<sub>7</sub>,  $\beta$ -CD(Mal)<sub>8</sub>. Швидкість фотодеградації барвника в присутності цих добавок збільшується, порівняно з іншими в 1,5-2 рази (рис. 1).

Отримані дані можна використовувати при розробці ефективних методів деструкції органічних речовин, що є забруднювачами водних ресурсів.

**ТЕРМОСТАБІЛЬНІСТЬ ЕПОКСИДНО-СИЛОКСАНОВИХ КОМПОЗИТІВ,  
ОТРИМАНИХ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ МЕТОДОМ**

Павлій П.М., Жильцова С.В., Михальчук В.М.

Донецький національний університет

[svetlana\\_zhiltsova@rambler.ru](mailto:svetlana_zhiltsova@rambler.ru)

Епоксидно-силоксанові композити часто отримують за допомогою золь-гель технології, що сприяє формуванню однорідних за розподілом наповнювача матеріалів з покращеними властивостями. На цей час закономірності впливу наповнювача, отриманого золь-гель методом, на властивості епоксидно-силоксанових композитів ангідридного тверднення, лишаються виявленими не повною мірою. Зокрема, час витримання золів  $\text{SiO}_2$  може істотно змінювати структуру і, відповідно, властивості одержаних композитів. Метою даного дослідження було визначення впливу часу визрівання золів на термостабільність епоксидно-силоксанових композитів, що тверднуть під дією *iso*-метилтетрагідрофталевого ангідриду.

Як основу полімерної матриці обрано триепоксид 1,1-диметилпол-3-циклогексену. Наповнювач формували золь-гель методом з тетраетоксисилану і 3-гліцидоксипропілтриетоксисилану, взятих у мольному співвідношенні 2:1. Отримання золів відбувалося в присутності водного розчину  $\text{HNO}_3$ , епоксидної смоли і ацетону. Час визрівання золів становив 1, 3 і 7 діб перед додаванням твердника. Вміст наповнювача в отриманих композитах становив 1,5, 3,0 і 6,0 мас%. Швидкість поглинання кисню за температури  $200^\circ\text{C}$  встановлено газоволюмометричним методом. Термостабільність досліджено методом дериватографії.

Показано, що при вмісті  $\text{SiO}_2$  1,5 мас% відбувається зниження швидкості поглинання кисню плівковими зразками композитів порівняно з немодифікованим епоксидним полімером, що може бути пов'язано з формуванням безперервної силоксанової структури в полімерній матриці й уповільненням дифузійних процесів у матеріалі. Подальше збільшення вмісту етоксисиланів веде до збільшення швидкості поглинання кисню. Водночас, подовження часу витримання золів від 1 до 7 діб нівелює це явище – відбувається подальше структурування в системі за рахунок поглиблення конденсаційних процесів з утворенням більш розгалужених силоксанових структур, і швидкість поглинання кисню композитами знижується.

Встановлено, що термостабільність отриманих композитів також істотно залежить від вмісту наповнювача і часу визрівання золів. Збільшення концентрації  $\text{SiO}_2$  сприяє більш наявному розділенню стадій деструкції полімерної матриці. Якщо початкова стадія, пов'язана переважно з випаровуванням низькомолекулярних сполук, не підшита до полімерної матриці композиту, лишається майже незмінною, то дві наступні стадії істотніше залежать від вмісту наповнювача – відбувається зсув відповідних максимумів ДТГ у бік вищих температур порівняно з немодифікованим полімером і композитом із вмістом  $\text{SiO}_2$  1,5 мас%. При цьому для композитів із вмістом наповнювача 1,5 мас% показано, що використання стехіометричної кількості води для гідролізу уведених етоксисиланів викликає збільшення термостабільності зразків у порівнянні з отриманими при застосуванні напівстехіометричного співвідношення етоксисилани – вода: максимум ДТГ зразка, витриманого 1 добу, зсувається у бік більш високих температур, і термостабільність композиту стає на рівні системи з напівстехіометричною кількістю води з визріванням золю протягом 7 діб.

Таким чином, використання різної кількості води для гідролізу етоксисиланів, а також зміна часу визрівання золів  $\text{SiO}_2$  дозволяють контролювати ступінь сформованості силоксанових структур, густину зшивання полімерної матриці композитів і, відповідно, термостабільність отриманих матеріалів.

**ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ МОДИФИЦИРОВАННОГО  
ВТОРИЧНОГО ПОЛИЭТИЛЕНА***Семиног В.В.*Институт химии высокомолекулярных соединений НАН Украины  
[seminogv@ukr.net](mailto:seminogv@ukr.net)

В последние годы увеличивается число исследований, посвящённых утилизации и рециклингу полимерных материалов. Использование отходов термопластичных полимеров и их смесей позволяет решить несколько важных вопросов: во-первых, получить новые материалы с ценными эксплуатационными свойствами, во-вторых, экономить ресурсы первичного сырья, в-третьих, путём использования в производстве полимерных отходов, понизить загрязнение окружающей среды.

Одним из перспективных направлений использования вторичных термопластичных полимеров это их модификация. Известно, что в процессе переработки и эксплуатации под действием внешних факторов материал поддается механическому воздействию, термодеструкции, что приводит к появлению активных функциональных групп, которые способны инициировать реакции окисления и структурные изменения.

Целью этой работы было исследование влияния модифицирующего действия гексаметилентетрамина (ГМТА) на вторичный полиэтилен (ВПЭ) и его свойства. Исследование теплофизических характеристик образцов ВПЭ и композиций на его основе с разным содержанием ГМТА проводили методом сканирующей калориметрии. Вязко-упругие свойства исследовали с помощью динамического механического термического анализа. Структурно-химические изменения оценивали методом ИК-спектроскопии. Также оценивали влияние ГМТА на ВПЭ по определению относительного изменения показателя текучести расплава (ПТР), разрушающего напряжения при растяжении ( $\sigma_r$ ), относительного удлинения ( $\Delta\epsilon$ ), адгезии к стальным и алюминиевым поверхностям.

Полученные результаты свидетельствуют об активном влиянии добавок ГМТА на процессы структурообразования, свойства ВПЭ и они могут быть использованы при создании новых технологий по утилизации и рециклингу вторичного полиэтилена.

Работа выполнена под руководством к.х.н. В.Д. Мышака

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЧНОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭТИЛЕНА И НАНОНАПОЛНИТЕЛЯ

*Сивакова Е.А., Черкашина А.Н.*

Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт»  
[vladimirlebedev@bk.ru](mailto:vladimirlebedev@bk.ru)

В настоящее время в качестве нанонаполнителей большой интерес, как с промышленной, так и научной точки зрения представляют цеолиты. Будучи открытыми сравнительно недавно в качестве именно наноматериалов, они быстро привлекли внимание благодаря комплексу своих уникальных свойств. Материалы на основе полимеров и нанонаполнителей обладают высокой прочностью, упругостью и другими полезными эксплуатационными характеристиками. При сочетании полимеров и цеолитов возможно получение уникальных конструкционных композиционных наноматериалов, которые при высокой прочности обладали бы малым весом.

Цеолит используемый в данной работе – природный минерал, основным компонентом которого является клиноптилолит (содержание 80 %), общая кристаллохимическая формула которого  $(\text{Na,K}) \cdot (\text{Al}_6\text{Si}_{30}\text{O}_{72}) \cdot 20\text{H}_2\text{O}$ . Хонгурин благодаря каркасной алюмосиликатной структуре проявляет высокие адсорбционные свойства. Частицы цеолита аморфны и изотропны, их форма приближается к сферической, диаметр частиц составляет 1,6...4 мкм. В порошке отдельные частицы образуют ассоциаты от 10 до 100 мкм. Цеолиты относятся к классу нанодисперсных наполнителей за счет наличия нанопор (3,5 - 4,1 нм), являющихся функциональными структурными элементами данного модификатора.

Целью данной работы является исследование прочностных свойств полимерных композиционных материалов на основе полиэтилена марки ПЭ80Б, содержащего природные и искусственные нанодисперсные наполнители.

Композиты получали путем смешения в расплаве полиолефина и нанонаполнителя в одношнековом лабораторном экструдере при температуре 170 °С и скорости вращения валков 30 об/мин. Полученные образцы анализировались на предмет величины ударной вязкости и прочности на изгиб - таблица.

Таблица – Прочностные характеристики полимерных материалов на полиэтилена и нанонаполнителя

Показатель	Содержание нанонаполнителя, % мас.		
	0,5	1	1,5
Ударная вязкость, кДж/м <sup>2</sup>	23,803	22,992	21,404
Прочность на изгиб, МПа	106,482	80,792	99,867

## ПОЛІМЕРНІ КОМПОЗИЦІЇ НА ОСНОВІ ВТОРИННОГО ПОЛІПРОПИЛЕНУ

*Сівакова К.О., Зотова Т.Г., Черкашина А.Н.*

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»

annikcherkashina@rambler.ru

Використання вторинної сировини в якості нової ресурсної бази - одне з найбільш динамічно розвиваються напрямків переробки полімерних матеріалів у світі. Сьогодні на порядок денний стає не тільки завдання утилізації відходів полімерних матеріалів, але й відновлення ресурсної бази. Однак можливість використання полімерних відходів для повторного виробництва обмежується їх нестабільними і гіршими у порівнянні з вихідними полімерами механічними властивостями. Для використання вторинних полімерів необхідно досягнення балансу між заданими властивостями кінцевого продукту і середніми характеристиками вторинного матеріалу.

Проведено аналіз розроблених і тих, що використовуються полімерних композицій на основі вторинного модифікованого ПП для виготовлення грануляту й подальшому виготовленню з нього офісних меблів, розробка нових рецептур полімерних композицій на основі вторинного ПП, вивчення впливу модифікуючих добавок на процес переробки грануляту з вторинного модифікованого ПП та оцінка властивостей готових виробів. Досліджені були такі грануляти з вторинного ПП на основі яких розроблялися нові полімерні композиції :1) поліпропілен (ВАТ Донецький машинобудівний завод „Айстра”; 2) поліпропілен гранульований (ТОВ Харківський завод „Полімер-Контейнер”; 3) поліпропілен (ТОВ Укржилсоюз, Польща). У основну рецептуру вводилися такі добавки, як полібутадієновий каучук, антиокислювальний тепловий стабілізатор-стабітокс, а також для фарбування вводили чорний фарбник.

Модифікація вторинного ПП значно покращує основні показники полімерних композицій, які постачаються усіма підприємствами, однак найкращі у композиції на регрануляті, який виготовляє Донецький машинобудівний завод „Астра”. Наприклад, ударна в'язкість зростає з 67,37 кДж/м<sup>2</sup> у немодифікованій композиції до 69,98 кДж/м<sup>2</sup> у модифікованій полібутадієновим каучуком та антиокислювальним і тепловим стабілізатором – стабітоксом, а міцність при розриві більша у композиції на основі РГПП, який постачає підприємство Харківський завод «Полімер-контей-нер» і складає 28,89 МПа. Текучість краще у модифікованій композиції на основі РГПП і складає 10,95 г/ 10 хв. Проводились дослідження композицій, які створювались як суміші з регрануляту ПП и ПЕВТ в різних співвідношеннях. До 100 % регрануляту ПП додавалось 5 %, 20 % і 40 % ПЕВТ. Результати досліджень показують, що вищі показники  $a$  та  $\sigma$  у композиції до складу якої додали 5 % ПЕВТ. Найкращі показники у композиції до складу якої додавали РГПП, вміст РГПЕ 5 % – 57,95 кДж/м<sup>2</sup>, а  $\sigma$  у цієї ж композиції складає 26,34 МПа. Показник  $\sigma$  у композиції на основі РГПП складає 25,16 МПа, текучість краща у попередньої композиції і складає 10,68 г/10 хв.

Досліджені композиції до складу яких входили регранулят ПП з різних підприємств і регранулят ПЕВТ, який виробляється підприємством „Новый стиль” у різному співвідношенні. Додається до композиції 5 %, 20 % і 40 % регрануляту ПЕ. Кращі показники ударної в'язкості у композиції до складу якої входять РГПП вміст РГПЕ 5 %- 64,53 кДж/ м<sup>2</sup>,  $\sigma$ - тій же композиції складає 27,34 МПа. Текучість краща у тій же композиції і складає 10,68 г/ 10 хв.

**ПРИЩЕПЛЕНИЙ БЛОККОПОЛІМЕР НА ОСНОВІ  
ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНОГО КОПОЛІМЕРУ ЕТИЛЕНУ  
З ВІНІЛАЦЕТАТОМ І РІДКОГО КАУЧУКУ**

*Сірик О.М.*, Мишак В.Д., Грищенко В.К., Лебедев Є.В.  
Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України  
[elena\\_siryk@ukr.net](mailto:elena_siryk@ukr.net)

Виробництво та споживання синтетичних полімерних матеріалів зростає з кожним роком. На відміну від природних, синтетичні полімери не є біодеградабельними, а стійкі до дії природних факторів. Накопичення полімерних відходів перетворилося на нагальну екологічну проблему, яка зумовлює забруднення навколишнього середовища. Одним із методів вирішення цієї проблеми є створення композиційних матеріалів, в тому числі гумопластів. Однак в своїй більшості композиційні матеріали на основі термопласту та гумової крихти характеризуються низькими фізико-механічними показниками. Відомо, що у якості ефективних модифікуючих добавок широко використовують компатибілізатори - статистичні, блок-, привиті кополімери або полімери, які містять функціональні групи, близькі за хімічною природою одному або обом полімерним компонентам суміші і є можливість впливати на властивості таких полімерних систем за рахунок спорідненості компонентів, покращення адгезії у міжфазній області, зниженню поверхневого натягу.

Мета роботи - синтез прищепленого блоккополімеру (ПБК) на основі функціоналізованого кополімеру етилену з вінілацетатом (КЕВА) і макродіізоціанату (МДІ) на основі рідкого каучуку Krasol 3000 LBH, дослідження структури, властивостей.

У роботі був використаний КЕВА марки „Еватан” 4055, вміст вінілацетатних груп в якому 40%. Функціоналізацію термопласту проводили реакцією амінолізу. Як функціоналізуючий агент використовували моноетаноламін. Вміст гідроксильних груп в функціоналізованому КЕВА складає 1,48 мас. %.

МДІ одержували шляхом взаємодії олігодієнового каучуку з кінцевими гідроксильними групами "KRASOL LBH-3000" та 2,4-толуїлендіізоціанату (ТДІ). Кінетику синтезу МДІ вивчали методом ІЧ-спектроскопії. Кількість NCO-груп за результатами титрування складає 2 мас. %.

Синтез ПБК проводили за реакцією уретаноутворення між OH-групами функціоналізованого Еватану 4055 та NCO-групами МДІ на рідкому каучуку, при мольному співвідношенні OH:NCO=1:1. Проходження реакції контролювали методом ІЧ-спектроскопії по зникненню інтенсивного максимуму  $2270\text{ см}^{-1}$ , характерного для NCO-групи, та появі максимумів, що підтверджують утворення уретанових груп.

Методом гелпроникної хроматографії встановлено підвищення середньочислової, середньомасової молекулярної маси та полідисперсності отриманого ПБК у порівнянні з вихідним компонентом – функціоналізованим КЕВА. Методами ТГА і ДСК вивчені фізико-хімічні характеристики ПБК. Встановлено, що отриманий ПБК характеризується підвищеною термостійкістю, у в порівнянні з вихідними компонентами, а температура склування має тенденцію до зсування в бік нижчих температур.

У подальшому отриманий ПБК буде використаний як компатибілізатор композиційних полімерних матеріалів.

**АНАЛІЗ МЕХАНІЗМІВ СТРУКТУРОУТВОРЕННЯ ТА ТЕПЛОФІЗИЧНИХ  
ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛІМЕРНИХ НАНОКОМПОЗИТІВ НА ОСНОВІ  
ПОЛІМЕТИЛМЕТАКРИЛАТУ**Дінжос Р.В., *Степанова А.О.*Миколаївський національний університет ім. В.О. Сухомлинського  
[dinzhos@mail.ru](mailto:dinzhos@mail.ru)

Представлені результати експериментальних та розрахункових досліджень релаксації склування поліметилметакрилату (ПММА) и наноккомпозитів, які містять 0,5 (ПММА-0,5); 1 (ПММА-1); 2 (ПММА-2); 5 (ПММА-5); 10 (ПММА-10) мас.% вуглецевих нанотрубок. Виконаний аналіз параметрів структуроутворення в залежності від процентного вмісту вуглецевих нанотрубок. Вивчені особливості впливу структури полімерних наноккомпозитів на їх теплофізичні властивості.

При проведенні досліджень використовувався атактичний поліметилметакрилат та наноккомпозит, який містить 0,5; 1; 2; 5; 10 мас. % вуглецевих нанотрубок (виробник ВАТ «Спецмаш» (Україна)). Виготовлені методом CVD з етилену [1] (англ. Chemical vapor deposition – хімічне парофазове осадження). Вміст мінеральних домішок складає ~ 0,1%. Питома площа поверхні  $S$  УНТ, визначена адсорбцією  $N_2$  складає  $190 \text{ м}^2/\text{г}$ . Зовнішній діаметр УНТ, який визначався за допомогою метода малокутового розсіювання рентгенівських промінів, складає 20 нм, довжина ( $1 \div 5$ ) мкм, завтовшки ~ 5 нм [2]. Питома провідність  $\sigma$  УНТ в порошкоподібному стані, стиснутих при 15 ТПа, складає 10 См/см вздовж вісі стиснення. Вказані вищі наноккомпозити були отриманні методом ультразвукового змішування в розчині та отримані п'ять наноккомпозитів с 0,5; 1; 2; 5; 10 масовим відсотковим вмістом вуглецевих нанотрубок.

1. Малежик А.В. Синтез углеродных нанотрубок методом каталитического разложения / А.В. Малежик, Ю.И. Семенов, В.В. Янченко // Журнал прикладной химии. – 2005. – 78. – С. 938-943.
2. Структура многослойных углеродных нанотрубок, полученных каталитическим разложением этилена на наночастицах никеля / Н.В. Лемеш, Э.А. Лысенков, Ю.П. Гомза [и др.] // Украинский химический журнал. – 2010. – Т. 76, №5. – С. 29-36.

## ПІДВИЩЕННЯ ГЕРМЕТИЧНОСТІ СКЛОПЛАСТИКОВИХ ЕПОКСИДНИХ ТРУБ

Карандашов О.Г., Сулейманова К.В., Підгорна Л.П., Авраменко В.Л.

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»  
[lebedev@kpi.kharkov.ua](mailto:lebedev@kpi.kharkov.ua)

Склопластикові труби, що отримують методом намотки, мають високу міцність, надійність при експлуатації в широкому температурному інтервалі, високу хімічну та атмосферостійкість, тому вони використовуються для транспортування холодної та гарячої води, рідин технічного призначення. Особливо велике значення склопластикові труби мають при транспортуванні рідин під підвищеним тиском, де труби з поліолефінів та полівінілхлориду майже не використовуються. Однак при цьому виникає ряд проблем. По-перше, не зважаючи на високі міцносні властивості склопластикових виробів, головною проблемою є герметичність виробів. Так, якщо орієнтуватися за «тиском першого тріску», стандартні склопластикові вироби можливо використовувати лише для транспортування середовищ тиском до 2,5 МПа, що дуже звужує ринок їх використання. Другою проблемою є певна крихкість склопластикових виробів. Тому для вирішення цих проблем було прийняте рішення використовувати в складі епоксидного зв'язного пластифікатори на основі поліуретанів типу Пластур та «УРЕП».

Щоб дослідити вплив кількості пластифікатору в складі зв'язного на властивості отриманих виробів, були виготовлені вироби на основі зв'язного з вмістом 2, 5, 10 та 20 мас.ч. пластифікатору на 100 мас.ч. епоксидного олігомеру. Незважаючи на додавання пластифікатору, технологічний процес виготовлення виробів не зазнав змін, основні технологічні характеристики, такі як швидкість намотування та температура тверднення, не змінилися. Також не зазнали змін і основні показники якості виробів. Вміст зв'язного дорівнює 25-30 % мас., а ступінь тверднення зв'язного перевищує необхідні 96 %. Отримані вироби були перевірені на дотримання санітарно-гігієнічних норм, міграції шкідливих речовин вище норм виявлено не було. Значні зміни відбулись у показниках герметичності. Так, у виробих при додаванні пластифікатору УРЕП показник герметичності підвищувався тільки при додаванні до 10 мас.ч. пластифікатору, а потім ріст показника зупинився, і склопластикові вироби на основі таких зв'язних можливо використовувати при транспортуванні середовищ під тиском до 2,4 МПа. Пластифікатор ПЛАСТУР збільшував показник герметичності виробів пропорційно до кількості доданого пластифікатору, і максимальне значення «першого тріску» було досягнуто у виробі із вмістом 20 мас.ч. пластифікатору на 100 мас.ч. епоксидного олігомеру, і вироби на основі зв'язного з цією рецептурою можливо використовувати при транспортуванні різноманітних середовищ під тиском до 6,7 МПа. Щоб дослідити вплив пластифікаторів на крихкість склопластикових виробів, проведено визначення ударної в'язкості затвердненого зв'язного. Для зв'язного з пластифікатором УРЕП максимальне значення було отримане при додаванні 15 мас.ч. пластифікатору, і його значення підвищилось у два рази. Для зв'язного з використанням пластифікатору ПЛАСТУР максимальне значення ударної в'язкості було отримане у зразках з 20 мас.ч. пластифікатору, і його значення підвищилось на 80 % порівняно зі зв'язним без пластифікатору. Таким чином, розроблені склади епоксидних зв'язних для отримання склопластикових труб з підвищеною герметичністю та зниженою крихкістю, які проходять випробування при транспортуванні середовищ з підвищеним тиском.

## ИЗУЧЕНИЕ ДЛИНЫ И СТРУКТУРЫ ЦЕПИ СОПОЛИМЕРОВ N-ВИНИЛПИРРОЛИДОНА, МАЛЕИНОВОГО АНГИДРИДА И / ИЛИ МЕТИЛМЕТАКРИЛАТА

*Трохимчук Д.А.\**, *Тюрина Т.Г.\*\**, *Михальчук В.М.\*\**

\* Донецкий национальный университет

\*\* Институт физико-органической химии и углехимии им. Л. М. Литвиненко НАНУ  
[overdasha@rambler.ru](mailto:overdasha@rambler.ru)

С привлечением методов УФ-, ИК-,  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  ЯМР спектроскопии проведено изучение состава и структуры цепи двух- и трехкомпонентных сополимеров N-винилпирролидона (ВП), малеинового ангидрида (МА) и метилметакрилата (ММА), материалы на основе которых перспективны для применения в медицине и мембранной технологии.

В УФ спектрах поли-ВП и его сополимеров ВП с МА или ММА обнаружен максимум поглощения при 208 нм (рис. 1), который при увеличении содержания полимера в растворе несколько сдвигается в сторону больших длин волн до 213 нм. Подобие спектров гомополимера ВП и его сополимеров позволяет предположить, что поглощение в них обусловлено наличием звеньев этого мономера. Межцепные взаимодействия с участием находящихся в боковой цепи лактамных циклов ВП и эфирных или ангидридных групп звеньев ММА или МА, по-видимому, снижают коэффициент поглощения, однако этот фактор трудно учесть количественно. Данные УФ спектров изучаемых сополимеров наиболее полезны для обнаружения в них примесей мономеров.

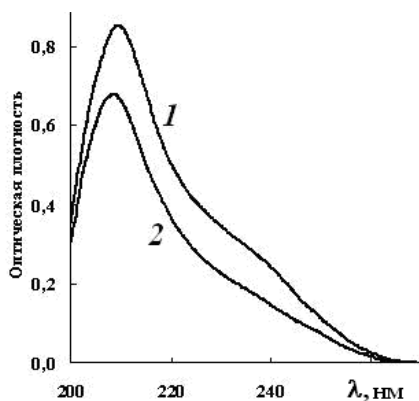


Рис.1. УФ-спектры растворов поли-N-винилпирролидона (1) и его сополимера с метилметакрилатом (2) в ацетонитриле с концентрацией 0.100 (1) и 0.103 г/л (2); толщина слоя 10 мм.

Для определения состава исследуемых сополимеров и изучения последовательностей звеньев в их цепях использовали методы  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  ЯМР спектроскопии. Наиболее полную информацию о структуре макромолекулярной цепи дают сигналы в области 45-35 и 22-16 м. д., которые относятся к атомам лактамного цикла ВП и метильной группы ММА. Найдено, что для изучаемых двухкомпонентных сополимеров не характерно наличие диад звеньев ВП (ВВ), в них преобладают гетеро-последовательности типа ВМВМ или МВММ.

Длина цепи сополимеров охарактеризована методом вискозиметрии с использованием водных и органических растворителей. Найдено, что наибольшее количество звеньев в цепи ( $n$ ) имеют сополимеры ВП с ММА ( $n = 2500 \div 10000$ ) и наименьшее - ВП с МА ( $n = 200 \div 2000$ ).

## ВПЛИВ ЕМУЛЬГУВАННЯ НА ПЕРЕБІГ ЕМУЛЬСІЙНОЇ КООЛІГОМЕРИЗАЦІЇ СУМІШІ НЕНАСИЧЕНИХ ВУГЛЕВОДНІВ

*Фуч У.В., Субтельний Р.О.*

Національний університет "Львівська політехніка"

[subtelnyy@gmail.com](mailto:subtelnyy@gmail.com)

Метод коолігомеризації в емульсії, у порівнянні із промисловими методами синтезу коолігомерів на основі фракцій побічних продуктів піролізу (РПП) нафтової сировини, дозволяє суттєво знизити температуру та тривалість реакції, а отже і витрати енергоресурсів. Так, коолігомеризація фракцій РПП за радикальним механізмом, реалізована у промисловості, передбачає високу температуру процесу (453...473 К) та тривалість реакції (6...8 год.). Тоді як, емульсійна коолігомеризація при температурі 353 К за 3 год синтезу дозволяє отримати коолігомер із схожим виходом та фізико-хімічними характеристиками.

Коолігомеризацію в емульсії проводили за наступною рецептурою:

- дисперсійне середовище – вода;
- дисперсійна фаза - фракція С<sub>9</sub> РПП (вміст ненасичених сполук до 45 % у т.ч.: стиролу 17,8 %, вінілтолуолів 6,9 %, дициклопентадієну 18,0 %).
- ініціатор - водорозчинний персульфат калію (K<sub>2</sub>S<sub>2</sub>O<sub>8</sub>) (1,0...2,0 %мас.)
- емульгатор Е-30 - суміш лінійних алкансульфонатів з довжиною вуглецевого ланцюга - С<sub>15</sub>.

Встановлено, що основні чинники (температура, концентрація ініціатора, співвідношення води та фракції С<sub>9</sub>) незначно впливають на перебіг коолігомеризації. Так, зміна співвідношення (об'ємне) дисперсійних фаз і середовища у межах 1:2...1:4 незначно впливає на вихід коолігомеру. При температурі 353 К за 3 год вихід продукту є найвищим при співвідношенні 1:2 і становить 16,8 %мас. (при використанні 1,0 % персульфату калію). На усьому досліджуваному інтервалі температур 323...353 К не спостерігається зміни виходу коолігомеру. Підвищення концентрації ініціатора з 1,0 до 2,0 %мас. (у перерахунку на сировину) спричиняє підвищення виходу коолігомеру з 16,7 до 18,4%мас.

Враховуючи специфічний механізм емульсійної полімеризації ми припустили, що основний вплив на процес має саме емульгування, яке на нашу думку, залежить у першу чергу від концентрації емульгатора та інтенсивності перемішування.

Вихід коолігомеру підвищується при збільшенні інтенсивності перемішування реакційної суміші (800 об/хв – 11,8 %мас...1800 об/хв – 15,5 %мас.). Це підтверджує теоретичні відомості про необхідність механічного перемішування ефективного емульгуванню і ймовірно пояснюється створенням більш однорідної дисперсійної системи та забезпеченням рівномірної концентрації компонентів емульсійної коолігомеризації.

На усьому досліджуваному інтервалі концентрацій емульгатора (0,7...1,3 %мас.) закономірно зменшується вихід коолігомеру (з 15,5 до 11,3 %мас.), що, на нашу думку, пояснюється піноутворенням. Встановлено критичну концентрацію міцелоутворення даного емульгатора яка становить 0,2 %, вихід коолігомеру при цьому – 15, 7 %мас. коолігомеризація без емульгатора є малоефективною, про що свідчить невисокий вихід продукту – 6,2 %.

Проведені дослідження дозволяють стверджувати, що на коолігомеризацію в емульсії у першу чергу впливають чинники емульгування – концентрація ініціатора та інтенсивність перемішування.

**СОРБЦІЙНІ ВЛАСТИВОСТІ ПРИЩЕПЛЕНИХ КОПОЛІМЕРІВ  
ПОЛІВІНІЛПІРОЛІДОНУ***Хром'як У.В.*Львівський державний університет безпеки життєдіяльності  
[ulanajukovska@gmail.com](mailto:ulanajukovska@gmail.com)

Матеріали на основі полівінілпіролідону (ПВП) відзначаються високими сорбційними характеристиками, вони здатні зв'язувати різні за природою та структурою органічні та неорганічні речовини. У зв'язку з цим, вони знайшли широке використання в різноманітних галузях, а саме в фармацевтичній та харчовій промисловості що, пов'язано з комплексом цінних специфічних властивостей, які притаманні цим кополімерам, зокрема, підвищена біосумісність з клітинами живого організму, селективно – сорбційна здатність, нетоксичність, тромборезистентність, а також підвищені адгезійні властивості та здатність до забарвлення.

Кополімери ПВП синтезували емульсійною полімеризацією метилметакрилату і стиролу в присутності ПВП і водорозчинних ініціаторів при 343 К. Для встановлення сорбційних властивостей даних кополімерів, а саме кількості активних центрів сорбції і величини сорбції, був вибраний ряд індикаторів, які відрізняються природою функціональних груп, а також величиною  $pK_a$ . Встановлено, що кількість активних центрів сорбції досліджуваних полімерів суттєво залежить від природи індикатора. При цьому, як у випадку прищепленого кополімеру ПВП і полістиролу (ПВП-пр-ПС) так і поліметилметакрилату (ПВП-пр-ПММА) найбільша активність проявляється відносно метиленового червоного та діамантового зеленого, а найнижча – метилового оранжевого. На основі проведених досліджень можна стверджувати, що здатність до сорбції в досліджуваних кополімерах має специфічний селективний характер і, швидше всього, визначається наявністю в кополімерах карбаматних груп.

Обґрунтована можливість регулювання сорбційних властивостей модифікованих полівінілпіролідонем ПММА і ПС направленою зміною компонентних складів та технологічних параметрів їх одержання в полімеризаційних процесах залежно від функціональності та  $pK_a$  сорбованих речовин та встановлено, що залежність сорбції від  $pK_a$  носить бімодальний характер із максимумами при значенні  $pK_a$  1,3 та 5, що корелює зі структурними параметрами макромолекул ПВП у водних розчинах; причому сумарна сорбційна здатність вища для кополімеру ПВП-пр-ПС, порівняно з ПВП-пр-ПММА. Умови синтезу кополімерів (температура, концентрація ПВП та ініціатора) впливають на їх сорбційну здатність. Із зростанням температури полімеризації сорбційна здатність кополімеру зменшується. Це, очевидно, обумовлене тим, що синтезований при вищих температурах кополімер має порівняно меншу кількість вільних фрагментів ПВП та характеризується значно більшими розмірами частинок у синтезованому латексі. Збільшення концентрації ініціатора призводить до збільшення сорбційних властивостей кополімерів.

Також було досліджено сорбційні характеристики прищеплених кополімерів ПВП-пр-ПММА і ПВП-пр-ПС, одержаних в гетерофазних умовах, відносно біологічно активних сполук, таких як гепарин, йод і встановлено, що сорбційна здатність кополімерів ПВП-пр-ПС є більшою, порівняно з ПВП-пр-ПММА, так відносно гепарину вона становить відповідно  $3 \cdot 10^5$  і  $3,1 \cdot 10^4$  од/м<sup>2</sup>, відносно йоду – 36 і 32 моль/г, що може бути використано при одержанні сорбційних матеріалів для антисептиків, лікувальних ізолюючих плівок та тромборезистентних виробів.

## АНТИРАДИКАЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ ВОДНЫХ ЭКСТРАКТОВ ЧАЯ В РЕАКЦИИ С КАТИОН-РАДИКАЛОМ 2,2' – АЗИНОБИС(3-ЭТИЛБЕНЗОТИАЗОЛИН-6-СУЛЬФОНОВОЙ КИСЛОТЫ)

*Беличь А.С., Лебедкова О.С., Каниболоцкая Л.В., Шендрик А.Н.*

Донецкий национальный университет

[ann.squirrel.biochem@mail.ru](mailto:ann.squirrel.biochem@mail.ru)

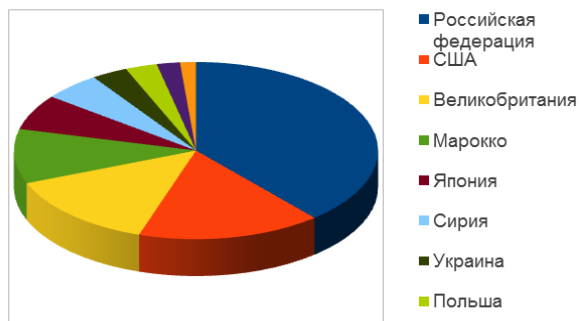


Рис 1. Основные импортеры чайного сырья (данные 2011 г.)

которые придают напитку жаждоутоляющие свойства, терпкий, приятно-вяжущий вкус и разнообразную окраску. Танины, катехины, флавоноиды чая являются ингибиторами процессов свободно-радикального окисления, регулируют различные защитные механизмы и повышают порог устойчивости организма к заболеваниям.

Цель работы - изучение антирадикальной активности водных экстрактов чая в реакции с катион-радикалом 2,2' – азинобис (3-этилбензотиазолин-6-сульфоновой кислоты) (ABTS<sup>•+</sup>).

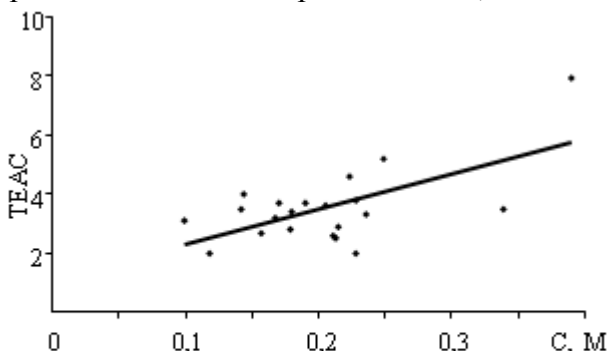


Рис 2. Зависимость антирадикальной емкости от концентрации фенольных соединений экстрактов чая.

красного - Формоза Оолонг (Тайвань), «Nadia tea»; черных: Pu-Erh (Китай), «Экопродукт», Дарджелинг (Индия), «Wittard of Chelsea», Акбар (Цейлон), «Акбар», Солнечная долина (Китай), «Чайна країна», Ахмад (Цейлон), «Ахмад ти», Батик (Цейлон), «СолоМія», Эдвин (Цейлон), «Маброк Ті Лтд.», Greenfield Golden Ceylon (Цейлон), «Орими Трейд», Мономах (Цейлон), «Мономах», Greenfield Kenyan Sunrise (Кения), «Орими Трейд», Брук Бонд (Индия, Кения, Индонезия), «Юнилевер СНГ»

Метод исследования – UV-VIS-спектрофотометрия. Условия эксперимента: фосфатный буферный раствор (pH 7.4). Антирадикальную емкость выражали в TEAC (Trolox equivalent antioxidant capacity). Количество фенольных соединений определяли методом Фолина-Чикольте в эквиваленте галловой кислоты. Установлено, что все водные экстракты чая проявляют антирадикальную активность в реакции с катион-радикалом ABTS<sup>•+</sup>. Зеленые чаи в среднем в 4-7 раз, а черные – в 2-4 раза эффективнее Тролокса. Показано, что имеется положительная корреляционная связь между TEAC и концентрацией фенольных соединений в экстрактах чая (рис. 2).

По данным Food and Agriculture Organisation of the United Nations (<http://faostat3.fao.org>) производство чая составляет 4.09 млн. тонн в год. На долю Российской Федерации и Украины приходится 184877 тонн экспорта в год (рис. 1), то есть чай является одним из самых популярных, любимых и полезных напитков среди населения этих стран. Основными компонентами чая являются фенольные соединения, которые придают напитку жаждоутоляющие свойства, терпкий, приятно-вяжущий вкус и разнообразную окраску. Танины, катехины, флавоноиды чая являются ингибиторами процессов свободно-радикального окисления, регулируют различные защитные механизмы и повышают порог устойчивости организма к заболеваниям.

Объекты исследования – экстракты чая желтого: Туманы Хуанг Шаня (Китай), «Чайна країна»; зеленых: Хэйлис (Цейлон), «Редженси Ти Лтд.», Лазурная россыпь (Китай), «Чайна країна», Эдвин (Цейлон), «Маброк Ті Лтд.», Greenfield Flying Dragon (Цейлон), «Орими Трейд», Принцеса Ява (Китай), «Орими Трейд», Золотой Дракон (Китай), «Мономах»; синих - Те Гуань Инь (Китай), Премиум Женьшень (Китай), Да Хун Пао (Китай); белого - Зеленая обезьяна (Китай);

## ПРИМЕНЕНИЕ РЕОСОРБИЛАКТА ДЛЯ РЕГУЛИРОВАНИЯ АКТИВНОСТИ ИММОБИЛИЗОВАННОЙ ХЭ

<sup>1</sup>Паентко В.В., <sup>2</sup>Матрунчик Ю.В., <sup>3</sup>Богданова Н.А.

<sup>1</sup>Институт химии поверхности им. А.А. Чуйко Национальной академии наук Украины

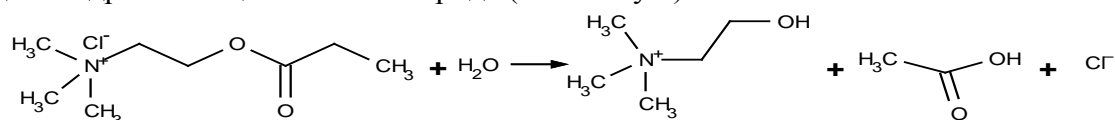
<sup>2</sup>Институт общей и неорганической химии Национальной академии наук Беларуси

<sup>3</sup>Институт физиологии имени А.А. Богомольца Национальной академии наук Украины  
[payentko@mail.ru](mailto:payentko@mail.ru), [yulia.m@tut.by](mailto:yulia.m@tut.by), [bogdanova@mail.ru](mailto:bogdanova@mail.ru)

Одной из функций вводимых в организм плазмозаменителей является активация ферментов, например, холинэстераз(ХЭ). В настоящее время в медицинской практике широко используется препарат Реосорбилакт, представляющий собой инфузионную среду, сбалансированную по составу и содержащую буфер и энергоноситель. В литературе описано достаточное количество иммобилизованных ферментов, имеющих окружение, близкое к *in vivo*, для которых процесс активации биокатализатора может протекать подобным образом, как и при введении инфузий в организм. В связи с этим нами была предпринята попытка активации гетерогенизованных препаратов холинэстераз путем введения плазмозаменителя в систему.

Объектом исследования были выбраны композиционные материалы, представляющие собой ферментативный препарат, заключенный в полимерную оболочку (гироаккумулирующий комплекс состава ПАК:ПВС=10:1, рН=6), и введенный в золь кремниевой кислоты с последующим проведением золь-гель превращений при рН=6, отвечающем проявлению максимальной активности ХЭ. При синтезе образца 1(табл.1) в реакционную смесь вводили фосфатный буфер (рН=6), а в случае синтеза образца 2 буфер готовили на плазмозаменителе Реосорбилакт (1:200). Интерес к этим композитам был вызван тем, что подобный способ иммобилизации обеспечивает защиту фермента от негативного воздействия окружающей среды.

Каталитические свойства полученных композитных материалов изучались в реакции гидролиза ацетилхолинхлорида (см. схему 1).



(схема 1)

За единицу активности принимается количество прогидролизовавшего субстрата в течении 1 мин при рН 8.0 и 37°С. Количество выделившейся уксусной кислоты за соответствующие промежутки времени устанавливали методом потенциометрического титрования 0,02 н раствором NaOH на высокоточном титраторе АТП-02 ("Аквилон", РФ). Полученные результаты представлены в табл. 1.

Таблица 1. Холинэстеразная активность иммобилизованной холинэстеразы\*

Образец	Активность иммобилизованной холинэстеразы (ед\мг)
1	2,15±0,01
2	2,42±0,02

\* активность нативной АХЭ составляла 1,84±0,01 ед/мг

Синтезированные золь-гель методом кремнеземсодержащие композитные материалы, обладающие высокой холинэстеразной активностью. Введение Реосорбилакта позволяет повысить этот показатель и расширить область применения при определении микроколичеств ингибиторов ХЭ.

## БІОТЕСТУВАННЯ ЯК ІНТЕГРАЛЬНИЙ ПОКАЗНИК ТОКСИЧНОГО ЗАБРУДНЕННЯ ВИРОБНИЧИХ СТІЧНИХ ВОД

Дорошенко Т.Ф., *Вишневецька Я.Г.*

Донбаська національна академія будівництва і архітектури

[tatyana-f@ukr.net](mailto:tatyana-f@ukr.net)

Для оцінки ступеня техногенного впливу на водні екосистеми поряд з методами хімічного аналізу використовують метод біоіндикації, який заснований на визначенні змін виживаності та плідності *Daphnia magna* Straus при впливі токсичних речовин, що втримуються в воді, яка тестується, в порівнянні з контролем.

Основні труднощі, що виникають при виконанні біотестування на дафніях, пов'язані з підтримкою необхідних світлових і температурних умов, а також вмісту кисню в середовищі, яке тестується, протягом усього часу експонування.

На прикладі зразку виробничої стічної води було показано, що в умовах "обертання" склянок зі швидкістю 6 - 8 об/хв дафнії не тільки зберігали свою життєздатність протягом 96 годин, але й активно харчувалися, інтенсивно росли та розмножувалися. При цьому вони показували більшу чутливість до токсикантів у порівнянні з рачками, що перебували у нерухомих склянках. Підвищення чутливості рачків відбувалося, імовірно, у результаті збільшення їхньої рухової активності в воді, що перемішували, та інтенсифікації обміну речовин в організмі при більшій кількості доступного кисню. Слід зазначити, що збільшення густини посадки рачків, яке необхідне для підвищення статистичної вірогідності одержуваних результатів, з одного боку, може привести до виникнення стресової ситуації в результаті виникнення дефіциту кисню. Ця обставина, а також підвищена фільтраційна активність рачків у цих умовах може підсилювати токсичний ефект. З іншого боку, при більшій кількості особин у флаконі на кожного рачка доводиться менша кількість токсиканта, що може знижувати чутливість біотесту.

У зв'язку із цим постає інтерес визначити оптимальну щільність посадки дафній при усуненні недоліку кисню в середовищі в умовах обертання.

Результати проведених експериментів з важкими металами (таблиця 1), переконливо свідчать, що при збільшенні числа тест-організмів у тому же обсязі проби виживання рачків у присутності токсикантів зростає, а смертність, як показник токсичності, знижується. При цьому близькі значення виживання рачків спостерігаються у варіантах досвіду, у яких 3-кратному підвищенню концентрації токсиканта відповідає 3-кратне збільшення густини посадки.

Таблиця 1 - Вплив густини посадки на виживаність дафній (в %) у середовищі з різними концентраціями модельних токсикантів  $K_2Cr_2O_7$ , (обсяг середовища - 50 мл, час експонування 48 годин)

Кількість посаджених особин, штук	Концентрація $K_2Cr_2O_7$ , мг/л		
	0,9	0,3	0,1
	Відсоток особин, що вижили		
2	6,2	31,2	75,0
6	25,0	50,0	88,8
18	55,5	72,2	100

Цей факт указує на те, що в певних умовах концентрація токсиканта і густина посадки рачків можуть розглядатися як взаємозамінні фактори при встановленні дози токсичного впливу на дані тест-організми. З урахуванням цих обставин була прийнята як оптимальна густина посадки 10 рачків на 50 мл тестуємої води. Отже, аналіз проведених досліджень дозволив рекомендувати використання *Daphnia magna* Straus як основу при проведенні біоіндикаційних досліджень та оцінки токсичності виробничих стічних вод.

## ОСОБЕННОСТИ АКТИВНОСТИ КСАНТИНОКСИДАЗЫ И ИНТЕНСИВНОСТИ ОКИСЛИТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ В ОПУХОЛЯХ РАЗЛИЧНОЙ ЛОКАЛИЗАЦИИ

*Каплун Д.С., Исмаилова Д.Я, Бакурова Е.М.\*, Баранова О.В.*

Донецкий национальный университет,

\*Донецкий национальный медицинский университет им. М. Горького  
kaplun.dascha@mail.ru

Опухолевые заболевания – вторая по значимости причина смертности после сердечно-сосудистой патологии. С целью поиска онкогенных маркеров исследовали активность фермента ксантиноксидазы (КО), продуцирующего активные формы кислорода. Поскольку усиленное образование свободных радикалов в организме приводит к интенсификации процессов перекисидации липидов, окислительной деструкции ДНК, белков, клеточных мембран, в работе исследовали также содержание конечного продукта ПОЛ малонового диальдегида (МДА).

Активность фермента исследовали в тканях опухоли по сравнению с удаленными от опухоли тканями края резекции у пациентов, имевших Т3-4N1-хM0-х стадии рака в возрасте 45-65 лет. Активность КО и содержание МДА определяли спектрометрическим методом по стандартным методикам.

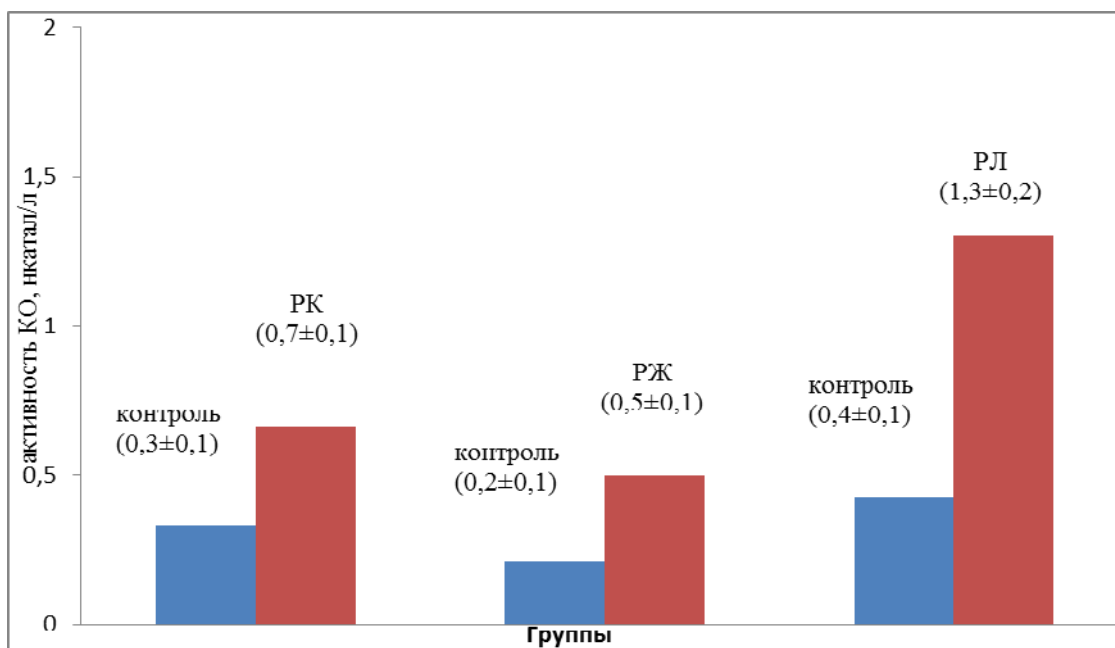


Рис. Активность КО в опухолях различной локализации.

Нами было установлено, что в тканях опухоли больных раком кишечника (РК), раком желудка (РЖ) и раком легкого (РЛ) достоверно повышается активность фермента КО,  $P < 0,05$  (Рис.).

Достоверное снижение МДА в опухолях легких (РЛ  $4,06 \pm 0,03$  мкмоль/л; контроль  $7,2 \pm 0,2$  мкмоль/л;  $P < 0,05$ ), возможно связано с их большей антиоксидантной устойчивостью. По уровню МДА больных РЖ и РК можно разделить на группы, в которых наблюдается как понижение, так и повышение уровня МДА по сравнению с контролем, что очевидно связано как с метаболическими особенностями опухолей, так и со структурными особенностями пораженной ткани.

При проведении исследований метаболизма злокачественных опухолей необходимо учитывать индивидуальные патоморфологические особенности опухолей.

**ФЕНОЛЬНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ СЪЕДОБНЫХ МАКРОМИЦЕТОВ**

Ковалевская А.Л., Ковалева А.В., Луговой К.С., Шендрик А.Н.

Донецкий национальный университет

[alinakova@yandex.ua](mailto:alinakova@yandex.ua)

Химическая переработка растительного сырья является перспективным направлением исследований, направленных на получение новых биологически-активных соединений с малой токсичностью и комплексным воздействием на организм.

Макромицеты продуцируют вещества с антифунгальной, антибактериальной, противовоспалительной, противовирусной, гипотензивной, иммуномодулирующей, гепатопротекторной, противоопухолевой, антиоксидантной активностью. Антиоксидантная активность макромицетов обусловлена, прежде всего, их антирадикальным действием, которое обеспечивается фенольными соединениями плодовых тел, мицелия. Поэтому выяснение состава фенолов макромицетов является важным звеном для выяснения механизма действия фенольных соединений в составе экстрактов грибов.

Целью данной работы было изучение состава фенольных соединений этанольных экстрактов макромицетов методом ВЭЖХ.

Объектами исследования были этанольные экстракты плодовых тел высших базидиальных макромицетов *Armillaria mellea* (Опенок осенний), *Boletus edulis* (Белый гриб б.ф.), *Boletus pinophilus* (Белый гриб сосновый), *Clavariadelphus ligula* (Рогатик язычковый), *Gomphidius glutinosus* (Мокруха клейкая), *Hydnum repandum* (Ежовик выемчатый), *Lactarius pescator* (Груздь черный), *Lecaninum aurantiacum* (Подосиновик красный), *Lecaninum scabrum* (Подберезовик обыкновенный), *Lepista nuda* (Рядовка фиолетовая), *Lycoperdon pyriforme* (Дождевик грушевидный), *Lycoperdon saccatum* (Дождевик настоящий), *Lyophyllum connatum* (Рядовка спрощаяся), *Pleurotus ostreatus* (Вешенка обыкновенная), *Rhizopogon roseolus* (Ризопогон розовеющий), *Russula aurea* (Сыроежка красная), *Suillus bovinus* (Козляк, решетник), *Suillus luteus* (Масленок обыкновенный), *Tricholoma albobrunneum* (Рядовка бело-коричневая), *Tricholoma equestre* (Рядовка зеленая), *Xerocomus badius* (Польский гриб), собранных в НПП «Святые горы» на территории Украины в сентябре-октябре 2010 гг. После сбора грибы сушили при комнатной температуре до постоянной массы и хранили в сухой стерильной емкости для исключения контаминации сырья.

В работе использовали этанольные экстракты перечисленных макромицетов. Экстракцию проводили в этаноле в течении 3 ч при 50°C. Методы исследования: ВЭЖХ (метанол : вода : уксусная кислота) и UV - Vis-спектроскопия.

Определено общее количество фенольных соединений в экстрактах макромицетов методом Фолина-Чикольте. Содержание фенолов в этанольных экстрактах изменяется в пределах  $(0.75 - 10.80) \cdot 10^{-4}$  М. Наибольшее количество фенолов содержится в экстракте *B. edulis f. betulicola*.

Установлено, что экстракты макромицетов содержат галловую, протокатеховую, *n*-гидроксибензойную и 2,3,4-тригидроксибензойную кислоты. Определены концентрации фенолкарбоновых кислот в экстрактах. Галловая кислота является общим для всех исследованных макромицетов вторичным метаболитом, протокатеховая кислота и *n*-гидроксибензойная кислота встречаются в этанольных экстрактах четырех исследованных макромицетов, а 2,3,4-тригидроксибензойная кислота – в экстрактах двух макромицетов.

## К ОЦЕНКЕ АНТИРАДИКАЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ ФЕНОЛОВ В РЕАКЦИИ С ДИФЕНИЛПИКРИЛГИДРАЗИЛОМ

*Лащенко Е.Ю., Ковалева А.В., Панкова А.С., Каниболоцкая Л.В., Шендрик А.Н.*

Донецкий национальный университет

*kovaleva.a@bk.ru*

Фенольные антиоксиданты природного и синтетического происхождения наиболее многочисленная и хорошо изученная группа ингибиторов радикально-цепных процессов окисления. Механизм действия этих веществ связан с обрывом цепей окисления на молекуле антиоксиданта за счет реакции гидроксильной группы фенола с радикалами.

Реакция с дифенилпикрилгидразилом (ДФПГ) используется для определения антирадикальной активности органических соединений, природных композитов, смесей и является одной из самых распространенных систем для изучения механизма переноса атома водорода (НАТ) и последовательного переноса электрона (SPLET) с антиоксиданта на радикал.

Кинетические кривые реакции индивидуальных фенолов и природных композитов с ДФПГ состоят из двух участков – быстрого падения оптической плотности в начале реакции (~20 с) и последующего медленного расходования радикала (см. рис.).

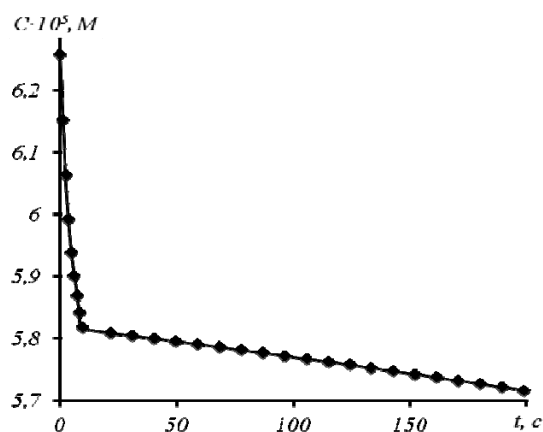


Рис. Зависимость изменения концентрации ДФПГ от времени в реакции взаимодействия с тролоксом.  $C_{\text{Тролокс}} = 2 \cdot 10^{-6} \text{ М}$ .  $T = 293 \text{ К}$

Поэтому АРА фенолов и растительных смесей характеризуют величиной  $\text{ТАЕС}_{\text{ДФПГ}}$  (Trolox equivalent antioxidant capacity), численно равной общему числу радикалов, которые погибают на одной молекуле антиоксиданта. Данная величина является суммарной характеристикой и не может быть отнесена к кинетическим параметрам реакции.

Целью работы является определение антирадикальной активности тролокса и этанольных экстрактов макромицетов, используя данные по стехиометрии реакции.

Объекты исследования: тролокс (6-гидрокси-2,5,7,8-тетраметилхроман-2-карбоновая кислота), этанольный экстракт плодовых тел высшего базидиального макромицета *Lactarius necator* (*Груздь черный*). Метод исследования – *UV-Vis*-спектрофотометрия.

Установлены значения констант скорости реакции взаимодействия ДФПГ с тролоксом, а также с этанольным экстрактом базидиального макромицета *Lactarius necator* (*Груздь черный*).

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОСТРОЙ ТОКСИЧНОСТИ ГАЛОГЕНЗАМЕЩЕННЫХ ГИДРОХИНОНОВ

*Нагибина К.О.*, Калиниченко Е.А., Каниболоцкая Л.В., Шендрик А.Н.

Донецкий национальный университет

MrKEA@rambler.ru

Фенольные соединения, несмотря на свою распространенность в природе и широкое применение в промышленности, являются известными экотоксикантами. В водно-щелочной среде полифенолы могут окисляться молекулярным кислородом и принимать участие в процессах зарождения радикалов, вызывая необратимое повреждение биомолекул. Обладая даже высокими вычислительными возможностями, невозможно предсказать и смоделировать влияние ксенобиотика на все жизненные функции любого организма, что приводит к необходимости использования животных для оценки токсичности.

Использование классического теста определения острой токсичности требует большого количества подопытных животных: только в лабораториях Евросоюза используются около 1 миллиона позвоночных лабораторных животных в год. В соответствии с новыми нормативными документами ЕС, устанавливающими правила проведения научных экспериментов на животных, количество животных должно быть сокращено до минимума или вообще исключено из исследований. Исходя из вышесказанного, поиск новых подходов по уменьшению количества необходимых лабораторных животных для определения токсикологических показателей является актуальной задачей.

Целью данной работы является оптимизация тестов острой токсичности и определение полуметалетальной дозы ( $LD_{50}$ ) метилгидрохинона ( $Me-QH_2$ ) и 2,5-дибромгидрохинона ( $2,5-Br_2-QH_2$ ).

Исследования выполнили на половозрелых самках лабораторных мышей линии Balb/C. Определение показателей острой токсичности гидрохинонов проводили на мышах с исходной массой  $20 \pm 4$  г. После введения 0.5 мл водного раствора замещенного гидрохинона через зонд в желудок наблюдение проводили в течение 14 дней.

В качестве основной методики определения острой токсичности выбрали процедура «вверх-и-вниз» (Up-and-Down Procedure – руководство Организации по экономическому сотрудничеству и развитию № 425). Для оценки значения  $LD_{50}$  необходимо от 6 до 15 грызунов по сравнению с 30 – 40 в классической методике, такое малое количество подопытных животных достигается четким алгоритмом тестирования и наличием трех стоп-критериев.

Для остановки тестирования  $Me-QH_2$  служил критерий *c* (отношение вероятностей, которые представляют собой статистический показатель того, насколько сильно данные подтверждают оценку  $LD_{50}$ , превышает критическое значение равно 2.5), а для  $2,5-Br_2-QH_2$  – критерий *b* (наличие 5 реверсов в последовательности из 6 дозирования).

В результате тестирования метил- и 2,5-дибромпроизводных гидрохинона согласно OECD TG 425 оценили значения  $LD_{50}$ , величины которой составляют 773 и 310 мг/кг для мышей линии Balb/C. Однако, для осуществления расчетов по данной методике для  $2,5-Br_2-QH_2$  необходимо принять наклон доза - реакция равный 2.

Для нахождения более точного значения  $LD_{50}$  и уменьшения количества необходимых подопытных животных предложили оптимизацию данной методики модификацией пробит-анализа.

**ХАРАКТЕРИСТИКА СПОЛУК РЕНІЮ ЯК ПЕРСПЕКТИВНИХ  
АНТИОКСИДАНТНИХ ТА ПРОТИПУХЛИННИХ АГЕНТІВ**

*Ніколенко О.І., Большакова А.С., Горяева Я.І., Кириченко С.В.*

Дніпропетровський національний університет імені О. Гончара

[elnikolenko@gmail.com](mailto:elnikolenko@gmail.com)

Механізми окисного стресу інтенсивно вивчаються із середини 60-х років і в наш час, актуальність і гострота цієї проблеми не тільки не знизилася, але й багаторазово зросла. При виснаженні антиоксидантного потенціалу організму каскадне збільшення продукції вільних радикалів обумовлює порушення функцій та гибель клітин, що чревате необоротними змінами у нервовій системі.

Отже, метою даної роботи було виявлення зв'язку між розвитком пухлини карциноми Герена та концентрацією ТБК - активних продуктів, активністю СОД та каталази в гомогенаті мозку щурів. Експеримент проводили на моделі пухлинного росту – карциномі Герена (Т8), при застосовуванні сполук Ренію з адамантанкарбоним лігандом у цис- та транс-конформації у наноліпосомах разом з цис-платином в якості антиканцерогенних та антиоксидантних агентів.

При розвитку карциногенезу розвивається окисний стрес у нервовій тканині, що підтверджується змінами активності ферментів антиоксидантного захисту. Розвиток пухлини призводить до збільшення рівня ТБК - активних продуктів у 6,2 рази порівняно з контрольною групою тварин, що свідчить про інтенсифікацію процесу перекісного окиснення ліпідів та виснаження системи антиоксидантного захисту (АОЗ). При введенні сполук ренію з цис- та транс- адамантановими лігандами у наноліпосомній формі за схемою антиоксидантної терапії у моделі пухлинного росту спостерігалася зниження рівня ТБК – активних сполук: Т8+[Re-transAd]nl+cPt у 8,5 разів, Т8+[Re-transAd]nl 11,7 та Т8+[Re-transAd+cPt(4:1)]nl у 9 раз, Т8+[Re-cisAd]nl+cPt у 4,4 рази, Т8+[Re-cisAd]nl у 3,9, Т8+[Re-cisAd+cPt1:4]nl у 4,7 разів порівняно з групою пухлино носіїв, що свідчить про антиоксидантні властивості сполук ренію. Фермент СОД контролює захист організму від активних форм кисню. При розвитку карциноми Герена даний показник зменшувався у 30,3 порівняно з контрольною групою. Введення сполук ренію з цис- та транс- адамантановими лігандами разом з цис-платином в наноліпосомній формі внутрішньочеревно викликає зростання активності ферменту, яка була пригнічена внаслідок канцерогенезу. А саме в групах Т8+[Re-transAd]nl+cPt у 3,6 разів, Т8+[Re-transAd]nl 1,86 Т8+[Re-transAd+cPt(4:1)]nl у 18,6 разів, Т8+[Re-cisAd]nl+cPt у 2,2 рази, Т8+[Re-cisAd]nl у 2 рази, Т8+[Re-cisAd+cPt1:4]nl у 3,7 разів порівняно з групою пухлиноносіїв. Що свідчить про ефективність даних сполук. Дослідження активності каталази в гомогенаті мозку щурів з карциномою Герена показало, що у щурів - пухлиноносіїв активність ферменту знижується у 8 разів ( $1,11 \pm 0,05$  кат/л) порівняно з контрольною групою. Введення сполук ренію призвело до збільшення активності каталази Т8+[Re-transAd]nl+cPt у 2,1 рази, Т8+[Re-transAd]nl 2,2 рази, Т8+[Re-transAd+cPt(4:1)]nl у 1,2 рази, Т8+[Re-cisAd]nl+cPt у 4,4 рази, Т8+[Re-cisAd]nl у 2, Т8+[Re-cisAd+cPt1:4]nl у 1,5 разів порівняно з групою пухлиноносіїв, але не досягають значень контрольної групи.

Більш ефективною виявилася транс – конфігурація. Механізми впливу сполук на досліджувані параметри пов'язані, з одного боку, з наявністю почверного зв'язку, що є пасткою для вільних радикалів, з іншого боку, з природою ліганду, який може зв'язуватись з білковими молекулами та впливати на їх функції, а також взаємодіяти з мембраною клітин та її стабілізувати. А також ефективність активних сполук залежить від особливостей їх хімічної структури. А саме від характеру та послідовності розміщення атомів у молекулі речовини, довжини вуглеводного ланцюга.

**ВЛИЯНИЕ КРИОКОНСЕРВАЦИИ НА АКТИВНОСТЬ  
ПЕРОКСИДАЗЫ РЕДЬКИ ЧЕРНОЙ**

*Нусретова С.Ш., Ибрагимова Э.И. Вяткина О.В.*

Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского  
oksana\_vyatkina@list.ru

В промышленных биокаталитических процессах широко используются различные ферменты, но особый интерес представляют собой оксидоредуктазы, в частности растительные пероксидазы. Однако перспективы использования растительных пероксидаз в промышленности, водоочистке, химическом анализе зачастую ограничены низкой стабильностью и активностью нативного фермента. Одним из наиболее простых методов сохранения активности нативных ферментных препаратов является их хранение при низких температурах, в частности в замороженном состоянии. Учитывая, что воздействие низких температур на активность каждого фермента строго индивидуально и может приводить как к его активации, так и к снижению активности, целью нашей работы было изучение влияния криоконсервации на активность пероксидазы редьки черной.

Объектами исследования являлись фосфатно-буферный (рН=6,8) и ацетатно-буферный (рН=5,75) экстракты пероксидазы корнеплодов редьки черной. В качестве субстрата-восстановителя применяли гидрохинон, субстрата окислителя - пероксид водорода. Полученные экстракты пероксидазы редьки черной, замораживали при температуре - 20°C и выдерживали от 5 до 40 суток. После чего в размороженных при t=25°C растворах определяли пероксидазную активность по гидрохинону и степень его конверсии. Изменение концентрации гидрохинона в исследуемых системах контролировали фотоколориметрическим методом по реакции с о-фенантролином в присутствии ионов Fe<sup>3+</sup>.

В ходе исследований было определено, что активность свежесыведенного ацетатно-буферного экстракта пероксидазы редьки черной в 1,8 раза меньше активности фосфатно-буферного экстракта. Показано, что длительное хранение экстрактов пероксидазы редьки черной в замороженном виде при t= - 20°C приводит к снижению активности фермента вследствие конформационных изменений. Установлено, что оптимальная длительность криоконсервации при t= - 20°C для фосфатно-буферных экстрактов пероксидазы редьки черной составляет 19 суток, а для ацетатно-буферного экстракта – не более 7 суток.

## ИЗМЕНЕНИЯ УРОВНЯ СУБКЛАССА ИММУНОГЛОБУЛИНА G1 В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ВОЗРАСТА

*Пастухов А.О.<sup>1</sup>, Горбачев А.А.<sup>1</sup>, Прилуцкий А.С.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Донецкий национальный университет

<sup>2</sup>Донецкий национальный медицинский университет им. М.Горького  
sequoror@gmail.com

Основной функцией иммунной системы является поддержание внутреннего гомеостаза организма. Изменение уровня иммуноглобулинов наблюдается при заболеваниях иммунной системы, аутоиммунных патологиях, гепатитах, рецидивирующих инфекциях, в том числе первичных и вторичных иммунодефицитах. Синтез иммуноглобулинов осуществляется В-лимфоцитами. Основное количество иммуноглобулинов находится в глобулярной фракции сыворотки крови, лимфе, слюне, других жидкостях организма или на поверхности клеточных мембран, где они исполняют роль рецепторов или принимают участие в нейтрализации (разрушении) чужих, а иногда и своих антигенов.

В норме содержание иммуноглобулина IgG у взрослого человека составляет 8,0 - 14,3 г/л. В первые часы у новорожденных уровень IgG составляет 110 % от уровня матери, а затем происходит снижение до уровня 3 - 4 г/л в первые месяцы жизни. С возрастом содержание иммуноглобулинов IgG увеличивается, причем в период полового созревания наблюдается максимальное содержание субклассов IgG1 и IgG3. Индивидуальные или комбинированные дефициты субклассов IgG1, IgG2 или IgG3 ассоциируют с повышенным риском заболевания различными инфекциями респираторного тракта (синуситы, отиты, риниты). В основном такие пациенты не имеют жизненно угрожаемых инфекций.

Дефицит IgG1 часто ассоциирует с недостаточностью других субклассов и, как правило, сопровождается снижением общего уровня IgG. Нередко дефицит IgG1 классифицируется как общая вариабельная иммунная недостаточность, особенно в сочетании со снижением уровня других субклассов.

В связи с вышеизложенным важным является определение уровня субкласса IgG1 у здоровых лиц в зависимости от возраста.

Объект исследования – сыворотка крови детей в возрасте от 6 месяцев до 18 лет и сыворотка крови взрослых (старше 18 лет).

Предмет исследования – уровень субкласса иммуноглобулинов IgG1.

Исследованы сыворотки крови детей в возрасте от 6 месяцев до 18 лет и здоровых лиц в возрасте от 18 до 30 лет. Результаты исследований представлены в таблице.

Таблица

**Уровень субкласса IgG1 в зависимости от возраста**

Возраст пациента, годы	1	2	3	4-6	7-9	10-12	13-15	16-18	>18
IgG1, (г/л)	2,93	4,10	4,91	5,14	5,95	5,42	6,42	6,19	6,00

Следует отметить, что уровень субкласса IgG1 достигает возрастной нормы к 7 годам. Количество иммуноглобулинов данного субкласса за этот период возрастает в среднем от 2,93 г/л до 5,95 г/л. Полученные данные согласуются с литературными. В последующем средний уровень IgG1 существенно не отличается от данных и в период 7 -18 лет колеблется в пределах 5,42 - 6,19 г/л.

В период полового созревания (13 – 15 лет) наблюдается максимальный уровень субкласса IgG1. Аналогичная картина характерна и для остальных субклассов IgG.

## ПРИМЕНЕНИЕ МУЛЬТИМЕДИЙНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В ПРЕПОДАВАНИИ СПЕЦКУРСА “ХИМИЯ БЕЛКА”

*Божкова Я. А.*, Баранова О. В.,  
Донецкий национальный университет  
[bozhkovaYa@yandex.ru](mailto:bozhkovaYa@yandex.ru)

Мы живем в веке интенсивно развивающихся информационных технологий и информационного общества.

Информационные технологии внедряются во многие области деятельности человека, в том числе и в современное образование, одной из задач которого является повышение эффективности и качества учебного процесса за счет использования современных информационно-компьютерных технологий. Одним из дидактических средств, которое позволяет решить данную задачу, является мультимедиа. Мультимедиа – многокомпонентная среда, которая позволяет использовать текст, графику, видео и мультипликацию, то есть комбинировать излагаемую информацию в разных формах.

Студентам-биохимикам Донецкого национального университета химического факультета преподают спецкурс “Химия белка”. Основная цель данного спецкурса - объяснение физиологической роли белковых веществ на основании изучения их структуры, или установления взаимосвязи “химическая структура – пространственное строение – биологическая активность белков”. Благодаря методу рентгеноструктурного анализа постоянно растет количество открытий, связанных с установлением трехмерной конформации белковых молекул. Поэтому квалифицированным специалистам-биохимикам необходимо разбираться в вопросах, касающихся пространственной структуры молекул биополимеров, в частности белков.

Для изложения материала по некоторым темам спецкурса, таких как “Уровни структурной организации белков”, “Типы укладки белков”, “Фолдинг белков”, “Структурная характеристика основных представителей белков”, необходимы наглядные материалы для лучшего понимания и представления пространственной конформации молекул. В связи с этим, целесообразно использовать информационно-компьютерные технологии, в частности, средства мультимедиа.

Нами были разработаны мультимедийные презентации конспектов по 18 темам спецкурса и предложена методика их использования в учебном процессе:

1. Студенты заранее самостоятельно знакомятся с электронным конспектом предстоящей лекции.
2. На лекции преподаватель раскрывает содержание рассматриваемой темы, с которой заранее познакомились студенты, углубляя теоретический материал.

За счет интенсификации учебного процесса преподаватель получает больше времени на обсуждение наиболее сложных и важных фрагментов учебного материала.

Такой метод проведения лекций способствует повышению эффективности обучения и качества знаний студентов.

**ВНЕДРЕНИЕ ОБУЧАЮЩИХ И КОНТРОЛИРУЮЩИХ  
ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ЗАДАНИЙ В ДИСТАНЦИОННЫЙ КУРС  
«ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА»**

*Жугар А.-М.А., Михальчук В.М., Полищук Т.Б.*

Донецкий национальный университет  
[annamariya20@gmail.com](mailto:annamariya20@gmail.com)

Основу учебного процесса в дистанционном курсе обучения составляет целенаправленная и контролируемая интенсивная работа студента. Осуществление оперативного контроля над учебной деятельностью студентов является одной из главных проблем дистанционного обучения. Использование компьютерных технологий в учебном процессе придает новый статус самостоятельной работе студента, в рамках которой обучение с использованием аппаратных средств, являясь по форме индивидуальным и самостоятельным, становится контролируемым и управляемым.

Компьютерные обучающие программы (КОПР) – это программные средства учебного назначения, используемые студентом при самостоятельном усвоении учебного материала. Структура обучающего индивидуального задания представляет собой интерактивный диалог между студентом и системой, который осуществляется поэтапно. Студент совместно с обучающей программой шаг за шагом проходит путь решения рассматриваемой в качестве примера задачи. При неправильных действиях студента программа выдает подсказки, рекомендации или необходимые в данный момент фрагменты теоретического материала. Тем самым преподаватель виртуально участвует в процессе самостоятельной работы студента.

Обучающие индивидуальные задания составлены по всем основным разделам курса «Химическая термодинамика». Их структура представлена в таблице.

Темы	Подтемы	Количество задач
Первый закон термодинамики	Адиабатический процесс; изохорный процесс	2
Термохимия	Законы: Гесса, Кирхгофа	3
Второй закон термодинамики	Изменение энтропии для различных процессов	3
Термодинамические потенциалы	Изменение энергий Гиббса, Гельмгольца	2
Фазовое равновесие в однокомпонентных системах	Уравнения: Клапейрона, Клапейрона-Клаузиуса	3
Растворы неэлектролитов	Закон Рауля для бинарных растворов	2
Коллигативные свойства растворов	Эбулиоскопия; криоскопия и осмотическое давление	2
Химическое равновесие	Расчет степени диссоциации и константы диссоциации; уравнения изобары, изохоры	3

Всего загружено в среду MOODLE 180 контролирующих заданий. Индивидуальные задания созданы в виде тестов открытой формы. Программой заложено постоянное перемешивание задач по 8 заданий в каждом варианте, структура которых охватывает весь теоретический материал по выше перечисленным темам.

## НОВЫЕ ПЕДАГОГИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ В ОБУЧЕНИИ ХИМИИ

Журбенко В.Е.

Донецкая общеобразовательная школа I-III ступеней №8

azovchanka-69@mail.ru

Современное общество перешло к информационной эпохе своего развития. В настоящее время невозможно представить образовательный процесс без компьютерной техники. Одной из основных задач, стоящих перед системой школьного образования, является формирование новых педагогических технологий при обучении химии. В программе по химии отмечено, что учащиеся должны уметь самостоятельно проводить поиск информации о химических веществах и их превращениях в различных источниках (в т.ч. с использованием компьютерных технологий).

В современном учебно-воспитательном процессе новые технологии можно использовать при подготовке к уроку, изложении нового материала, проведении лабораторных и практических работ, закреплении материала, в системе контроля знаний, при проведении внеклассных мероприятий, при диссеминации опыта работы.

Работу на уроках и во внеурочное время помогают организовать электронные учебники, которые помогают усвоить базовые знания по предмету, систематизировать усвоенные знания, сформировать навыки самостоятельной работы с учебным материалом и самоконтроля знаний, расширить знания по предмету, сформировать мотивацию к учению в целом и к химии в частности.

К наиболее интересным формам представления материала по химии следует отнести мультимедийные презентации. Данная форма позволяет представить учебный материал как систему ярких опорных образов, наполненных структурированной информацией. Использование мультимедийной презентации целесообразно на любом этапе изучения темы и на любом этапе урока, а также при проведении различных внеклассных мероприятий.

Практика показывает, что дети с большим успехом, чем взрослые, осваивают компьютеры. Учащиеся не только находят презентационные сопровождения к урокам и внеклассным мероприятиям в Интернете, но и сами индивидуально и коллективно создают презентации. В последнее время почти во всех конкурсах и мероприятиях для выступления необходимы презентации. С различными видами презентаций мы выступали на конференциях, семинарах, конкурсах и т.д.

Одним из основных современных активных инновационных методов обучения является проектная деятельность, в ходе которой ребята учатся выдвигать проблему, анализировать материал, пользоваться приобретенными знаниями, развивать навыки исследования. В ходе проектной деятельности у учащихся формируются общекультурные, учебно-познавательные, информационные, коммуникативные компетенции, а также происходит личностное самосовершенствование. У нас постоянно пополняется копилка проектных работ учащихся. Дети выступают со своими работами на конкурсах и мероприятиях различного уровня и имеют высокие результаты.

Грамотное сочетание традиционных средств с применением интерактивного оборудования позволяет повысить мотивацию детей к знаниям. Использование интерактивной доски существенно изменяет деятельность учителя и учащихся. Ребенок не только визуально воспринимает информацию, но и переключается на проблемно-поисковую деятельность. Интерактивная доска позволяет рационально и эффективно использовать время, чередовать деятельность во время урока, эффективно контролировать работу учащихся, развивать их творческие способности.

Новые педагогические технологии относятся к так называемому гуманистическому подходу в психологии и в образовании, главной отличительной чертой которого является особое внимание к индивидуальности человека, его

личности, четкая ориентация на сознательное развитие самостоятельного критического мышления. Этот подход рассматривается в мировой педагогической практике как альтернативный традиционному подходу, основанному, главным образом, на усвоении готовых знаний и их воспроизведении.

В заключении хочется отметить, что выше сказанное, между тем, вовсе не означает стремление к революционным преобразованиям в педагогике. Это связано с потребностями сегодняшнего дня, о смене приоритетов с усвоения готовых знаний в ходе классных занятий на самостоятельную активную познавательную деятельность каждого ученика с учетом его особенностей и возможностей, деятельность, не всегда укладываемую в систему урока.

Если каждое из указанных направлений педагогических технологий будет интегрировано в той или иной степени, а также между собой и найдет свое место в учебно-воспитательном процессе. То постепенно, что вполне естественно, могут, вытесняя традиционные методы и формы работы, то, думается с течением времени удастся выработать наиболее оптимальный подход к организации учебного процесса в наших условиях с учетом специфики украинских школ и нашей культурной среды.

Использование новых информационных технологий в курсе химии значительно поднимает уровень обученности учащихся.

## ДИСТАНЦІЙНИЙ КУРС НАВЧАННЯ «СТРУКТУРНА ХІМІЯ»

*Мазур Л.М.,* Пастернак О.М.

Донецький національний університет

[e.pasternak@donnu.edu.ua](mailto:e.pasternak@donnu.edu.ua)

Орієнтація учбового процесу на особистість, яка розвивається самостійно, вимагає врахування індивідуальних особливостей студентів, надання їм прав вибору шляхів та способів навчання.

Впровадження в практику навчально-методичного комплексу дисципліни, до складу якого входить дистанційний курс навчання, активно сприяє модернізації навчального процесу.

Дистанційний курс дозволяє організувати і контролювати самостійну роботу студента, формувати вміння самостійно поповнювати та оновлювати знання, вести самостійний пошук необхідного матеріалу, бути творчою особистістю.

Здатність застосовувати хімічні методи дослідження для одержання інформації про склад і будову речовин та матеріалів є складовою професійних компетенцій студента напряму підготовки хімія. Відповідна компетенція формується системою умінь, які студенти напряму підготовки «Хімія» набувають при вивченні професійних дисциплін, серед яких «Основи структурної хімії».

Використовуючи сучасні технології лабораторії дистанційного навчання ДонНУ систему MOODLE (<http://dl.donnu.edu.ua/moodle/>) розроблено дистанційний курс «Структурна хімія». Дистанційний курс необхідний студентам заочної (прискореної) форми навчання, у зв'язку з тим, що основною формою їх навчання є позааудиторна самостійна робота, яка вимагає ретельної організації для досягнення позитивного результату. Дистанційний курс допоможе оптимізувати самостійну роботу студентів денної форми навчання.

Дистанційний курс складається з наступних елементів: інформаційний блок, теоретичний матеріал, лабораторний практикум, система контролю знань. В інформаційному блоці розміщено елементи робочої програми курсу, навчальний план аудиторних занять, список рекомендованої літератури, типовий приклад переліку питань до поточної та ітогової форми контролю знань.

Навчальний матеріал курсу структурований відповідно до технології кредитно-модульного навчання, його розбито за змістом на логічно завершені теоретичні частини. Користувачеві інформація демонструється послідовно, існує можливість повернутися для повторного ознайомлення з навчальним матеріалом. Кожна навчальна тема завершується питаннями для самостійної підготовки до залікового модуля, посиланнями на базові та додаткові літературні джерела. Подібна структура дозволяє визначити не тільки оптимальну траєкторію вивчення матеріалу, але й зручний темп роботи.

Виконання студентами лабораторних робіт спрямовано на узагальнення, систематизацію, поглиблення отриманих теоретичних знань з навчальних тем дисципліни. Кожна лабораторна робота спрямована на формування практичних навичок у студентів. Протягом лабораторного практикуму студенти виконують дослідницьку роботу, яка завершується самостійним аналізом та узагальненням отриманих результатів.

Дистанційний курс «Структурна хімія» знаходиться в процесі впровадження, але вже очевидно, що система «студент – комп'ютер» більш ефективна, ніж робота людини без електронного помічника, безсумнівний той факт, що використання інформаційних технологій дає користь тому, кого навчають.

**ОРГАНИЗАЦИЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ ПРИ  
ИЗУЧЕНИИ ТЕОРЕТИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛА ПО КУРСУ  
«КИНЕТИКА И КАТАЛИЗ»**

*Маценко А. А.*, Полищук Т. Б., Белая Н. И.  
Донецкий национальный университет  
macenko1991@mail.ru

Перед современным высшим образованием возникает ряд важных задач, которые направлены на улучшение качества учебного процесса, обеспечение научного уровня преподавания и успешного овладения студентами основами наук. Одним из основных компонентов учебной деятельности, который выдвигается на первый план, является самостоятельная работа студентов. Для повышения эффективности изучения теоретического материала студентами процесс обучения должен происходить с использованием персональных ЭВМ.

С этой целью теоретический материал по электронному курсу «Химическая кинетика и катализ» был разбит на семь разделов: «Формальная кинетика», «Кинетика сложных химических реакций», «Теоретические представления химической кинетики», «Цепные и фотохимические реакции», «Гомогенный катализ», «Гетерогенный катализ», «Ферментативный катализ».

По вышеперечисленным разделам были подготовлены лекции (на русском и украинском языках) в электронном варианте для загрузки в среду MOODLE (34 часа лекций). Всего в среде MOODLE 20 часов лекций по «Кинетике» и 14 – по «Катализу».

После подготовки лекций был составлен глоссарий по представленным разделам курса. Глоссарий состоит из основных и дополнительных терминов, построен в алфавитном порядке и создан с целью расшифровки терминологии по курсу «Кинетика и катализ», а также для облегчения усвоения студентами теоретического материала. При изучении лекций студент может найти расшифровку всех выделенных слов. Т. е. глоссарий служит фундаментом теоретических знаний, на которые студент опирается в дальнейшем при изучении данного курса.

Структура глоссария представлена в таблице, где можно проследить за количественным распределением всех терминов по подразделам.

Таблица 1 - Структура глоссария

№ п/п	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19
Буква	А	В	Г	Д	Е	З	И	К	Л	М	Н	О	П	Р	С	Т	У	Ч	Ш
Количество слов	8	3	5	6	9	7	5	9	1	10	5	3	16	11	5	4	1	2	1
Кинетика	6	-	1	1	4	2	5	3	1	5	4	-	9	7	3	2	1	1	-
Катализ	2	3	4	5	5	5	-	6	-	5	1	3	7	4	2	2	-	1	1

Глоссарий содержит из каждого подраздела определенное количество понятий, уравнений, законов и теорий.

Студенты при работе с глоссарием могут пользоваться имеющимися терминами с помощью программы MOODLE. Качество усвоения теоретического материала проверяется при сдаче теоретического коллоквиума.

**СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ТРЕБОВАНИЙ  
К НЕОБХОДИМОМУ УРОВНЮ ШКОЛЬНЫХ ЗНАНИЙ В  
ОБЩЕОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ И ВЫСШЕЙ ШКОЛЕ**

*Мирошниченко Т.Н.<sup>1</sup>, Капитанов И.В.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> Донецкая общеобразовательная школа I-III ступеней № 14

<sup>2</sup> Донецкий национальный университет

[tnmirosh@mail.ru](mailto:tnmirosh@mail.ru)

В последние несколько лет наблюдается устойчивая тенденция снижения объема знаний абитуриентов в области естественнонаучных дисциплин (в частности, химии). Во многом это обусловлено сокращением количества часов, отведенных на их изучение. В дальнейшем, недостаточный уровень знаний учащихся приводит к неудовлетворительной успеваемости на начальных курсах высших учебных заведений (ВУЗах) и проблемам при усвоении предметов специализации на старших курсах. Вузовские учебные программы составляются исходя из качественной и всесторонней подготовки студентов на этапе их обучения в школе, однако последняя зачастую не может быть обеспечена в рамках отведенных на изучение предмета часов.

Разрешение данной ситуации возможно четырьмя альтернативными путями:

- 1) самообразование;
- 2) индивидуальные занятия с репетитором;
- 3) занятия в школьных кружках, участие в предметных олимпиадах различных уровней, МАН;
- 4) изменение школьных программ в сторону увеличения часов на естественнонаучные предметы на уровне министерства.

Из всех этих путей решения первые три требуют повышенного уровня личной мотивации учащегося и ориентированы на учащихся с высоким уровнем знаний. Следовательно, они не могут полноценно обеспечить равномерную учебную нагрузку всех учащегося и их качественную подготовку, поскольку, например, для усвоения программы по химии на уровне, достаточном для успешного обучения в университете, необходима также хорошая подготовка по смежным с химией дисциплинам – математике, физике и биологии. Таким образом, учащемуся необходимо усвоить значительный объем материала сверх школьной программы по нескольким предметам. Это приводит к несбалансированной избыточной нагрузке на учащихся в старших классах средней школы.

Наиболее оптимальный выход из сложившейся ситуации видится в изменении учебных программ общеобразовательной школы с учетом требований высшего образования к необходимому объему школьных знаний. Процесс согласования и изменения программ в ВУЗах и общеобразовательной школе должен происходить синхронно, при тесном взаимодействии «школа-ВУЗ».

Хорошей практикой в данном случае, наряду с работой по повышению мотивации учащихся к изучению естественнонаучных дисциплин, является введение специализированных курсов и факультативов в старших классах школы, в которых углубленная подготовка по тесно связанным между собой дисциплинам проводится в большем объеме (достаточном для успешного обучения в ВУЗе).

## СУЧАСНІ ПРОГРАМИ - СИМУЛЯТОРИ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ СИСТЕМ

*Набок О.М., Афонін Г.Г., Безносик Ю.О.*

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»  
[alex2shae@mail.ru](mailto:alex2shae@mail.ru)

Системний аналіз складних хіміко-технологічних систем (ХТС) – це найважливіший етап дослідження хіміко-технологічних виробництв, мета якого знайти найкращий варіант проектного рішення при створенні нового або при реконструкції існуючого виробництва. Оскільки ХТС слід розглядати як складні системи, що можуть бути формалізовані, то їх дослідження проводять із застосуванням сучасних методів та програмних засобів аналізу складних систем.

Тому університетська підготовка бакалаврів, спеціалістів та магістрів із хіміко-технологічних спеціальностей повинна проводитись із урахуванням того, що вони повинні:

- знати методи системного аналізу складних ХТС;
- вміти обирати відповідні математичні та комп'ютерні моделі, що реалізують технологічні процеси та ефективні програмні засоби для рішення поставлених задач дослідження;
- вміти із системних позицій аналізувати отримані результати в процесі прийняття рішень щодо вибору найкращого варіанту технологічної схеми виробництва та режимів її функціонування.

Рішення задач моделювання складних ХТС в наш час неможливо без використання сучасних програмних засобів. Серед цих програмних засобів центральне місце займають моделюючі програми симулятори ASPEN PLUS, HYSYS, PRO/II та ChemCad. Їх широко використовують як при проектуванні нових виробництв, так і при реконструкції діючих. Слід відзначити загальну тенденцію переходу моделюючих програм на використання в розрахунках усе більш складних й тому адекватних математичних моделей технологічних апаратів.

Основними компонентами програм симуляторів для моделювання хіміко-технологічних процесів є: стаціонарні моделі основних операцій, термодинамічні моделі, банки даних властивостей речовин, інтерфейс для зв'язку з іншими програмами та ін. Ці програмні продукти мають свої загальні й відмінні риси. Але основний спектр їхніх можливостей у достатній мірі збігається.

Програмний пакет HYSYS, розроблений фірмою Huprotech, широко застосовується для проведення розрахунків технологічних схем газо- та нафтопереробки, хімії в усьому світі. Саме HYSYS було обрано для розрахунку складних ХТС при виконанні бакалаврських курсових проектів та магістерських дисертацій на кафедрі кібернетики хіміко-технологічних процесів НТУУ «КПІ». Для різних ХТС було виконано розрахунки матеріальних й теплових балансів:

- окиснення аміаку у виробництві азотної кислоти;
- виробництва хлороводневої кислоти;
- виробництва карбаміду;
- отримання ацетальдегіду окисненням етилену;
- виробництва етилбензолу та ін.

Всі отримані результати відповідали основним параметрам процесів. При цьому було розглянуто широке коло математичних моделей технологічних апаратів, застосовувались різні методи розрахунку термодинамічних властивостей. Були використані спеціальні можливості програм симуляторів для дослідження процесів та їх оптимізації.

## ВИКОРИСТАННЯ ТЕХНОЛОГІЇ КРИТИЧНОГО МИСЛЕННЯ ЯК МОДЕЛІ ІНТЕРАКТИВНОГО НАВЧАННЯ

*Тарасенко У.О.*

ЗОШ №20 м. Донецька

З метою активізації пізнавальної діяльності учнів на уроках хімії, розвитку творчого продуктивного мислення, самостійності, вміння спілкуватися одне з одним необхідно використовувати активні форми й методи навчання. Досвід роботи свідчить про те, що найбільш ефективним за результатами є інтерактивне навчання.

Сьогодні існує багато форм і методів навчання хімії, що орієнтовані на краще засвоєння навчального матеріалу, підвищення якості вмінь і навичок. Але для досягнення цієї мети необхідно будувати урок таким чином, щоб він був не лише цікавим, але й не перевантаженим для учня. Інтерес учнів до уроку та його ефективність зростають, коли поряд із класичними методами широко використовуються інноваційні.

Пізнавальна діяльність включає безпосередньо сприйняття матеріалу, що вивчається, його осмислення й запам'ятовування, застосування знань на практиці. Ці процеси відбуваються ефективніше в разі поєднання слухового сприйняття пояснення вчителя із зоровим сприйняттям різних засобів наочності. Необхідно не лише забезпечити учнів багажем знань, але й виховати інтелектуально розвинену особистість, що буде прагнути одержати ці знання. Інтерес учня до хімії залежить не стільки від змісту предмета, скільки від переконання у важливості власне процесу навчання, а ефективність цього процесу залежить не лише від здібностей учня.

Активна модель навчання передбачає застосування методів, які стимулюють пізнавальну діяльність і самостійність учнів. Технологія розвитку критичного мислення розроблена як модель інтерактивного навчання. У філософії під критичним мисленням розуміють уміння логічно мислити й аргументувати, аналітично дискутувати та правильно висловлювати свою думку. У педагогіці критичність розглядається як усвідомлений контроль за ходом інтелектуальної діяльності, у процесі якої відбувається оцінювання роботи думок, вироблених гіпотез, шляхів їх доведення тощо. Таким чином, критичне мислення – це мислення вищого порядку, яке спирається на інформацію, усвідомлене сприйняття власної інтелектуальної діяльності та діяльності інших, сприяє розвитку такої особистісної риси, як креативність, і формує творче мислення, а отже творчу особистість.

Дуже важливим і інтерактивному навчанні є розвиток прийомів критичного мислення. Сформовані навички критичного мислення забезпечують прийняття найбільш оптимальних рішень у будь-якій професійній сфері, відкритість до нових ідей і знань. Критичне мислення необхідне під час розв'язання проблемних задач, формулювання висновків, оцінювання та прийняття рішень.

## КОНЦЕПЦІЇ ВПРОВАДЖЕННЯ ДИСТАНЦІЙНОГО НАВЧАННЯ В СУЧАСНУ СИСТЕМУ ОСВІТИ

Берзеніна О.В., Хмарська Л.О.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»

[berox@mail.ru](mailto:berox@mail.ru), [liya1@ua.fm](mailto:liya1@ua.fm)

Дистанційне навчання – є такою формою навчання, у межах якої через електронні засоби здійснюється віддалена взаємодія студентів (персоналу, клієнтів), викладача і навчального контенту. Технології дистанційного навчання дозволяють комбінувати навчальний контент, регламентувати доступ до нього, здійснювати моніторинг процесу навчання, здійснювати статистичні дослідження.

У наш час діяльність людини все більше пов'язана із віртуальним простором. Тому дистанційне навчання, що базується на використанні комп'ютерних технологій і отриманні інформації з віртуального простору, є ефективною формою системного процесу освіти. Але щоб така форма успішно розвивалася, необхідні значні зусилля з боку ІТ-персоналу, спеціалістів в певних галузях знань, методистів, обізнаних у специфіці Інтернету, комунікаційних технологіях, сучасних тенденціях у системі освіти, психологічних особливостях взаємодії у комп'ютерних мережах.

Головна умова успішної реалізації дистанційного навчання – індивідуальний підхід до суб'єкту навчання: визначення рівня початкової підготовки, форми подання інформації, психологічних особливостей студента, мотивація його до навчання. Звідси виникає необхідність персоналізації навчального процесу через впровадження індивідуальних планів, які можна легко змінювати відповідно до потреб конкретної особи.

Серед незаперечних переваг дистанційного навчання:

- часткове вирішення проблеми дефіциту кваліфікованих викладацьких кадрів (один кваліфікований викладач може охопити його курсом необмежену кількість учнів),
- створення гнучких графіків роботи викладачів, які можуть самі регулювати час виконання своїх обов'язків;
- можливість навчати необмежену кількість слухачів, у тому числі таких, що проживають далеко від навчального закладу
- розвантаження аудиторного фонду, а значить і зменшення оплати комунальних послуг;
- автоматизація необхідних етапів навчального процесу (поточний контроль, підсумковий контроль)
- здешевлення компонентів навчального процесу за рахунок електронних навчальних посібників та мобілізація адміністративного ресурсу.

У системі дистанційного навчання сертифікація знань реалізується єдиним способом – інтерактивними тестами, результати яких обробляються автоматично. Правильно перерозподіляючи навантаження між системою самооцінки знань, заочної оцінки і очної сертифікації, можна сформувати цілісний і послідовний навчальний процес.

Впровадження дистанційних складових в освітній процес є необхідним і не залежить від типу вищого навчального закладу та напряму підготовки.

## ЕМОЦІЙНИЙ ВПЛИВ ЯК САМОСТІЙНИЙ ФАКТОР АКТИВІЗАЦІЇ ПІЗНАВАЛЬНОЇ ДІЯЛЬНОСТІ СТУДЕНТІВ

*Хоружа І.А.*

Східноукраїнський національний університет імені Володимира Даля, м. Луганськ  
[Chemistry403@mail.ru](mailto:Chemistry403@mail.ru)

Одним з основних принципів, що обумовлює розвиток системи вищої освіти України в сучасних умовах, є створення інноваційного простору на основі освітньої і наукової підтримки. Саме інноваційний шлях розвитку суспільства можна забезпечити, сформувавши покоління людей, які мислять і діють по-новому. Тому пріоритетним напрямом сьогодні стає розвиток особистості, її комунікативних здібностей, самостійності в ухваленні рішень, критичності і культури мислення.

Виконання такого роду завдань стає можливим тільки в умовах активного навчання, яке сприяє формуванню пізнавальної активності.

Фізіологічною основою пізнавальної активності є неузгодженість між наявною ситуацією і минулим досвідом. Особливе значення на етапі включення студента в активну пізнавальну діяльність має орієнтовно-дослідний рефлекс, що представляє собою реакцію організму на незвичайні зміни в зовнішньому середовищі. Управління активністю студентів традиційно називають активізацією. Активізацію можна визначити як процес спонукання до енергійного, цілеспрямованого навчання.

На початку навчання діяльність студента характеризується прагненням зрозуміти, запам'ятати і відтворити знання, але пізнавальна активність відрізняється нестійкістю вольових зусиль, відсутністю інтересу до поглиблення знань. На цьому етапі дуже важливо застосування емоційного фактора.

Наприклад, коли учень сприймає і запам'ятовує інформацію, пов'язана з нею емоційна реакція може грати роль якогось ментального індексу, що дозволяє надалі відтворити спогади і пов'язану з ними інформацію.

Емоції керують людиною набагато сильніше, ніж це здається на перший погляд. Вони можуть впливати на процес навчання забезпечуючи інтенсивність діяльності. Немає ніякого сумніву, що емоції роблять сприйняття більш барвистим. Своїм впливом вони змінюють кут зору, під яким ми дивимося на світ. З урахуванням цього у лекціях з хімії використовуються елементи цікавості (факти з художньої, науково-популярної літератури та інших джерел) - один із засобів формування стійкого пізнавального інтересу, що сприяє емоційній розрядці або мобілізації уваги. Лекції супроводжуються необхідними записами опорних конспектів, малюнками, схемами, знайомством з протиріччями в науці, з життям і діяльністю вчених-хіміків.

Емоційний вплив також допомагає формуванню відтворювальної активності, коли студент прагне до виявлення змісту дослідження, прагне пізнати зв'язки між явищами і процесами, оволодіти способами застосування знань в змінених умовах. Цей рівень відрізняється великою стійкістю вольових зусиль.

У формуванні творчої активності важливу роль грає хімічний демонстраційний експеримент. Чому б не відхилитися від лінійного мислення і не використовувати прагнення до відкриття і дослідження? На цьому етапі студент прагне не тільки проникнути глибоко в сутність явищ та їх взаємозв'язків, а й знайти для цієї мети новий спосіб досягнення.

Отже курс хімії повинен викладатися таким чином, щоб викликати насамперед пізнавальний інтерес, який активізує розумову діяльність студентів і є стимулом, передумовою успішного вирішення інтелектуальних завдань в майбутньому.



	<b>A</b>		Баранова О.В.	163,170
Abdulsattar O.D.	90		Батиг С.М.	134
	<b>B</b>		Безносик Ю.О.	81,83,177
Bilanov D.V.	108		Белая Н.И.	71,78
	<b>C</b>		Беличь А.С.	160
Chmilenko F.A.	25,26		Белогур И.С.	16
Chmilenko T.S.	26		Белый А.В.	71,78
Connétable Damien	79		Берестнева Ю.В.	57,80,85,88
	<b>D</b>		Берзеніна О.В.	179
Danylyuk I.V.	4		Беспалько Ю.М.	55,69
Dyuzheva A.I.	25		Біда О.О.	113
	<b>I</b>		Біла Н.І.	67,77,175
Ivashchenko I. A.	4		Білий О.В.	67,77,127
	<b>K</b>		Богданова Н.О.	161
Kandaskalov D.V.	79		Богза С.Л.	93,96
Krasnikov D.A.	90		Божкова Я.О.	170
	<b>M</b>		Бойко М.М.	5
Malysh A.V.	108		Большакова А. С.	167
Matorina K.V.	26		Бондарь Е.С.	131
Mijoule Claude	79		Брановицкая Т.Ю.	40
	<b>O</b>		Букрей А.О.	57
Olekseyuk I. D.	4		Булавин В.И.	110
	<b>S</b>		Булгакова А.В.	6
Saraeva T.A.	90		Бурмістр М.В.	140,146
Shersheniuk I.A.	108		Быканова В.В.	111
	<b>V</b>			<b>B</b>
Vatichuk O.V.	26		Варениченко С.А.	103
	<b>Z</b>		Ведь М.В.	119
Zhuk L.P.	25		Везель С.В.	112
	<b>A</b>		Великая Е.В.	103
Абдурахманова Э.Р.	91		Вербицька Н.О.	24
Абраменко В.Л.	7,10,156		Виноградов В.В.	58
Авдеенко А.П.	94,107		Виноградов Б.О.	45
Алексеєнко Г.В.	109		Виноградова Н.А.	92
Алемасова А.С.	36,49		Вишневецька Я.Г.	162
Алемасова Н.В.	52		Власян С.В.	113,128
Альами Д.А.	110		Войнова Е.В.	7
Ананьева Д.Ю.	133		Войтенко Т.А.	8
Андреева А.М.	27		Волкова Л.К.	66
Андрощук Д.С.	117		Волошин М.Д.	113,118,128
Арендаренко С.С.	55		Вяткина О.В.	168
Арістова Н.І.	45			<b>Г</b>
Артёмова О.А.	56		Гавва М.	12
Артюхова Т.Ф.	24		Гапон Ю.К.	119
Афонін Г.Г.	177		Гелеверя А.А.	93
	<b>Б</b>		Герасименко Л.В.	113
Бабалик Ю.В.	28		Герасимова В.В.	111
Бакурова Е.М.	163		Гладир І.І.	145

Глиняна Н.В.	100	Журба К.С.	32
Глушкова М.А.	119	Журбенко В.Е.	172
Голованець В.М.	135	<b>З</b>	
Гончарова С.А.	94	Заровная И.С.	95
Гопайца В.А.	114	Заруба С.В.	33
Горбатко С.В.	126	Зеленський О.І	132
Горбачев А.А.	169	Зінченко П.В.	60
Горяєва Я. І.	167	Зотова Т.Г.	153
Гриб М.П.	136	Зубеня Н.В.	34
Григорьева А.А.	14,18	Зюбанова С.И.	119
Гринь Г.И.	15	<b>И</b>	
Грищенко В.К.	154	Ибрагимова Э.И.	168
Гугина С.Ю.	137	Иваница Л.А.	43
Гуков В.С.	59	Иванцова Э.С.	11
Гумерова Н.И.	9	Игнатов А.В.	17
Гумінілович Р.Р.	29	Исмаилова Д.Я.	163
Гуртова О.В.	31	<b>І</b>	
Гуртова О.М.	127	Іваниця Л.О.	33
Гуртовой Д.В.	133,142	Іванченко А.В.	118,130
<b>Д</b>		<b>К</b>	
Давискиба В.В.	5	Калиниченко Е.А.	75,166
Дегтярьова К.В.	8	Каниболоцкая Л.В.	70,75,92,160, 165,166
Дедикова Т.А.	30	Капитанов И.В.	102,176
Демченко І.Б.	145	Каплун Д.С.	163
Деревянко В.Н.	20,114	Каплюк Т.А.	11
Дінжос Р.В.	147,155	Каракай Л.	12
Дорогань Н.О.	115	Каракуркчи А.В.	119
Дороднев С.В.	80	Карандашов О.Г.	156
Дорошенко А. О.	82	Карев А.И.	138
Дорошенко Т.Ф.	19,162	Карпичев Е.А.	106
Доценко В.В.	105	Карпов Е.Н.	104
Дрозд А.П.	114	Карпов Є.М.	98
Дубинин А.Ю.	112	Касянчук М. Г.	61
Дунікова О.О.	116	Кацева Г.Н.	35
Дяченко В.Д.	98,99,101,104	Кефилева З.Р.	35
<b>Е</b>		Кириченко А.В.	82
Елизарьева Ю.А.	112	Кириченко С.В.	167
Еманова О.С.	10	Кисельов А.В.	100
Ефимова И.С.	47	Клепка В.В.	144
<b>Є</b>		Клименко І.В.	118
Єрмоленко І.Ю.	117	Клягина А.А.	61
Єфімова І.С.	48	Кнішевицький А.В.	100
<b>Ж</b>		Кобеляцька А.С.	62
Жарский Н.И.	10	Кобзар Т.М.	143
Жигар А.-М.А.	171	Кобилянська Т.	135
Жижов В.М.	31	Ковалева А.В.	164,165
Жильцова С.В.	123,150	Ковалевська А.Л.	164
Жилякова Т.П.	45		

Коваленко Т.П.	139	Марков В.И.	103
Коваль К.В.	81	Мартыненко Т.В.	20
Коваль К.Ю.	140	Маршалок О.І.	38
Козяр М.А.	119	Маслова В.Ю.	65
Колодезный Д.Ю.	82	Матвійчук О.Ю.	42
Колосова М.	120	Матійчук А.І.	146
Колябіна Д.О.	83	Матрунчик Ю.В.	161
Коник О.М.	121	Маценко А.О.	175
Коновалова С.А.	94,107	Мельниченко В.И.	134
Корень Я.М.	141	Мерзликина М.А.	66
Кормош Ж.О.	34	Мех Ю.В.	43
Корнієнко Я.М.	125	Мирошніченко И.В.	71
Коротіна Д.В.	36	Михальчук В.М.	133,142,150,171
Коротун М.С.	37	Михальчук О.Д.	125
Костів І.С.	38	Мишак В.Д.	154
Кривоколыско С.Г.	105	Мірошніченко Т.М.	176
Кришень Д.А.	95	Мусаева М.В.	41
Круш Є.А.	122	Мусієнко Є.В.	67
Крымова В.В.	54		<b>Н</b>
Кудріс І.В.	39	Набок О.М.	177
Кудусова С.С.	40	Нагібіна К.О.	166
Кузьминых О.А.	63	Неділько С.А.	8
Куліков А.Ю.	39	Неділько С.Г.	8
Куражнов Є.В.	27	Нечипорук В.В.	87
Кухарчук Т.П.	123	Николаев А.С.	93
Кучер Я.Ю.	142	Николаевский А.Н.	58
Кущ О.В.	64	Ніколаєв О.С.	96
	<b>Л</b>	Ніколенко О.І.	167
Ларук Ю.В.	143	Новак Л.І.	147
Лащенко Е.Ю.	165	Носенчук Т.П.	122
Лебедев В.В.	138	Носова А.Н.	148
Лебедев Є.В.	154	Нусретова С.Ш.	168
Лебедкова О.С.	92,160		<b>О</b>
Левицький В.Є.	143	Овчаренко О.О.	84
Линник Д.С.	124	Одарюк І.Д.	59
Лисак Т.В.	5	Олексюк Е.В.	17
Лисенков Е.А.	135,144	Оникова Ю.Г.	14
Литвинов Ю.Е.	64	Опанасенко О.А.	149
Лобенко С.А.	41	Опейда И.А.	64
Луговой К.С.	36,164	Орлов М.А.	97
Лыга Р.И.	142	Осипенко О.С.	7
	<b>М</b>	Османова А.А.	44
Мазур Л.	174		<b>П</b>
Макарченко Н.П.	109	Павлій П.М.	150
Макеева Л.В.	145	Павшенко Л.Г.	98
Малиш О.В.	68	Паентко В.В.	161
Мамедова Г.А.	13	Пальчиков В.А.	95
Марічев К.О.	100	Панкова А.С.	165

Панов Д.О.	45	Сахненко Н.Д.	111
Панова Э.П.	44	Свердліковська О.С.	140,146
Пастухов А.О.	169	Свечкарёв Д. А.	82
Пашинова О.В.	28	Семенів Д.	135
Пащенко Ю.Є.	126	Семиног В.В.	151
Першина Е.Д.	30	Семяник С.В.	128
Пилипенко А. О.	9	Сердюк А.А.	61
Пиріг І.Ю.	38	Сердюк В.О.	139
Підгора М.К.	68	Сибилева С.Ю.	18
Підгорна Л.П.	156	Сивакова Е.А.	152
Піпа О.Г.	98	Сидорова Л.П.	46
Пітак Я.М.	116	Симонова Е.Н.	71
Полищук Т.Б.	171,175	Симонова Т.Н.	41
Полюжин І.П.	38	Синельникова М.А.	69
Понамаренко О.А.	49	Сівакова К.О.	153
Пономарев В.А.	15	Сінельникова М.А.	60,72,73,76
Попов О.А.	127	Сінельніков С.І.	149
Попова Н.Г.	136	Сірик О.М.	154
Постоянкіна В.А.	17	Следнева О.С.	86
Привалова Г.С.	16	Слотіна Ю.О.	72
Прилуцкий А.С.	169	Снігур Д.В.	48
Приходько Я.О.	46	Сокурєнко К.А.	19
Пятак Я.М.	126	Соловійова Н.В.	23
	<b>Р</b>	Софронов Д.С.	6
Рабошвиль Е.В.	47	Сошникова А.Ю.	49
Радио С. В.	9,11	Стельмашук О.К.	11
Ракша Е.В.	57,80,85	Степанова А.О.	155
Ракша О.В.	88	Степанова Д.С.	73
Рожко Є.Р.	69	Стецик В. В.	53
Розанцев Г. М.	9	Сторчак Д.А.	74
Рокун А.М.	27,37	Субтельний Р.О.	158
да Роша А.М.	87	Суйков С.Ю.	89,127
Рудаков Е.С.	66	Сукач С.М.	101
Рудковская Ю.С.	70	Сукманов В.А.	123
Рулёва К.В.	85	Сулейманова К.В.	156
Рыльская Т.А.	99		<b>Т</b>
Рябов С.В.	149	Тарасенко У.О.	178
	<b>С</b>	Тарнавська О.В.	84
Сабєров В.Ш.	100	Тимченко Я.О.	20
Саванкова Т.М.	17	Титова Е.Н.	137
Саввова О.В.	121,129	Тихонова Г.А.	56
Савєнков А.С.	16	Тітова А.О.	50
Савсуненко О.О.	106	Ткач В.В.	87
Садкова И.В.	95	Ткач В.І.	28
Сазанов Л.А.	137	Толстенко Д.П.	30
Сазонова О.І.	23	Трохимчук Д.А.	157
Саламаха Л.В.	20	Туровський Н.А.	57,80
Сахненко М.Д.	84,132	Туровський М.А.	88

Тучинская К.К.	102	Шепеленко О.С.	132
Тюрина Т.Г	157	Шестозуб А.Б.	113
Тютерева Т.	51	Широкородова Ю.А.	106
	<b>Ф</b>	Шмалько В.М.	132
Фарат О.К.	103	Шпіц Т.В.	88
Федирко С.О.	10		<b>Щ</b>
Фесенко О.І.	129	Щадріна Г.М.	121
Феськов И.А.	104	Щербацький В.П.	8
Фролов К.А.	105	Щербин Э.А.	54
Фуч У.В.	158		<b>Ю</b>
	<b>Х</b>	Юсина А.Л.	107
Хабера К.В.	130		<b>Я</b>
Хаустов Д.В.	21	Яблочкова Н.В.	12
Хижан А.И.	56	Ягодинець П.І.	87
Хижан Е.И.	56,58,96	Яковлев Ю.В.	144
Хлопицький О.О.	109	Яковлева Г.В.	89
Хмарська Л.О.	179	Якуба К.В.	132
Хоменко А.О.	131	Ятчишин Й.Й.	29
Хоружа І.А.	180	Яшуніна Ю.О.	78
Хром'як У.В.	159		
Хрусталёва А.Н.	105		
Худякова С.М.	50		
	<b>Ц</b>		
Цапко А.А.	22		
Цибулько В. А.	53		
Цяпало А.С.	70,75		
	<b>Ч</b>		
Чавров С.А.	138		
Чеботарев А.Н.	47,48		
Черкашина А.Н.	136,152,153		
Чернишова В.В.	23		
Черняк Л.П.	115		
Чичирко М.А.	76		
Чмиленко Т.С.	33,43		
Чмиленко Ф.А.	43		
Чмиленко Ф.О.	31,33,46,50		
Чопенко Г.Г.	52		
Чуйкова В.В.	53		
Чукова О.В.	8		
	<b>Ш</b>		
Шаповалова О.В.	114		
Шацьких В.М.	77		
Швед О.М.	55,60,62,68, 69,72,73,76		
Шемет В.Я.	24		
Шендрик А.Н.	59,70,75,92,160, 164,165,166		



## ЗМІСТ

### Хімія неорганічних сполук

INVESTIGATION OF THE $\text{AgInS}_2\text{-Ag}_9\text{GaS}_6$ SYSTEM BY USING X-RAY AND DIFFERENTIAL-THERMAL ANALYSIS <i>Ivashchenko I.A., Olekseyuk I. D., <u>Danylyuk I.V.</u></i>	4
ПОЛУЧЕНИЕ ТЕТРАЦИКЛОФОСФАТА БАРИЯ <i><u>Бойко М.М.</u>, Давискиба В.В., Лисак Т.В.</i>	5
ПОЛУЧЕНИЕ МИКРО- И НАНОЧАСТИЦ $\text{ZnS}$ ИЗ ТИОМОЧЕВИННЫХ РАСТВОРОВ <i><u>Булгакова А.В.</u>, Софронов Д.С.</i>	6
КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ $\text{WOCl}_4$ И $\text{WO}_2\text{Cl}_2$ С $\beta$ -ДИКЕТОНАМИ В НЕВОДНЫХ СРЕДАХ <i><u>Войнова Е.В.</u>, Осипенко О.С., Абраменко В.Л.</i>	7
ВПЛИВ МЕТОДІВ СИНТЕЗУ НА ВЛАСТИВОСТІ СИСТЕМИ $\text{La}_{1-x}\text{Eu}_x\text{VO}_4$ ( $0 \leq x \leq 0,3$ ) <i><u>Войтенко Т.А.</u>, Дегтярьова К.В., Неділько С.А., Неділько С.Г., Чукова О.В., Щербацький В.П.</i>	8
СОЛИ ГОЛЬМИЯ И ГАДОЛИНИЯ С ГЕТЕРОПОЛИАНИОНОМ СТРУКТУРЫ АНДЕРСОНА <i><u>Гумерова Н.И.</u>, Пилипенко А.О., Розанцев Г.М., Радио С.В.</i>	9
СИНТЕЗ И ИК СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОНОМЕРНОГО КОМПЛЕКСА $\text{W(VI)}$ С ТЕНОИЛТРИФТОРАЦЕТОНОМ <i><u>Еманова О.С.</u>, Федирко С.О., Жарский Н.И., Абраменко В.Л.</i>	10
СИНТЕЗ $\text{Ln(III)}$ -СОДЕРЖАЩИХ ( $\text{Ln} = \text{Ce}, \text{Pr}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Er}$ ) ПОЛИОКСОВОЛЬФРАМАТОВ <i>Каплюк Т.А., <u>Иванцова Э.С.</u>, Стельмашук О.К., Радио С.В.</i>	11
СИНТЕЗ ТА МІКРОСТРУКТУРА ВАНАДАТУ СВИНЦЮ-НАТРІЮ <i><u>Каракай Л.</u>, Яблочкова Н.В., Гавва М.М.</i>	12
ГИДРОТЕРМАЛЬНЫЙ СИНТЕЗ ЦЕОЛИТА ТИПА ЛОМОНТИТА В ПРИРОДНОЙ СИСТЕМЕ ГАЛЛУАЗИТ-ДОЛОМИТ-ОБСИДИАН <i><u>Мамедова Г.А.</u></i>	13
СЕЛЕН В ЖИВОМ ВЕЩЕСТВЕ <i><u>Оникова Ю.Г.</u>, Григорьева А.А.</i>	14
ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КОМПЛЕКСНОЙ ПЕРЕРАБОТКИ И УТИЛИЗАЦИИ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ КОНЦЕНТРИРОВАННОЙ НИТРАТНОЙ КИСЛОТЫ <i><u>Пономарев В.А.</u>, Гринь Г.И.</i>	15

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ЖИДКИХ И СУСПЕНЗИОННЫХ УДОБРЕНИЙ <i>Привалова Г.С., Савенков А.С., Белогур И.С.</i>	16
СИНТЕЗ, КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ СОСТАВА $Pb_{8-x}Na_2Nd_x(VO_4)_6O_{x/2}$ <i>Саванкова Т.М., Игнатов А.В., Олексюк Е.В., Постоянкина В.А.</i>	17
СВИНЕЦ В ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЕ <i>Сибилева С.Ю., Григорьева А.А.</i>	18
СЕЗОННА ДИНАМІКА КОНЦЕНТРАЦІЇ АЗОТОВМІСНИХ СПОЛУК У СТІЧНИХ ВОДАХ <i>Дорошенко Т.Ф., Сокуренько К.А.</i>	19
ДИСПЕРСНО-АРМИРОВАННЫЕ БЕТОНЫ НИЗКИХ КЛАССОВ <i>Тимченко Я.О., Мартыненко Т.В., Саламаха Л.В., Деревянко В.Н.</i>	20
СОСТОЯНИЕ ИЗОПОЛИВОЛЬФРАМАТ-АНИОНОВ В ВОДНО- ДИМЕТИЛФОРМАМИДНОЙ СРЕДЕ <i>Пойманова О.Ю., Розанцев Г.М., Хаустов Д.В.</i>	21
ИССЛЕДОВАНИЕ САМОРАСПРОСТРАНЯЮЩЕГОСЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СИСТЕМЕ $Fe_2(SO_4)_3-CoSO_4-NaO_2$ <i>Цапко А.А.</i>	22
ВИВЧЕННЯ СТАНУ АНІОНІВ В ВАНАДОМОЛІБДАТНІЙ СИСТЕМІ $VO_4^{3-}-MoO_4^{2-}-H^+-H_2O$ ПРИ $V:Mo=3:3$ З $C=0,02$ M <i>Сазонова О.І., Чернишова В.В., Соловйова Н.В.</i>	23
КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА СПОЛУКИ $Y_3CuSnSe_7$ <i>Шемет В.Я., Артюхова Т.Ф., Вербицька Н.О.</i>	24
<b>Аналітичні методи в хімії</b>	
DETERMINATION OF NITROGEN-CONTAINING COMPOUNDS IN THE WATER <i>Dyuzheva A.I., Zhuk L.P., Chmilenko F.A.</i>	25
ELECTRODE-ACTIVE PROPERTIES OF TRIPLE METAL-POLYMERIC COMPLEX WITH MOLYBDENUM (VI) <i>Vatichuk O.V., Chmilenko T.S., Matorina K.V., Chmilenko F.A.</i>	26
ПІДВИЩЕННЯ ЕКСПРЕСНОСТІ ТА СЕЛЕКТИВНОСТІ ВИЗНАЧЕННЯ РТУТІ В НАФТОПРОДУКТАХ <i>Андрєєва А.М., Куражнов Є. С., Рокун А.М.</i>	27
РОЗРОБКА ФОТОМЕТРИЧНОЇ МЕТОДИКИ ВИЗНАЧЕННЯ СОРБИТУ (ХАРЧОВА ДОБАВКА Е-420) В ХАРЧОВІЙ ПРОДУКЦІЇ <i>Бабалик Ю.В., Пашинова О.В., Ткач В.І.</i>	28

ВИЗНАЧЕННЯ КАДМІЮ В ТОНКИХ ПЛІВКАХ CdSe ІНВЕРСІЙНО-ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧНИМ МЕТОДОМ <i>Гумінілович Р.Р., Шаповал П.Й., Ятчишин Й.Й.</i>	29
ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ОКЛЕЙКИ ВИНОГРАДНЫХ ВИН МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ ИМПЕДАНСА <i>Дедикова Т.А., Першина Е.Д., Толстенко Д.П.</i>	30
МОДИФІКОВАНІ МЕМБРАНИ З МОЛЕКУЛЯРНО-ІМПРИНТОВАНИМ ПОЛІМЕРОМ ДЛЯ ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНОГО СЕНСОРА <i>Гуртова О.В., Жижов В.М., Чмиленко Ф.О.</i>	31
ПВХ-СЕНСОР ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ 2,4-ДИХЛОРФЕНОКСИОЦТОВОЇ КИСЛОТИ З МЕТИЛОВИМ ФІОЛЕТОВИМ <i>Журба К.С., Кормош Ж.О.</i>	32
ХІМІКО-АНАЛІТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ АСОЦІАТІВ ПОЛІГУАНІДИНІВ З ТРИОКСИФЛУОРОНАМИ В ЕТАНОЛЬНИХ РОЗЧИНАХ <i>Іваниця Л.О., Заруба С.В., Чмиленко Т.С., Чмиленко Ф.О.</i>	33
СЕЛЕКТИВНІСТЬ ДИФЕНІЛ- ТА N,N,N-ТРИФЕНІЛГУАНІДИНІЙ ЧУТЛИВИХ СЕНСОРІВ <i>Зубеня Н.В., Кормош Ж.О.</i>	34
СОРБЦІЯ ЛАНТАНА (III) НЕКОТОРЫМИ ПОЛИСАХАРИДАМИ <i>Кефилева З.Р., Кацева Г.Н.</i>	35
КИНЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМИЗАЦИИ ИЗ ТВЕРДЫХ ПРОБ В АТОМИЗАТОРЕ «ПЕЧЬ-ПЛАМЯ» С ОДНОВРЕМЕННЫМ РАССМОТРЕНИЕМ ОБРАЗОВАНИЯ СВОБОДНЫХ АТОМОВ И ИХ ДИФУЗИОННОГО ВЫНОСА <i>Коротина Д.С., Луговой К.С., Алемасова А.С.</i>	36
ВИЗНАЧЕННЯ ГЕКСАКАРБОНІЛУ МОЛІБДЕНУ В БЕНЗИНІ <i>Коротун М.С., Рокун А.М.</i>	37
АНАЛІТИЧНИЙ КОНТРОЛЬ ПРОЦЕСУ ОДЕРЖАННЯ 2-ГІДРОКСИЕТИЛ-1,3,4-ТРИМЕТИЛЦИКЛОГЕКС-3-ЕН-КАРБОКСИЛАТУ <i>Костів І.С., Маршалок О.І., Полюжин І.П., Пиріг І.Ю.</i>	38
ОЦЕНКА ВАРИАБЕЛЬНОСТИ ОТНОСИТЕЛЬНЫХ ВРЕМЕН УДЕРЖИВАНИЯ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ РАЗЛИЧНЫХ ХРОМАТОГРАФИЧЕСКИХ КОЛОНК C18 <i>Кудрис И.В., Куликов А.Ю.</i>	39
ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА ВИНОГРАДНОЙ ВЫЖИМКИ ДЛЯ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В ПИЩЕВОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ <i>Кудусова С.С., Брановицкая Т.Ю.</i>	40
ЭКСТРАКЦИЯ РАЗНОЗАРЯДНЫХ ТИОЦИАНАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ ВИСМУТА (III) ВОДОРАСТВОРИМЫМИ И ДРУГИМИ ЭКСТРАГЕНТАМИ И СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОЕ ЕГО ОПРЕДЕЛЕНИЕ В РАСТВОРАХ <i>Мусаева М.В., Лобенко С.А., Симонова Т.Н.</i>	41

ВСТАНОВЛЕННЯ СКЛАДУ ІОННИХ АСОЦІАТИВ МЕЛОКСИКАМУ, ЛОРНОКСИКАМУ ТА МЕФЕНАМІНОВОЇ КИСЛОТИ З АСТРАФЛОКСИНОМ <i>Матвійчук О.Ю.</i>	42
МЕТАЛЛОПОЛИМЕРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ ГЕРМАНИЯ(IV) И МОЛИБДЕНА(VI) С КРАСИТЕЛЯМИ КСАНТЕНОВОГО РЯДА В АНАЛИЗЕ <i>Мех Ю.В., Чмиленко Т.С., Иваница Л.А., Чмиленко Ф.А.</i>	43
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СЕЛЕНИТА НАТРИЯ С L-ЦИСТЕИНОМ <i>Оманова А.А., Панова Э.П.</i>	44
ДОСЛІДЖЕННЯ ДИБУТИЛФТАЛАТУ У ВИНАХ І ВІНОМАТЕРІАЛАХ МЕТОДОМ ГАЗОВОЇ ХРОМАТОГРАФІЇ <i>Жилякова Т.П., Арістова Н.І., Панов Д.О., Виноградов Б.О.</i>	45
КОНТРОЛЬ ВМІСТУ ФУРФУРОЛУ ТА ОКСИМЕТИЛФУРФУРОЛУ В МЕДІ <i>Приходько Я.О., Сидорова Л.П., Чмиленко Ф.О.</i>	46
СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВАНАДИЯ(V) И СЕЛЕНА(VI) В ПИЩЕВЫХ ПРОДУКТАХ И ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТАХ <i>Чеботарев А.Н., Рабошвиль Е.В., Ефимова И.С.</i>	47
МЕТОД ХІМІЧНОЇ КОЛЬОРОМЕТРІЇ ПРИ ДОСЛІДЖЕННІ КИСЛОТНО- ОСНОВНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПЕЛАРГОНІДИНУ <i>Снігур Д.В., Чеботарьов О.М., Єфімова І.С.</i>	48
ОБРАЗОВАНИЕ СВОБОДНЫХ АТОМОВ АЛЮМИНИЯ В ГРАФИТОВЫХ ПЕЧАХ ПРИ ЭЛЕКТРОТЕРМИЧЕСКОЙ АТОМИЗАЦИИ <i>Сошникова А.Ю., Алемасова А.С., Понамаренко О.А.</i>	49
ТЕСТ-СИСТЕМИ НА ОСНОВІ ПІНОПОЛІУРЕТАНУ З ІММОБІЛІЗОВАНИМИ ПОХІДНИМИ ДИМЕРКАПТОТІОПІРОНУ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ПАЛАДІУ <i>Тітова А.О., Худякова С.М., Чмиленко Ф.О.</i>	50
ПОКАЗАТЕЛИ КАЧЕСТВА ПОДЗЕМНЫХ ВОД г. ЧАСОВ-ЯРА И ПРИЛЕЖАЩИХ ТЕРРИТОРИЙ <i>Тютерева Т. Н., Касянчук М. Г.</i>	51
УСОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ МЕТОДИКИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПИЩЕВЫХ СИНТЕТИЧЕСКИХ КРАСИТЕЛЕЙ МЕТОДОМ ТОНКОСЛОЙНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ <i>Чопенко А.Г., Алемасова Н.В.</i>	52
РОЗРАХУНКИ КРИВИХ ОСАДЖУВАЛЬНОГО ТИТРУВАННЯ СУМШЕЙ З ВРАХУВАННЯМ КОМПЛЕКСООУТВОРЕННЯ <i>Стецик В. В., Цибулько В. А., Чуйкова В. В.</i>	53
ИССЛЕДОВАНИЕ АДСОРБЦИИ ИОНОВ ЖЕЛЕЗА(III) МОДИФИЦИРОВАННЫМИ ПРИРОДНЫМИ СОРБЕНТАМИ <i>Щербин Э.А., Крымова В.В.</i>	54

## Кінетика та каталіз

- КІНЕТИКА АЦЕТОЛІЗУ ЕПІХЛОГІДРИНУ В ПРИСУТНОСТІ СТЕРИЧНО ЗАТРУДНЕНИХ ТРЕТИННИХ АМІНІВ  
*Арендаренко С.С., Беспалько Ю.М., Швед О.М.* 55
- ИНГИБИРУЮЩЕЕ ДЕЙСТВИЕ ПИРИМИДИЛГИДРАЗОНОВ ПРИ ОКИСЛЕНИИ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ  
*Артемова О.А., Хижан Е.И., Тихонова Г.А., Хижан А.И.* 56
- КАТАЛИЗ РАСПАДА ПЕРОКСИДА ВОДОРОДА ЙОДИДОМ АЦЕТИЛХОЛИНА  
*Букрей А.О., Берестнева Ю.В., Ракша Е.В., Туровский Н.А.* 57
- АНТИОКСИДАНТНОЕ ДЕЙСТВИЕ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРИДИЛГИДРАЗОНОВ АРОМАТИЧЕСКИХ АЛЬДЕГИДОВ  
*Виноградов В.В., Хижан О.И., Николаевский А.Н.* 58
- ЗАРОЖДЕНИЕ РАДИКАЛОВ ПРИ АВТООКИСЛЕНИИ ГИДРОХИНОНА В СИЛЬНОЩЕЛОЧНОЙ СРЕДЕ  
*Гуков В.С., Одарюк И.Д., Шендрик А.Н.* 59
- РЕАКЦІЙНА ЗДАТНІСТЬ ОРТО-ЗАМІЩЕНИХ БЕНЗОЙНИХ КИСЛОТ У РЕАКЦІЇ З ЕПІХЛОРГІДРИНОМ У ПРИСУТНОСТІ НИЗЬКООСНОВНИХ АМІНІВ  
*Зінченко П. В., Сінельникова М. А., Швед О. М.* 60
- ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОРЯДКА ПО АЛЬДЕГИДНОМУ КОМПОНЕНТУ В РЕАКЦИИ ОКСИДАТИВНОЙ ЦИКЛИЗАЦИИ СУБСТРАТОВ ПИКТЕ-ШПЕНГЛЕРА  
*Клягина А.А., Сердюк А.А., Касянчук М.Г., Опейда И.А.* 61
- КІНЕТИЧНІ АСПЕКТИ РЕАКЦІЇ ЕПІХЛОРГІДРИНУ З ФЕНОЛАМИ ТА БІСФЕНОЛАМИ В ПРИСУТНОСТІ ОРГАНІЧНИХ ОСНОВ  
*Кобеляцька А.С., Швед О.М.* 62
- КИНЕТИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ ОКИСЛЕНИЯ ФОСФАТИДИЛХОЛИНА В ГЕТЕРОГЕННЫХ СИСТЕМАХ  
*Кузьминых О.А.* 63
- КАТАЛИЗ N-ГИДРОКСИФТАЛИМИДОМ РЕАКЦИЙ ОКИСЛЕНИЯ АЛКИЛАРЕНОВ  
*Литвинов Ю.Е., Куц О.В., Опейда И.А.* 64
- ИНГИБИРУЮЩЕЕ ДЕЙСТВИЕ ХИНОЛИЛГИДРАЗОНОВ В ПРОЦЕССАХ ОКИСЛЕНИЯ ЭТИЛБЕНЗОЛА  
*Маслова В.Ю.* 65
- СРАВНЕНИЕ СУБСТРАТНОЙ СЕЛЕКТИВНОСТИ В РЕАКЦИЯХ ЭЛЕКТРОФИЛОВ С НАСЫЩЕННЫМИ УГЛЕВОДОРОДАМИ В СЕРНОКИСЛОТНЫХ РАСТВОРАХ  
*Мерзликina М.А., Волкова Л.К., Рудаков Е.С.* 66

- ПОЛЯРОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИИ ВОССТАНОВЛЕНИЯ КИСЛОРОДА ДО ПЕРОКСИДА ВОДОРОДА В ПРИСУТСТВИИ ФЕНОЛЬНЫХ КИСЛОТ 67  
*Мусяенко Е.В.,* Белый А.В., Белая Н.И.
- ТЕТРАЭТИЛАМОНІЙ БРОМІД ЯК КАТАЛІЗАТОР РЕАКЦІЇ ЕПІХЛОРГІДРИНУ З 4-NO<sub>2</sub>-ФЕНОЛОМ 68  
*Підгора М.К.,* Малиш О.В., Швед О.М.
- ВПЛИВ ТЕМПЕРАТУРИ ТА СТРУКТУРИ АРОМАТИЧНИХ КИСЛОТНИХ РЕАГЕНТІВ НА РЕАКЦІЇ НУКЛЕОФІЛЬНОГО РОЗКРИТТЯ ОКСИРАНОВОГО ЦИКЛУ В ПРИСУТНОСТІ ОСНОВ 69  
*Рожко Є.Р.,* Синельникова М.А., Беспалько Ю.М., Швед О.М.
- ОПРЕДЕЛЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ОКИСЛЕНИЯ ЗАМЕЩЕННЫХ ГИДРОКИНОНОВ ЛАККАЗОЙ *TRAMETES VERSICOLOR* 70  
*Рудковская Ю.С.,* Цяпало А. С., Каниболоцкая Л. В., Шендрик А. Н.
- ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОСВЯЗИ СТРУКТУРА – РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ В РЯДУ ФЛАВОНОЛОВ 71  
*Симонова Е.Н.,* Белая Н.И., Белый А.В., Мирошниченко И.В.
- ТРИБЕНЗИЛАМІН ЯК КАТАЛІЗАТОР РЕАКЦІЇ ЕПІХЛОРГІДРИНУ З БЕНЗОЙНОЮ КИСЛОТОЮ 72  
*Слотіна Ю.О.,* Сінельникова М.А., Швед О.М.
- ВИВЧЕННЯ КАТАЛІТИЧНОЇ ДІЇ БЕНЗОАТІВ ТЕТРААЛКІЛАМОНІО НА АЦИДОЛІЗ ЕПІХЛОРГІДРИНУ БЕНЗОЙНИМИ КИСЛОТАМИ 73  
*Степанова Д.С.,* Сінельникова М.А., Швед О.М.
- ВЛИЯНИЕ ДОБАВОК ПРИРОДНОГО СЫРЬЯ НА ОКИСЛЕНИЕ РАСТИТЕЛЬНЫХ МАСЕЛ 74  
*Сторчак Д.А.,* Книга О.П., Николаевский А.Н.
- ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛОВ ПОЛУВОЛН БРОМЗАМЕЩЕННЫХ ГИДРОКИНОНОВ МЕТОДОМ ЦИКЛИЧЕСКОЙ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИИ 75  
*Цяпало А.С.,* Калиниченко Е.А., Каниболоцкая Л.В., Шендрик А.Н.
- КИНЕТИКА РЕАКЦІЇ ЕПОКСИДНОЇ СМОЛИ ЕД-20 З БЕНЗОЙНОЮ КИСЛОТОЮ В ПРИСУТНОСТІ БРОМІДУ ТЕТРАЭТИЛАМОНІО 76  
*Чичирко М. А.,* Сінельникова М. А., Швед О.М.
- ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОНСТАНТ СКОРОСТЕЙ РЕАКЦИИ ТРИГИДРОКСИБЕНЗОЙНЫХ КИСЛОТ С DPHN' В ВОДЕ С ПРИМЕНЕНИЕМ МОДЕЛИ ЛИНЕЙНОЙ РЕГРЕССИИ 77  
*Шацких В.М.,* Белая Н.И., Белый А.В.
- СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ АНТИРАДИКАЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ ГИДРОКСИПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗОЙНОЙ И КОРИЧНОЙ КИСЛОТ 78  
*Яшуніна Ю.О.,* Белая Н.И., Белый А.В.

## Моделювання в хімії

- FIRST PRINCIPLES CALCULATIONS OF VOIDS IN FE (BCC)  
*Dmytro Kandaskalov*, Claude Mijoule, Damien Connétable 79
- <sup>1</sup>H ЯМР ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ В СИСТЕМЕ  
ГИДРОПЕРОКСИД ТРЕТ-БУТИЛА – БРОМИД ТЕТРАЭТИЛАММОНИЯ  
Берестнева Ю.В., *Дороднев С.В.*, Ракша Е.В., Туровский Н.А. 80
- КВАНТОВЕ МОДЕЛЮВАННЯ СОРБЦІЇ ЛЕТЮЧИХ ГІДРИДІВ НА  
АКТИВОВАНОМУ ВУГІЛЛІ  
*Коваль К.В.*, Безносик Ю.О. 81
- ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПРОИЗВОДНЫХ 3-ГИДРОКСИХРОМОНА С  
ДОДЕКАНТИОЛ-СТАБИЛИЗИРОВАННЫМИ НАНОЧАСТИЦАМИ ЗОЛОТА  
*Колодезний Д.Ю.*, Свечкарёв Д.А., Кириченко А.В., Дорошенко А.О. 82
- ГЕОЛОГІЧНА НА ГЕОТЕХНІЧНА СИСТЕМИ БАР'ЄРІВ ДЛЯ  
ПРИПОРХНЕВОГО СХОВИЩА РАВ  
*Колябіна Д.О.*, Безносик Ю.О. 83
- ЕЛЕКТРОСИНТЕЗ НАНОСТРУКТУРОВАНИХ КОМПОЗИЦІЙНИХ ПОКРИТТІВ  
НА ОСНОВІ МІДІ ТА НІКЕЛЮ  
*Овчаренко О.О.*, Гарнавська О.В. Сахненко М.Д. 84
- MP2-ИССЛЕДОВАНИЕ ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ  
2-ПИРИДИН-2-ИЛ-1Н-БЕНЗИМИДАЗОЛА  
*Рулёва К.В.*, Берестнева Ю.В., Ракша Е.В. 85
- КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РЕАКЦИИ ОКИСЛЕНИЯ  
ДИМЕТИЛСУЛЬФИДА ПЕРОКСОМЕТАСИЛИКАТ АНИОНОМ  
Дятленко Л.М., *Следнева А.С.*, Пастернак Е.Н., Лобачев В.Л. 86
- МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ПЕРЕОКИСНЕННЯ РОЗЧИННИХ ПРОВІДНИХ  
ПОЛІМЕРІВ У СИЛЬНОКИСЛОМУ СЕРЕДОВИЩІ  
*Ткач В.В.*, Нечипорук В.В., Ягодинець П.І., да Роша А.М. 87
- MP2/GIAO ТА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ХІМІЧНІ ЗСУВИ  
ЯДЕР <sup>1</sup>H И <sup>13</sup>C ГІДРОПЕРОКСИДУ ТРЕТ-БУТИЛУ  
*Шніц Т.В.*, Берестнева Ю.В., Ракша О.В., Туровський М.А. 88
- ПРИКЛАДНИЙ АНАЛІЗ ПАТЕНТНОЇ ІНФОРМАЦІЇ ПРО БІОЛОГІЧНІ  
ВЛАСТИВОСТІ НАБОРУ СПОЛУК ПІРАЗОЛО[3,4-С]ІЗОХІНОЛІНІВ  
Суйков С.Ю., *Яковлева Г.В.* 89

## Хімія органічних сполук

- SYNTHESIS OF NEW DERIVATIVES OF NICOTINIC ACID USING CHALCONES AND THEIR BEHAVIOUR IN PRESENTS OF ALKYLHALOGENIDES 90  
*Abdulsattar O.D., Saraeva T.A., Krasnikov D.A*
- ИЗУЧЕНИЕ РЕАКЦИИ  $\alpha$ -D-ГЛЮКОЗАМИНИЛХЛОРИДА С ПИРАЗОЛИН-5-ОНАМИ В УСЛОВИЯХ МЕЖФАЗНОГО КАТАЛИЗА 91  
*Абдурахманова Э.Р.*
- ВЛИЯНИЕ pH НА АНТИРАДИКАЛЬНУЮ АКТИВНОСТЬ ФЕНОЛКАРБОНОВЫХ КИСЛОТ В РЕАКЦИИ С АВТС<sup>++</sup> 92  
*Виноградова Н.А., Лебедкова О.С., Каниболоцкая Л.В., Шендрик А.Н.*
- СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРИМИДИНА НА ОСНОВЕ ДИМЕТИЛОВОГО ЭФИРА АЦЕТОНИКАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ В УСЛОВИЯХ РЕАКЦИИ БИДЖИНЕЛЛИ 93  
*Гелеверя А.А., Николаев А.С., Богза С.Л.*
- РОДАНИРОВАНИЕ N-АРИЛАМИНОКАРБОНИЛ-1,4-БЕНЗОХИНОН-МОНОИМИНОВ 94  
*Коновалова С.А., Авдеенко А.П., Гончарова С.А.*
- ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СУЛЬФОЛАНСОДЕРЖАЩИХ АМИНОСПИРТОВ С С-ЭЛЕКТРОФИЛАМИ 95  
*Заровная И.С., Садкова И.В., Кришень Д.А., Пальчиков В.А.*
- СИНТЕЗ ПОХІДНИХ ПІРАНО[3,4-С]ПІРАЗОЛУ ТА ПІРАЗОЛО[3,4-Д][1,2]ДІАЗЕПІНУ 96  
*Ніколаєв О.С., Хижан О.І., Богза С.Л.*
- СИНТЕЗ И РЕАКЦИИ ЗАМЕЩЕННЫХ 1-АРИЛ-3-(1-R-ГИДРАЗИН-2-ИЛ)ПИРРОЛИДИН-2,5-ДИОНОВ 97  
*Орлов М.А.*
- 8-АЛКИЛ-7-АЦЕТИЛ-3-ТЮКСО-2,3,5,6,7,8-ГЕКСАГИДРОИЗОХИНОЛИН-4-КАРБОНІТРИЛИ НА ОСНОВІ ДІАЦЕТИЛ- $\beta$ -ЦИКЛОКЕТОЛІВ 98  
*Піпа О.Г., Павшенко Л.Г., Карпов Є.М., Дяченко В.Д.*
- КРОСС-РЕЦИКЛИЗАЦИЯ 4-АЛКИЛ(АРИЛ)-2,6-ДИАМИНО-3,5-ДИЦИАНО-4Н-ТИОПИРАНОВ С АЦЕТИЛАЦЕТАНИЛИДОМ 99  
*Рыльская Т. А., Дяченко В. Д.*
- КАТАЛІЗ КАРБЕНОВИМИ КОМПЛЕКСАМИ МІДІ(I) РЕАКЦІЇ Х'ЮСГЕНА–МЕЛЬДАЛЯ–ШАРПЛЕСА 100  
*Сабєров В.Ш., Кисельов А.В., Марічев К.О., Глиняна Н.В., Кнішевицький А.В.*
- СИНТЕЗ ЗАМЕЩЕННЫХ 4-N-АЛКИЛТЕТРАГИДРОПИРАЗОЛО-ИЗОХИНОЛИНОВ НА ОСНОВЕ 2,4-ДИАЦЕТИЛ-5-ГИДРОКСИ-5-МЕТИЛ-3-R<sup>1</sup>-ЦИКЛОГЕКСАНОНОВ 101  
*Сукач С.М., Дяченко В.Д.*

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ КИСЛОТНОСТИ СРЕДЫ НА СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РАСТВОРОВ 1,3-ДИМЕТИЛ-2-(ОКСИМИНОМЕТИЛ)-ИМИДАЗОЛИЙ ЙОДИДА И 4-НИТРОФЕНОЛА Капитанов И.В., <u>Тучинская К.К.</u>	102
ДОМИНО-РЕАКЦИЯ НА ПРИМЕРЕ 4-МЕТИЛ-1,5-ДИАЗАСПИРО[5.5]-УНДЕЦ-3-ЕН-2-ОНА Марков В.И., <u>Фарат О.К.</u> , Великая Е.В., Варениченко С.А.	103
4-АЛКИЛ-3,5-ДИКАРБОМОИЛПИРИДИН-2(1H)-ТИОНЫ: СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА <u>Феськов И.А.</u> , Карпов Е.Н., Дяченко В.Д.	104
ПОВЕДЕНИЕ 6-АМИНО-4-АРИЛ-2-ОКСО-1,2-ДИГИДРОПИРИДИН-3,5-ДИКАРБОНИТРИЛОВ В УСЛОВИЯХ РЕАКЦИИ МАННИХА <u>Хрусталева А.Н.</u> , Фролов К.А., Доценко В.В., Кривоколыско С.Г.	105
3-ПИРИДИНБОРОНОВАЯ КИСЛОТА КАК СТРОИТЕЛЬНЫЙ БЛОК ДЛЯ СОЗДАНИЯ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР <u>Широкогорова Ю.А.</u> , Савсуненко О.О., Карпичев Е.А.	106
СИНТЕЗ N,N'-ДИФЕНИЛАМИНОКАРБОНИЛ-1,4-БЕНЗОХИНОНДИИМИНОВ Коновалова С.А., Авдеенко А.П., <u>Юсина А.Л.</u>	107

### Хімічна технологія

AEROSOL TECHNOLOGY: "CRACKLING" COMPOSITIONS DEVELOPMENT <u>Bilanov D.V.</u> , Malysh A.V., Shersheniuk I.A.	108
СУЧАСНИЙ СТАН ТА ПЕРСПЕКТИВИ РОЗВИТКУ ЦИРКОНІЄВОЇ ПРОМИСЛОВОСТІ В УКРАЇНІ ТА СВІТІ <u>Алексєєнко Г.В.</u> , Хлопицький О.О., Макарченко Н.П.	109
ВЛИЯНИЕ КИСЛОТНОСТИ СРЕДЫ НА ПОЛНОТУ ОКИСЛЕНИЯ ФОРМАЛЬДЕГИДА КИСЛОРОДОМ ВОЗДУХА В ВОДНОМ РАСТВОРЕ <u>Альами Д.А.М.</u> , Булавин В. И.	110
ПОЛУЧЕНИЕ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ТИТАН (IV) ОКСИДА <u>Быканова В.В.</u> , Сахненко Н.Д., Герасимова В.В.	111
БИОДИЗЕЛЬНОЕ ТОПЛИВО ИЗ КУРИННОГО ЖИРА <u>Везель С.В.</u> , Дубинин А.Ю., Елизарьева Ю.А.	112
ДОСЛІДЖЕННЯ УМОВ НАДАННЯ ШЛАМУ З ВИРОБНИЦТВА КАЛЬЦІЄВОЇ СЕЛІТРИ ВЛАСТИВОСТЕЙ МІНЕРАЛЬНОГО ДОБРИВА <u>Власян С.В.</u> , Біда О.О., Герасименко Л.В., Шестозуб А.Б., Волошин М.Д.	113

РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ РЕДИСПЕРСИОННЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ПОРОШКОВ - ДОБАВОК НА СВОЙСТВА ГИПСОВЫХ ВЯЖУЩИХ <i>Деревянко В.Н., Дрозд А.П., Шаповалова О.В., <u>Гопайца В.А.</u></i>	114
БІЛИЙ ЦЕМЕНТ НА ОСНОВІ ЗБАГАЧЕНОЇ СИРОВИНИ УКРАЇНИ <i><u>Дорогань Н. О.</u>, Черняк Л.П.</i>	115
О МЕТОДАХ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ОГНЕУПОРОВ <i><u>Дуникова Е. А.</u>, Питак Я. Н.</i>	116
ОРГАНІЗАЦІЯ ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО РЕЦИКЛІНГУ ПСЕВДОСПЛАВІВ ВОЛЬФРАМУ <i><u>Єрмоленко І.Ю.</u>, Андрощук Д.С.</i>	117
ОДЕРЖАННЯ ОРГАНО – МІНЕРАЛЬНОГО ДОБРИВА З ОСАДІВ СТІЧНИХ ВОД ТА ВЕРХНЬОГО ШАРУ ЛІСОВОГО ҐРУНТУ <i><u>Клименко І.В.</u>, Волошин М.Д., Іванченко А.В.</i>	118
ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕКТРОЛИЗА НА СОСТАВ ТРОЙНЫХ СПЛАВОВ <i><u>Козяр М. А.</u>, Гапон Ю. К., Глушкова М. А., Ведь М. В., Зюбанова С. И., Каракуркчи А. В.</i>	119
ОЦЕНКА КАЧЕСТВА ПОЛИМЕРНОГО КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА ШАХТНЫХ КОНВЕЙЕРНЫХ ЛЕНТ ПО ПОКАЗАТЕЛЯМ ПОЖАРООПАСНОСТИ <i><u>Колосова М.А.</u>, Пастернак Е.Н., Бондаренко А.В.</i>	120
БІОАКТИВНІ КАРБОНАТВМІЩУЮЧІ КАЛЬЦІЙСИЛІКОФОСФАТНІ СКЛОКРИСТАЛІЧНІ МАТЕРІАЛИ <i><u>Коник О.М.</u>, Щадріна Г.М., Саввова О.В.</i>	121
МІНЕРАЛЬНІ В'ЯЖУЧІ МАТЕРІАЛИ ІЗ ЗОЛОЮ-ВИНОСУ <i><u>Круш Є.А.</u>, Носанчук Т.П., Черняк Л.П.</i>	122
ВПЛИВ ОБРОБКИ ВИСОКИМ ТИСКОМ НА СТІЙКІСТЬ ВЕРШКОВОГО МАСЛА В ПРОЦЕСІ ЗБЕРІГАННЯ <i><u>Кухарчук Т.П.</u>, Жильцова С.В., Сукманов В.О.</i>	123
ГАЛЬВАНИЧЕСКИЙ ЭЛЕМЕНТ С АЛЮМИНИЕВЫМ АНОДОМ, СОЛЕВЫМ КАТОДОМ И МЕТАНОЛЬНЫМ РАСТВОРОМ СОЛЕВОГО ЭЛЕКТРОЛИТА <i><u>Линник Д.С.</u></i>	124
ДИСПЕРГУВАННЯ КОМПОЗИТНИХ РОЗЧИНІВ У ПРОЦЕСІ ГРАНУЛОУТВОРЕННЯ <i><u>Михальчук О.Д.</u>, Корнієнко Я.М.</i>	125
ДОСЛІДЖЕННЯ ВЗАЄМОДІЇ КОМПОНЕНТІВ СУМІШІ ДЛЯ ВІДНОВЛЕННЯ КЛАДКИ КАМЕРИ КОКСУВАННЯ <i><u>Пашенко Ю.Є.</u>, Пітак Я.М., Горбатко С.В.</i>	126
ДОСЛІДЖЕННЯ СКЛАДУ РІДКИХ ПРОДУКТІВ ПІРОЛІЗУ БУРОГО ВУГІЛЛЯ <i><u>Попов О.А.</u>, Гуртова О.М, Суйков С.Ю., Білий О.В.</i>	127

ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСУ КОНВЕРСІЇ ФОСФОГІПСУ КАРБОНАТОМ НАТРІЮ ДЛЯ ОДЕРЖАННЯ РЗЕ І СТРОНЦІЮ <i>Семяник С.В., Власян С.В., Волошин М.Д.</i>	128
ІНГІБУВАННЯ ФЕРМЕНТАТИВНОЇ АКТИВНОСТІ БІЛКІВ ПАТОГЕННИХ МІКРООРГАНІЗМІВ ІОНАМИ ВАЖКИХ МЕТАЛІВ <i>Фесенко О.І., Саввова О.В.</i>	129
ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСУ ОДЕРЖАННЯ БІОГАЗУ З ОСАДІВ СТІЧНИХ ВОД <i>Хабера К.В., Іванченко А.В.</i>	130
ИНГИБИРОВАНИЕ КОРРОЗИИ МАЛОУГЛЕРОДИСТОЙ СТАЛИ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИМИ ПРЕПАРАТАМИ <i>Хоменко А.О., Бондарь Е.С.</i>	131
МОДИФІКУВАННЯ ПОКРИТТІВ ДОСТУПНИМИ ВУГЛЕЦЕВИМИ НАНОСТРУКТУРНИМИ ОБ'ЄКТАМИ ДЛЯ ПІДВИЩЕННЯ ЇХ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ <i>Шепеленко О.С., Сахненко М.Д., Зеленський О.І., Шмалько В.М., Якуба К.В.</i>	132

### **Хімія ВМС та матеріали**

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ЭПОКСИДНО-СИЛОКСАНОВЫХ КОМПОЗИТОВ АМИННОГО ОТВЕРЖДЕНИЯ <i>Ананьева Д.Ю., Гуртовой Д.В., Михальчук В.М.</i>	133
ВЛИЯНИЕ СОСТАВА МОНОМЕРНОЙ СМЕСИ НА КИНЕТИКУ СОПОЛИМЕРИЗАЦИИ ВИНИЛАЦЕТАТА С АКРИЛОВОЙ КИСЛОТОЙ <i>Батиц С.М., Мельниченко В.И.</i>	134
ВИВЧЕННЯ ОСОБЛИВОСТЕЙ ПРОВІДНОСТІ ПОЛІМЕРНИХ ЕЛЕКТРОЛІТІВ НА ОСНОВІ ПОЛІЕТЕРІВ <i>Лисенков Е., Голованець В., Кобилянська Т., Семенів Д.</i>	135
ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ СТРУКТУРИРОВАНИЯ ЭПОКСИДНЫХ ОЛИГОМЕРОВ В ПРИСУТСТВИИ РАЗЛИЧНЫХ ПЛАСТИФИЦИРУЮЩИХ ДОБАВОК <i>Гриб М.П., Попова Н.Г., Черкашина А.Н.</i>	136
ПРИМЕНЕНИЕ ГЛИЦЕРИНОВЫХ ЭФИРОВ 1,1,7 –ТРИГИДРОДОДЕКАФТОРПЕНТИЛОВОГО СПИРТА В ПОЛИУРЕТАНОБРАЗУЮЩИХ ОЛИГОМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИЯХ <i>Гурина С.Ю., Титова Е.Н., Сазанов Л.А.</i>	137
ИССЛЕДОВАНИЕ РЕОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕРНЫХ И ОРГАНИЧЕСКИХ ОТХОДОВ <i>Карев А.И., Чавров С.А., Лебедев В.В.</i>	138

- КІНЕТИЧНІ ЗАКОНОМІРНОСТІ (КО)ПОЛІМЕРИЗАЦІЇ МЕТИЛАКРИЛАТУ З  
ДЕЦИЛМЕТ- ТА ДЕЦИЛАКРИЛАТОМ В ЕМУЛЬСІЇ 139  
*Коваленко Т.П., Сердюк В.О.*
- ЙОННІ РІДИНИ НА ОСНОВІ ДИЧЕТВЕРТИННИХ АМОНІЄВИХ СОЛЕЙ  
(ПОХІДНІ МОРФОЛІНУ) ЯК КОМПОНЕНТИ РІДКИХ ПОЛІМЕРНИХ  
ЕЛЕКТРОЛІТІВ ДЛЯ ЕЛЕКТРОХІМІЧНИХ ПРИСТРОЇВ 140  
Свердліковська О.С., Бурмістр М.В., *Коваль К.Ю.*
- ЕЛЕКТРОХІМІЧНА АКТИВНІСТЬ КОМПОЗИТУ ПОЛІАНІЛІН-СРІБЛО  
ОТРИМАНОВОГО ЕМУЛЬСІЙНОЮ ПОЛІМЕРИЗАЦІЄЮ 141  
*Корень Я.М.*
- ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ ЭПОКСИДНО-КРЕМНЕЗЕМНЫХ КОМПОЗИТОВ  
АМИННОГО ОТВЕРЖДЕНИЯ 142  
*Кучер Я.Ю., Лыга Р.И., Гуртовой Д.В., Михальчук В.М.*
- ВПЛИВ ПОЛІМЕРНОГО МОДИФІКАТОРА НА ВИВІЛЬНЕННЯ  
ДИЕСТЕРФТАЛАТНИХ ПЛАСТИФІКАТОРІВ З ПОЛІВІНІЛХЛОРИДНИХ  
ПЛАСТИКАТІВ 143  
*Ларук Ю.В., Кобзар Т.М., Левицький В.Є.*
- ОСОБЛИВОСТІ ЕЛЕКТРИЧНОЇ ТА ОПТИЧНОЇ ПЕРКОЛЯЦІЇ В СИСТЕМАХ НА  
ОСНОВІ ПОЛІПРОПІЛЕНГЛІКОЛЮ ТА ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБОК 144  
*Яковлев Ю.В., Лисенков Е.А., Клепко В.В.*
- СИНТЕЗ ПОЛІУРЕТАНСЕЧОВИН З ІММОБІЛІЗОВАНИМ  
ФОЛАТ-КОН'ЮГОВАНИМ ФЕРОЦЕНОМ 145  
*Макеєва Л.В., Гладир І.І., Демченко І.Б.*
- ЙОННІ РІДИНИ НА ОСНОВІ ЧЕТВЕРТИННИХ АМОНІЄВИХ СОЛЕЙ (ПОХІДНІ  
МОРФОЛІНУ) ЯК КОМПОНЕНТИ ПОЛІМЕРНИХ ЕЛЕКТРОЛІТІВ ДЛЯ  
ЕЛЕКТРОХІМІЧНИХ ПРИСТРОЇВ 146  
Свердліковська О.С., Бурмістр М.В., *Матійчук А.І.*
- ВПЛИВ НАНОНАПОВНЮВАЧА НА ТЕПЛОФІЗИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ  
ПОЛІМЕРНИХ КОМПОЗИТІВ НА ОСНОВІ ПОЛІЕТИЛЕНУ 147  
*Дінжос Р.В., Новак Л.І.*
- ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОСТАВА И СТРУКТУРЫ ВОЛОКОН, ВХОДЯЩИХ В СОСТАВ  
ИЗВЕСТКОВО-КРЕМНЕЗЕМИСТЫХ ТЕПЛОИЗОЛЯЦИОННЫХ ИЗДЕЛИЙ 148  
*Носова А.Н.*
- ФОТОКАТАЛІТИЧНА ДЕГРАДАЦІЯ МЕТИЛОРАНЖУ З ВИКОРИСТАННЯМ  
ДІОКСИДУ ТИТАНУ ТА РІЗНИХ ПОХІДНИХ  $\beta$ -ЦИКЛОДЕКСТРИНУ 149  
*Опанасенко О.А., Сінельніков С.І., Рябов С.В.*
- ТЕРМОСТАБІЛЬНІСТЬ ЕПОКИДНО-СИЛОКСАНОВИХ КОМПОЗИТІВ,  
ОТРИМАНИХ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ МЕТОДОМ 150  
*Павлій П.М., Жильцова С.В., Михальчук В.М.*

ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ МОДИФИЦИРОВАННОГО ВТОРИЧНОГО ПОЛИЭТИЛЕНА <i>Семиног В.В.</i>	151
ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЧНОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭТИЛЕНА И НАНОПОЛНИТЕЛЯ <i>Сивакова Е.А., Черкашина А.Н.</i>	152
ПОЛІМЕРНІ КОМПОЗИЦІЇ НА ОСНОВІ ВТОРИННОГО ПОЛІПРОПІЛЕНУ <i>Сівакова К.О., Зотова Т.Г., Черкашина А.Н.</i>	153
ПРИЩЕПЛЕНИЙ БЛОККОПОЛІМЕР НА ОСНОВІ ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНОГО КОПОЛІМЕРУ ЕТИЛЕНУ З ВІНІЛАЦЕТЕТОМ І РІДКОГО КАУЧУКУ <i>Сірик О.М., Мишак В.Д., Грищенко В.К., Лебедев Є.В.</i>	154
АНАЛІЗ МЕХАНІЗМІВ СТРУКТУРОУТВОРЕННЯ ТА ТЕПЛОФІЗИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛІМЕРНИХ НАНОКОМПОЗИТІВ НА ОСНОВІ ПОЛІМЕТИЛМЕТАКРИЛАТУ <i>Дінжос Р.В., Степанова А.О.</i>	155
ПІДВИЩЕННЯ ГЕРМЕТИЧНОСТІ СКЛОПЛАСТИКОВИХ ЕПОКСИДНИХ ТРУБ <i>Карандашов О.Г., Сулейманова К.В., Підгорна Л.П., Авраменко В.Л.</i>	156
ИЗУЧЕНИЕ ДЛИНЫ И СТРУКТУРЫ ЦЕПИ СОПОЛИМЕРОВ N-ВИНИЛПИРРОЛИДОНА, МАЛЕИНОВОГО АНГИДРИДА И / ИЛИ МЕТИЛМЕТАКРИЛАТА <i>Трохимчук Д.А., Тюрина Т.Г., Михальчук В.М.</i>	157
ВПЛИВ ЕМУЛЬГУВАННЯ НА ПЕРЕБІГ ЕМУЛЬСІЙНОЇ КООЛІГОМЕРИЗАЦІЇ СУМІШІ НЕНАСИЧЕНИХ ВУГЛЕВОДНІВ <i>Фуч У.В., Субтельний Р.О.</i>	158
СОРБЦІЙНІ ВЛАСТИВОСТІ ПРИЩЕПЛЕНИХ КОПОЛІМЕРІВ ПОЛІВІНІЛПРОЛІДОНУ <i>Хром'як У.В.</i>	159

## Біохімія

- АНТИРАДИКАЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ ВОДНЫХ ЭКСТРАКТОВ ЧАЯ В РЕАКЦИИ С КАТИОН-РАДИКАЛОМ 2,2' – АЗИНОБИС(3-ЭТИЛБЕНЗО-ТИАЗОЛИН-6-СУЛЬФОНОВОЙ КИСЛОТЫ) 160  
Беличь А.С., Лебедкова О.С., Каниболоцкая Л.В., Шендрик А.Н.
- ПРИМЕНЕНИЕ РЕОСОРБИЛАКТА ДЛЯ РЕГУЛИРОВАНИЯ АКТИВНОСТИ ИММОБИЛИЗОВАННОЙ ХЭ 161  
 Паентко В.В., Матрунчик Ю.В., Богданова Н.А.
- БИОТЕСТУВАННЯ ЯК ІНТЕГРАЛЬНИЙ ПОКАЗНИК ТОКСИЧНОГО ЗАБРУДНЕННЯ ВИРОБНИЧИХ СТІЧНИХ ВОД 162  
 Дорошенко Т.Ф., Вишневецька Я.Г.
- ОСОБЕННОСТИ АКТИВНОСТИ КСАНТИНОКСИДАЗЫ И ИНТЕНСИВНОСТИ ОКИСЛИТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ В ОПУХОЛЯХ РАЗЛИЧНОЙ ЛОКАЛИЗАЦИИ 163  
Каплун Д.С., Исмаилова Д.Я, Бакурова Е.М., Баранова О.В.
- ФЕНОЛЬНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ СЪЕДОБНЫХ МАКРОМИЦЕТОВ 164  
Ковалевская А.Л., Ковалева А.В., Луговой К.С., Шендрик А.Н.
- К ОЦЕНКЕ АНТИРАДИКАЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ ФЕНОЛОВ В РЕАКЦИИ С ДИФЕНИЛПИКРИЛГИДРАЗИЛОМ 165  
Лащенко Е.Ю., Ковалева А.В., Панкова А.С., Каниболоцкая Л.В., Шендрик А.Н.
- ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОСТРОЙ ТОКСИЧНОСТИ ГАЛОГЕНЗАМЕЩЕННЫХ ГИДРОХИНОНОВ 166  
Нагибина К.О., Калиниченко Е.А., Каниболоцкая Л.В., Шендрик А.Н.
- ХАРАКТЕРИСТИКА СПОЛУК РЕНІЮ ЯК ПЕРСПЕКТИВНИХ АНТИОКСИДАНТНИХ ТА ПРОТИПУХЛИННИХ АГЕНТІВ 167  
Ніколенко О.І., Большакова А.С., Горяева Я.І, Кириченко С.В.
- ВЛИЯНИЕ КРИОКОНСЕРВАЦИИ НА АКТИВНОСТЬ ПЕРОКСИДАЗЫ РЕДЬКИ ЧЕРНОЙ 168  
Нусретова С.Ш., Ибрагимова Э.И. Вяткина О.В.
- ИЗМЕНЕНИЯ УРОВНЯ СУБКЛАССА ИММУНОГЛОБУЛИНА G1 В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ВОЗРАСТА 169  
Пастухов А.О., Горбачев А.А. , Прилуцкий А.С.

## Сучасна хімічна освіта

ПРИМЕНЕНИЕ МУЛЬТИМЕДИЙНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В ПРЕПОДАВАНИИ СПЕЦКУРСА “ХИМИЯ БЕЛКА” <i>Божкова Я. А., Баранова О. В.</i>	170
ВНЕДРЕНИЕ ОБУЧАЮЩИХ И КОНТРОЛИРУЮЩИХ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ЗАДАНИЙ В ДИСТАНЦИОННЫЙ КУРС «ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА» <i>Жигар А.-М.А., Михальчук В.М., Полищук Т.Б.</i>	171
НОВЫЕ ПЕДАГОГИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ В ОБУЧЕНИИ ХИМИИ <i>Журбенко В.Е.</i>	172
ДИСТАНЦІЙНИЙ КУРС НАВЧАННЯ «СТРУКТУРНА ХІМІЯ» <i>Мазур Л.М., Пастернак О.М.</i>	173
ОРГАНИЗАЦИЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ТЕОРЕТИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛА ПО КУРСУ «КИНЕТИКА И КАТАЛИЗ» <i>Маценко А.А., Полищук Т.Б., Белая Н.И.</i>	174
СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ТРЕБОВАНИЙ К НЕОБХОДИМОМУ УРОВНЮ ШКОЛЬНЫХ ЗНАНИЙ В ОБЩЕОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ И ВЫСШЕЙ ШКОЛЕ <i>Мирошниченко Т.Н., Капитанов И.В.</i>	176
СУЧАСНІ ПРОГРАМИ - СИМУЛЯТОРИ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ СИСТЕМ <i>Набок О.М., Афонін Г.Г., Безносик Ю.О.</i>	177
ВИКОРИСТАННЯ ТЕХНОЛОГІЇ КРИТИЧНОГО МИСЛЕННЯ ЯК МОДЕЛІ ІНТЕРАКТИВНОГО НАВЧАННЯ <i>Тарасенко У.О.</i>	178
КОНЦЕПЦІЇ ВПРОВАДЖЕННЯ ДИСТАНЦІЙНОГО НАВЧАННЯ В СУЧАСНУ СИСТЕМУ ОСВІТИ <i>Берзеніна О.В., Хмарська Л.О.</i>	179
ЕМОЦІЙНИЙ ВПЛИВ ЯК САМОСТІЙНИЙ ФАКТОР АКТИВІЗАЦІЇ ПІЗНАВАЛЬНОЇ ДІЯЛЬНОСТІ СТУДЕНТІВ <i>Хоружа І.А.</i>	180

# UKRAINIAN AEROSOLS

---

«Украинские аэрозоли» - крупнейшая вертикально интегрированная производственная компания на аэрозольном рынке Украины. Спектр наших возможностей простирается от разработки рецептур до производства комплектующих и создания готового продукта.

Синергия производственного потенциала, передовых технологий, профессионального менеджмента, взвешенной стратегической политики позволяют нам достигать лидирующих позиций в аэрозольной отрасли Украины.

Мы создаем идеи новых продуктов и брендов, аккумулируя передовые мировые технологии, развивая собственные знания и опыт.

Мы ищем лучших партнеров по всему миру, способных обеспечить максимально качественное воплощение задуманного.



Ukrainian Aerosols LLC is the main manufacturer of aerosols in Ukraine. The enterprise develops formulations, produces packaging and fills aerosols.

Synergy of production capacity, top-notch technologies, professional management and considered strategy make it possible to keep leading positions in Ukrainian aerosol market.

We generate new product and brand ideas by accumulation of cutting-edge technologies and development of own experiences.

We are actively looking for best partners from around the world and hope for a fruitful cooperation enabling our plans to come true.

## UKRAINICA BIOORGANICA ACTA

журнал біоорганічної і медичної хімії



вул. Академіка Заболотного, 150  
м. Київ, 03143, Україна  
Тел./факс: +38 (044) 522 24 58  
E-mail: [bioorganica@ukr.net](mailto:bioorganica@ukr.net)  
<http://www.bioorganica.org.ua>

**Ukrainica Bioorganica Acta** – наукове видання, що презентує праці з біоорганічної та медичної хімії. Наукова проблематика журналу включає питання виявлення, спрямованого синтезу та вивчення властивостей біологічно активних органічних сполук, дослідження їх метаболізму, інтерпретацію способу дії на молекулярному рівні, вивчення природних біорегуляторів, білків, нуклеїнових кислот, ліпідів, вуглеводів.

Видання розраховано на наукових співробітників, викладачів ВНЗ, фахівців у галузі біоорганічної, біологічної, органічної і медичної хімії, біохімії, фармакології та біотехнології.

Ukrainica Bioorganica Acta внесено до переліку наукових фахових видань ВАК України, в яких можуть публікуватися результати дисертаційних робіт на здобуття наукових ступенів доктора і кандидата наук (галузі науки: біологічні, хімічні).

Журнал реферується такими базами даних, як Chemical Abstracts Service, DOAJ, EBSCO, Open J-Gate, Google Академія, Україніка наукова, Українським реферативним журналом «Джерело», Національною бібліотекою України імені В.І. Вернадського.

*Установа-засновник:* Інститут молекулярної біології і генетики НАН України

*Журнал видається* двічі на рік

*Мови видання:* українська, англійська

*ISSN:* 1814-9758 (друкована версія), 1814-9766 (електронна версія).

Український лабораторний портал

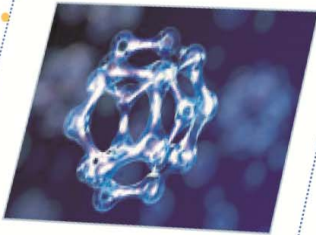
Знайти...

Розширені

Товари й послуги | Каталог фірм | Новини | Події | Форум | Рекламодавцям | Контакти



Біологічні реактиви



- Молекулярна біологія
- Біохімія
- Мікробіологія
- Гістологія
- Імунологія



Хімічні реактиви



- Реагенти для хімічного синтезу
- Кислоти, луги, солі
- Реагенти для аналітичної хімії
- Розчинники
- Барвники та індикатори
- Спеціальні реактиви



Послуги



- Ремонт приладів та обладнання
- Сервіс приладів
- Хімія
- Н...
- С...
- К...
- до...
- Синтез

Запит на пошук товарів

Якщо Ви шукаєте товари або послугу, будь ласка, заповніть запит. Labprice.ua підкаже Вам, яка компанія Вам допоможе

Зробити запит

Золоті партнери порталу



Спецпропозиції



Статті, прес - релізи

Україні листом від року №99к/218-8

Коментар професора, завідуючого відділом

Корисні інструменти

Реклама



Обладнання ●  
Хімічні реактиви ●  
Послуги ●

Біохімія ●  
Молекулярна біологія ●  
Медицина ●

Провідний український лабораторний портал **Labprice.ua** дає змогу

- довідатися про лабораторне обладнання, матеріали і ціни на них (на порталі діє система порівняння цін)
- скористатися каталогом спеціалізованих веб-посилань для лабораторій
- дізнатися про спеціальні пропозиції українських фірм
- ознайомитися із прес-релізами, спеціалізованими статтями і новинами з ринку лабораторного обладнання
- поспілкуватися у форумі для співробітників лабораторій
- отримати повний комплекс послуг із рекламування продукції для лабораторій