



Міністерство освіти і науки України
Національна академія наук України
Одеський національний університет імені І. І. Мечникова
Фізико-хімічний інститут імені О. В. Богатського НАН України
ТДВ «ІНТЕРХІМ»

ІННОВАЦІЙНІ НАПРЯМИ РОЗВИТКУ ХІМІЇ - 2024

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ
І наукової конференції
з міжнародною участю

9-11 вересня
2024
Одеса

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ОДЕСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ І. І. МЕЧНИКОВА
ФІЗИКО-ХІМІЧНИЙ ІНСТИТУТ ІМЕНІ О. В. БОГАТСЬКОГО
НАН УКРАЇНИ ТДВ «ІНТЕРХІМ»

«ІННОВАЦІЙНІ НАПРЯМИ РОЗВИТКУ ХІМІЇ - 2024»

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

І наукової конференції з міжнародною участю

9 -11 вересня 2024 року

ОДЕСА
ОНУ
2024

УДК 54:001.895
I-665

*Конференція проводилася згідно Наказу ректора ОНУ
№1399-18 від 28.06.2024 р.*

I-665 **Інноваційні** напрями розвитку хімії - 2024 [Електронний ресурс] : тези допов. І наук. конф. з міжнарод. участю, 9-11 вересня 2024, Одеса / за ред. к.х.н., доц. Менчука В. В., д.х.н., проф. Марцинка О. Е., к.х.н., доц. Гузенко О. М., к.х.н., доц. Тимчук А. Ф., к.х.н., доц. Снігура Д. В. – Електронні текстові дані (1 файл: 4,27 МБ). – Одеса: Одес. нац. ун-т ім. І.І. Мечникова, 2024. – 147 с.
ISBN 978-617-689-505-3

В збірнику тез доповідей І наукової конференції з міжнародною участю «Інноваційні напрями розвитку хімії - 2024» опубліковано матеріали з актуальних проблем цілеспрямованого пошуку функціональних неорганічних матеріалів, синтезу координаційних, супрамолекулярних та органічних сполук з корисними для практики властивостями, розвитку аналітичної, фармацевтичної, фізичної, колоїдної хімії та хімії високомолекулярних сполук, а також інноваційних розробок в галузі екології та хімічної освіти.

Матеріали представлені в авторській редакції.

УДК 54:001.895

ISBN 978-617-689-505-3

© Колектив авторів, 2024
© Одеський національний університет
імені І. І. Мечникова, 2024



ОРГАНІЗАЦІЙНИЙ КОМІТЕТ

Вячеслав ТРУБА, професор, д.ю.н., ректор ОНУ імені І. І. Мечникова – голова.

Василь МЕНЧУК, доцент, к.х.н., декан факультету хімії та фармації ОНУ імені І. І. Мечникова – співголова.

Віктор КУЗЬМІН, академік НАНУ, професор, д.х.н., директор ФХІ ім. О.В. Богатського – співголова.

Анатолій РЕДЕР, к.х.н., генеральний директор ТДВ «Інтерхім» – співголова.

Олена МАРЦИНКО, професор, д.х.н., зав. кафедри неорганічної хімії та хімічної освіти ОНУ імені І. І. Мечникова – співголова.

Володимир ДОЦЕНКО, професор, д.х.н. (ФХІ ім. О. В. Богатського)

Віктор ЗІНЧЕНКО, професор, д.х.н. (ФХІ ім. О. В. Богатського)

Тетяна РАКИТСЬКА, професор, д.х.н. (ОНУ імені І. І. Мечникова)

Наталія РУСАКОВА, ст. наук. співр., д.х.н. (ФХІ ім. О. В. Богатського)

Інна СЕЙФУЛЛІНА, професор, д.х.н. (ОНУ імені І. І. Мечникова)

Олена СТРЕЛЬЦОВА, професор, д.х.н. (ОНУ імені І. І. Мечникова)

Руслан ХОМА, професор, д.х.н. (ОНУ імені І. І. Мечникова)

Ольга ШЕВЧЕНКО, професор, д.х.н. (ОНУ імені І.І. Мечникова)

Аркадій ЯВОЛОВСЬКИЙ, ст. наук. співр., д.х.н. (ФХІ ім. О. В. Богатського)

Олена ГУЗЕНКО, доцент, к.х.н. (ОНУ імені І.І. Мечникова)

Тетяна КІОСЕ, доцент, к.х.н. (ОНУ імені І.І. Мечникова)

Людмила РАСКОЛА, доцент, к.х.н. (ОНУ імені І.І. Мечникова)

Алла ТИМЧУК, доцент, к.х.н. (ОНУ імені І.І. Мечникова)

Надія ФЕДЬКО, доцент, к.х.н. (ОНУ імені І.І. Мечникова)

Тетяна ЩЕРБАКОВА, доцент, к.х.н. (ОНУ імені І.І. Мечникова)

Денис СНИГУР, доцент, к.х.н. (ОНУ імені І.І. Мечникова) – відповідальний секретар конференції.

Олена ЖУКОВЕЦЬКА, PhD, **Олеся КІОСЕ**, PhD (ОНУ імені І.І. Мечникова) – технічні секретарі конференції.

ПЛЕНАРНІ ДОПОВІДІ

SIMPLE STRUCTURES - NUMEROUS POSSIBILITIES

Roman Gladyshevskii

Department of Inorganic Chemistry, Ivan Franko National University of Lviv, Ukraine

e-mail: roman.gladyshevskii@lnu.edu.ua

A structure type describes the geometric arrangement of the atoms (ions, molecules) in a crystalline substance, without considering their chemical nature. Two compounds are considered to adopt the same structure type (be isotypic), if they have the same stoichiometry, the same space group, the same occupied Wyckoff positions, with the same or similar values of the atom coordinates (x, y, z), the same or similar values of the cell parameter ratios (a, b, c) and angles (α, β, γ). The 2023 edition of the database Pearson's Crystal Data contains crystallographic data for near 170'000 inorganic compounds, including 16'367 phases adopting simple structures with exclusively fixed atom coordinates. The latter belong to 182 distinct structure types, the most common being: cubic perovskite CaTiO_3 (2'658 different chemical systems), rock salt NaCl (1'732), fluorite CaF_2 (1'358), and the cubic Laves phase MgCu_2 (1'258).

The simplest structure types (one atom in the unit cell in Wyckoff position $1a\ 0\ 0\ 0$) are "simple cubic", defined on $\alpha\text{-Po}$ (Pearson symbol $cP1$, space group $Pm\text{-}3m$) and "simple hexagonal" ($\text{Hg}_{0.1}\text{Sn}_{0.9}$) ($hP1$, $P6/mmm$). In the face-centered cubic space group $Fm\text{-}3m$ the multiplicity of the site with coordinates $0\ 0\ 0$ is 4 ($0\ 0\ 0$, $0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0$), whereas in $Fd\text{-}3m$ it is 16. The latter space group is adopted by the structure type MgCu_2 with 24 atoms in the unit cell ($cF24$) in Wyckoff positions $16c$ and $8b$. The structure type Cu ($cF4$, $Fm\text{-}3m$) describes cubic close packing, whereas hexagonal close packing is defined on Mg ($hP2$) and has the space group $P6_3/mmc$.

Many common structure types can be derived from one or several aristotypes by applying structural relationships such as deformation, substitution (replacement of part of the atoms), filling-up of interstices (additional atoms), creation of vacancies (removal of part of the atoms), or intergrowth. Simple deformation derivatives of Cu are In ($tI2$, $I4/mmm$, deformation along $[001]$) and Hg ($hR3$, $R\text{-}3m$, $[111]$), and the deformation is accompanied by changes in the coordination (nearest environment) of the atoms. Examples of substitution derivatives of Cu are binary CuAu ($tP2$, $P4/mmm$) with ideal stoichiometry 1:1, Cu_3Au ($cP4$, $Pm\text{-}3m$), and TiAl_3 ($tI8$, $I4/mmm$), both 3:1, as well as the ternary derivatives Co_2NiGa ($tP4$, $P4/mmm$, 2:1:1) and rt-UCuAl_2 ($tI8$, $I4/mmm$, 2:1:1). Filled-up derivatives of Cu are ionic-covalent NaCl ($cF8$, $Fm\text{-}3m$, 100% of the octahedral voids filled) and its deformation derivatives Ir-CoO ($tI4$, $I4/mmm$, $[001]$) and rt-NiO ($hR6$, $R\text{-}3m$, $[111]$), Fe_4N ($cP5$, $Pm\text{-}3m$, 25% octahedral), fluorite CaF_2 ($cF12$, $Fm\text{-}3m$, 100% of the tetrahedral voids), sphalerite ZnS ($cF8$, $F\text{-}43m$, 50% tetrahedral), gananite BiF_3 ($cF16$, $Fm\text{-}3m$, all octahedral and tetrahedral voids). The filled-up derivatives of Mg , NiAs ($hP4$, $P6_3/mmc$, 100% of the octahedral voids) and Ni_2In ($hP6$, $P6_3/mmc$, octahedral and trigonal-prismatic voids) have many representatives.

The ideal structure of perovskite, CaTiO_3 , can be considered as a substitution derivative of Cu ($4\text{Cu} \equiv 3\text{O} + \text{Ca}$) with 25% of the octahedral voids filled by (Ti) atoms. Deformation derivatives are $\text{Ir-ZnMn}_3\text{C}$ ($tP5$, $P4/mmm$, $[001]$), BiFeO_3 ($hR15$, $R\text{-}3m$, $[111]$), and PbTiO_3 ($oP5$, $Pmmm$, $[011]$). Cubic perovskite has representatives in 368 ternary systems with B, C, N, and H, whereas some 300 ternary oxides adopt the distorted structure type GdFeO_3 ($oP20$, $Pnma$) with refinable coordinates. Another large family of structure types is based on the aristotype body-centered cubic W ($cI2$, $Im\text{-}3m$). Deformation derivatives are $\alpha\text{-Pa}$ ($tI2$, $I4/mmm$, deformation along $[001]$) and Te-IV ($hR3$, $R\text{-}3m$, $[111]$). The most common substitution derivative is CsCl ($cP2$, $Pm\text{-}3m$) with the same number of atoms in the unit cell. Further substitution leads to the formation of the Heusler phases, known for diverse physical properties. The ternary and quaternary cubic structure types have 8-fold cell volume: Cu_2MnAl ($cF16$, $Fm\text{-}3m$, classical Heusler), Li_2AgSb ($cF16$, $F\text{-}43m$, inverse Heusler), LiMgPdSn ($cF16$, $F\text{-}43m$), and MgAgAs ($cF12$, $F\text{-}43m$, half-Heusler). More than 1000 intermetallic compounds belong to this family, near 2/3 adopting the type Cu_2MnAl and 1/3 MgAgAs .

To a first approximation, inorganic compounds like high symmetry and structural simplicity, and by applying simple operations large structural families are formed. Unique physical properties are often connected with slight deformations. Databases such as the Pauling File can be used for better understanding structural chemistry and to monitor structure engineering.

ХІМІЧНА ТЕРМІНОЛОГІЯ НА ШЛЯХУ ДО IUPAC

Олесь Голуб

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

e-mail: agolub@ukma.edu.ua

Хімічна термінологія відіграє ключову роль у науковому спілкуванні, сприяє розумінню хімічних процесів і явищ, допомагає у навчанні і викладанні. Перехід до міжнародної хімічної термінології, близької до рекомендованої Міжнародною спільнотою теоретичної і прикладної хімії (IUPAC), є важливим кроком на шляху інтеграції у світове наукове співтовариство. Цей процес має глибокі історичні корені і є логічним продовженням багаторічних досліджень українських науковців. Але чому саме IUPAC?

Сучасна наукова мова - термінологія, є метамовою науки, яка чітко, на основі однозначних і максимально простих правил, повинна з найменшим механічним запам'ятовуванням дозволити комунікації в межах дисципліни. Зокрема такою, чи максимально наближеною до ідеальної метамови хімії є термінологія і номенклатура IUPAC, що розроблялись протягом десятиліть разом з розвитком хімічної науки. Тому максимальна орієнтація української термінології і номенклатури на міжнародну є важливою складовою розвитку хімічної освіти та науки в сучасному міжнародному контексті.

Історія розвитку української хімічної термінології є яскравим прикладом прагнення до міжнародного визнання та інтеграції. Перші кроки в напрямку оміжнароднення української термінології та створення раціональної хімічної номенклатури зробив видатний український хімік Іван Горбачевський ще на початку ХХ століття і заклав фундамент для розвитку національної хімічної термінології та номенклатури. У 1920-30-х роках, в часи так званого "розстріляного відродження", активна діяльність тогочасних термінологічних комісій здійснила колосальну роботу по систематизації і осучасненню української хімічної термінології, зокрема було створено ряд словників і інших видань. Найповніші з яких, словники О. Курило та С. Зінкевича сприяли розвитку та усталенню української хімічної термінології. Проте всі автори термінологічних праць, як в галузі хімії, так і в усіх інших галузях науки, включно з членами всіх термінологічних комісій, а їх тільки з хімії було більше п'яти в різних регіонах України, були репресовані, а більшість з них були знищені, як і книжки створені ними. Недаремно відродження українського самопізнання 20-30-х років назвали розстріляним.

У 1950-70-х роках, значний внесок у розвиток української хімічної термінології зробили проф. Андрій Голуб в Україні та проф. Анатоль Вовк у США. Їхня робота була спрямована на адаптацію національної термінології до міжнародних стандартів, та викорененню термінів-покручів занесених в часи насильницької русифікації і заміна їх на питоми українські та міжнародні терміни, що дозволило зберегти наукову спадщину і продовжити осучаснення хімічної термінології.

Протягом останніх 30 років в Україні ведеться постійна робота з трансформації пострадянської зросійщеної термінології та номенклатури до сучасної, максимально наближеної до правил і рекомендацій IUPAC. Цей процес включає не тільки впровадження міжнародних термінів, але й повернення питоми українських та розвиток власних наукових підходів, що відповідають світовим стандартам.

Упорядкована хімічна термінологія, що розробляється на основі правил IUPAC, дозволить при її успішному засвоєнні у шкільних та університетських курсах гармонізувати українську та міжнародну терміносистеми в галузі хімічної освіти і науки та надасть поштовх до розвитку хімії загалом.

Таким чином, перехід до міжнародної хімічної термінології є не тільки необхідним кроком для інтеграції української науки у світову спільноту, але й логічним продовженням багаторічної історії розвитку національної термінології. Спираючись на досягнення минулого, українські вчені продовжують працювати над вдосконаленням хімічної мови, роблячи вагомий внесок у світову науку.

АНАЛІЗ НЕБЕЗПЕЧНОЇ ДІЇ ХІМІЧНИХ ЗАБРУДНЮВАЧІВ, ЗОКРЕМА ВІЙСЬКОВОГО ПРИЗНАЧЕННЯ, МЕТОДАМИ ТЕОРЕТИЧНОЇ ХІМІЇ ТА ХЕМОІНФОРМАТИКИ

*Віктор Кузьмін¹, Леонід Горб², Сергій Оковитий³, Олексій Нипорко⁴, Анатолій Артеменко¹,
Євген Муратов¹, Людмила Огніченко¹*

¹Фізико-хімічний інститут ім. О.В. Богатського НАН України, Одеса, Україна

²Інститут молекулярної біології і генетики НАН України, Одеса, Україна

³Дніпровський національний університет ім. Олеся Гончара, Дніпро, Україна

⁴Інститут високих технологій Київського національного університету ім. Тараса Шевченка,
Київ, Україна
e-mail: theorchem@gmail.com

Дана робота присвячена теоретичним і прикладним аспектам застосування теоретичних підходів задля розуміння та прогнозування поведінки хімічних забруднювачів довкілля. З використанням хемо- та біоінформаційних технологій, сучасних методів теоретичної хімії розроблено наукові засади прогнозування тих хімічних, біологічних і фізичних властивостей хімічних сполук, які зрештою і обумовлюють їх небезпеку щодо довкілля та здоров'я людини.

Дослідження проводилися в таких основних напрямках:

- Розробка та розвиток методології використання методів хемоінформатики, квантової хімії, молекулярної механіки та динаміки задля вирішення різноманітних завдань «структура – властивості», зокрема для хімічних забруднювачів.

- Використання розроблених підходів (зокрема ієрархічної QSAR технології на основі симплексного представлення молекулярної структури, квантово-хімічних підходів для моделювання кінетики багатоступінчатих органічних реакцій) для створення адекватних моделей що забезпечують ефективне прогнозування та віртуальний скринінг різноманітних речовин (в тому числі військового призначення) щодо різних видів токсичності, аналізу механізмів токсичної дії, вивчення можливих реакцій деградації токсикантів.

- Враховуючи, що екологічна небезпека речовин залежить не тільки від ступеню токсичності, але і від їхньої здатності розповсюдження та проникнення в різних середовищах (грунт, вода, повітря, живі організми), досліджувались, моделювались та прогнозувались такі властивості речовин, як водна розчинність, ліпофільність, біодоступність, можливість проникнення через різноманітні біологічні бар'єри, тощо.

- Узагальнюючи результати фундаментальних досліджень, було створено низку комп'ютерних експертних систем задля прогнозування та позаекспериментального скринінгу різноманітних речовин (в тому числі військового призначення) щодо до їхньої потенційної екологічної небезпеки. Ці експертні системи захищені свідоцтвами України, мають дружній інтерфейс і придатні для використання зацікавленими фахівцями різних галузей з початковим рівнем комп'ютерної підготовки. Більшість цих експертних систем доступні на відповідних сайтах Інтернету.

В цілому, розроблена комплексна система аналізу та прогнозування небезпеки хімічних забруднювачів не має аналогів в Україні та світі.

Робота представлена на здобуття Національної премії України імені Бориса Патона.

Кількість публікацій за роботою: 147, у тому числі 13 колективних монографій у зарубіжних виданнях, 1 книга за редакцією, 3 навчальних посібника, 126 статей в журналах, включених до категорії "А" (у тому числі 117 статей у зарубіжних виданнях) та 2 статті у журналах, включених до категорії "Б". Загальна кількість посилань на публікації авторів/h-індекс за роботою згідно з базами даних складає відповідно: Web of Science 6519/ 41, Scopus 7352/ 43, Google Scholar 9839/ 49. Отримано 2 свідоцтва про реєстрацію авторського права на комп'ютерну програму. За даною тематикою захищено 4 докторських та 10 кандидатських дисертацій.

ГЕТЕРОПОЛІСПОЛУКИ З АНІОНОМ ЗІ СТРУКТУРОЮ ПІКОКА–УІКЛІ: СПОСОБИ СИНТЕЗУ, ВЗАЄМОЗВ'ЯЗОК СТРУКТУРИ ТА ВЛАСТИВОСТЕЙ, ПРАКТИЧНЕ ВИКОРИСТАННЯ

Олександра Марійчак, Георгій Розанцев, Сергій Радіо

Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна

e-mail: radio@donnu.edu.ua

У роботі проаналізовано способи синтезу гетерополісполук і розроблено методологію одержання кристалічних солей із гетерополіаніоном зі структурою Пікока–Уіклі, $\text{Na}_9[\text{Ln}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot n\text{H}_2\text{O}$, із водних розчинів $\text{Na}_2\text{WO}_4\text{--HNO}_3\text{--Ln}(\text{NO}_3)_3\text{--H}_2\text{O}$ (Ln – лантаноїди).

Запропонована методологія дозволила синтезувати 26 раніше невідомих солей, серед яких: 13 середніх і 2 кислі гетерополісполуки ($\text{Na}_9[\text{Ln}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot n\text{H}_2\text{O}$, $\text{Ln}^{3+} = \text{Y}, \text{La--Lu}$, $n = 32\text{--}42$; $\text{Na}_{9-x}\text{H}_x[\text{Sm}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot m\text{H}_2\text{O}$, $x = 1\text{--}2$), включаючи солі $\text{Na}_9[\text{Ln}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot 34.25\text{H}_2\text{O}$ ($\text{Ln}^{3+} = \text{La}, \text{Pr}$) із новим типом ізоструктурності; 8 солей із аніоном паравольфрамату Б, $[\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2]^{10-}$; 3 солі з лакунарним метавольфрамат-аніоном зі структурою Кеггіна, $[\text{Ln}_2(\text{H}_2\text{O})_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{72}(\text{OH})_2]^{8-}$ ($\text{Ln}^{3+} = \text{Ce}, \text{Dy}, \text{Ho}$; $n = 34\text{--}46$).

Проаналізовано вплив Ln-гетероатома на структурні параметри в гетерополіаніоні зі структурою Пікока-Уіклі, $[\text{Ln}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2]^{9-}$, шляхом співставлення міжатомних відстаней і довжин зв'язків для рядів ізоструктурних середніх ($\text{Na}_9[\text{Ln}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot n\text{H}_2\text{O}$) та кислих ($\text{K}_3\text{Na}_4\text{H}_2[\text{Ln}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2] \cdot n\text{H}_2\text{O}$) солей, як синтезованих за розробленою авторською методикою, так і отриманих іншими науковими групами, та структурні параметри в гетерополіаніонах інших структурних типів (лакунарні та димерні аніони зі структурою Кеггіна). Встановлено лінійний характер залежності середніх значень міжатомних відстаней O...O та довжин зв'язків Ln–O_b у координаційних поліедрах LnO₈ від заряду ядра Ln-гетероатома в ряду La–Yb, що корелює з лінійним зменшенням кристалічного радіусу іонів Ln³⁺ (рис. 1). Аналіз параметрів кристалічної будови показав, що зміни у складі катіонної підґратки й різна кількість молекул структурної H₂O не впливають на значення величин довжин зв'язків (W=O_t, W–O_b(W), W–O_c, W–O–(Ln)) та валентних кутів (W–O_{b,c,b(eq)}–W) у гетерополіаніоні.

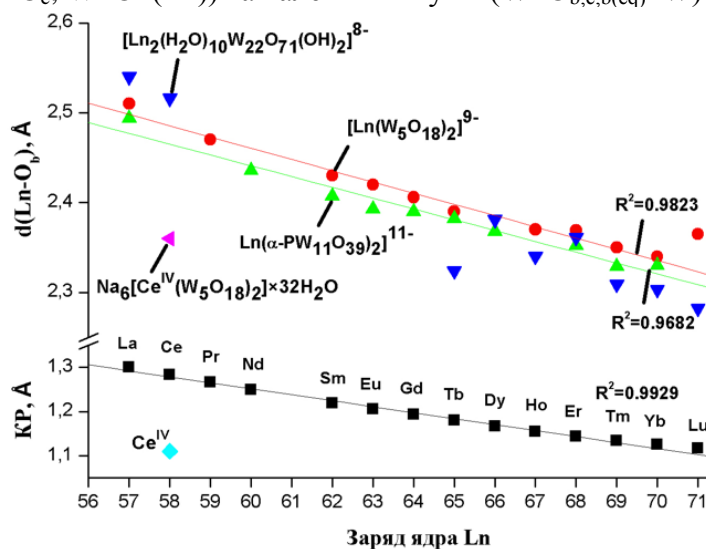


Рис. 1. Залежність довжин зв'язків Ln–O_b від заряду ядра Ln-гетероатома в поліоксовольфрамат-аніонах із різною структурою

Солі досліджено методами рентгеноструктурного аналізу, ІЧ- та КР-спектроскопії. Однофазність солей підтверджено збіжністю дифрактограм монокристалів і порошків, а також під час досліджень мікрморфології поверхні методом скануючої електронної мікроскопії.

Обговорюватиметься використання гетерополісолей із аніоном зі структурою Пікока–Уіклі в якості каталізаторів, магнітних і люмінесцентних матеріалів.

**МЕТАЛОКОМПЛЕКСНІ ТА МЕТАЛОКСИДНІ НАНОКАТАЛІЗАТОРИ
В РЕДОКС-РЕАКЦІЯХ ЗА УЧАСТЮ ГАЗОПОДІБНИХ ТОКСИЧНИХ РЕЧОВИН
(PH₃, CO, SO₂, O₃)**

Тетяна Ракитська

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, кафедра неорганічної хімії та хімічної освіти, Одеса, Україна
e-mail: tlr@onu.edu.ua

Узагальнені результати багаторічної роботи, яка присвячена теоретичним і практичним аспектам розробки низькотемпературних металокомплексних і металоксидних нанокаталізаторів. Це була одна із частин загального всебічного проекту по створенню сучасних поліфункціональних засобів захисту навколишнього середовища і органів дихання людини, який науково обґрунтував професор Алім-Абдул Адімович Еннан та втілював його на протязі всього життя. В роботі висвітлені наступні питання: загальна інформація, щодо фізико-хімічного обґрунтування способів очищення повітря від газоподібних токсичних речовин та вимог до каталізаторів респіраторного призначення; наукові засади створення закріплених на носіях різного походження металокомплексних каталізаторів окиснення CO, PH₃, SO₂ та відновлення озону; приклади хімічного синтезу металоксидних нанокаталізаторів і їх активність в реакціях розкладання озону та окиснення діоксиду сульфуру; приклади утилізації нанодисперсних частинок, які синтезуються в процесі зварювання металів і виявляють каталітичні властивості в реакції розкладання озону; приклади реалізації результатів дослідження: респіратори, установки публікації, захисти дисертацій, навчальний процес; створена та діє наукова школа «Металокомплексні сполуки в каталізі» [1-6]. Найбільш розповсюдженими токсичними газами є ті, що ми класифікували за кислотно-основними та редокс-властивостями. З цього випливає, що очистка повітря від перелічених речовин може бути реалізована тільки через ряд послідовних стадій, а саме уловлювання аеродисперсних частинок; хемосорбційне поглинання речовин, віднесених до I-IV груп небезпеки; каталітичне знешкодження PH₃, CO, SO₂ і O₃ в присутності закріплення на різних носіях металокомплексних сполук, а також металоксидних нанокаталізаторів. До найбільш вагомих сфер використання каталізаторів екологічного призначення відносяться: сприяння виробничим процесам та випуску продукції, що не завдає шкоди навколишньому середовищу; сприяння підвищенню якості життя та навколишнього середовища; сприяння раціональнішому використанню природних ресурсів; мінімізація шкідливого впливу токсичних речовин на здоров'я працівників різних виробництв.

1. Ракитська Т.Л., Еннан А.А., Волкова В.Я. Низькотемпературне каталітичне очищення повітря від монооксиду карбону. Одеса: Екологія, 2005. 191 с.
2. Ракитська Т.Л., Еннан А.А. Фосфін. Фізико-хімічні властивості та практичні аспекти уловлювання. Одеса: Екологія, 2012. 208 с.
3. Ракитська Т.Л., Труба А.С., Еннан А.А. Озон. Фізико-хімічні властивості та каталітичні способи розкладання. Одеса: Астропринт, 2020. 224 с.
4. Ракитська Т.Л., Труба А.С., Кіосе Т.О., Раскола Л.А. Металокомплексний каталіз редокс-реакцій за участю газоподібних токсичних речовин: навчальний посібник для студентів хімічного факультету за спеціальністю «Хімія». Одеса: «Одеський національний університет», 2016. 254 с.
5. Ракитська Т.Л., Кіосе Т.О., Труба А.С., Раскола Л.А. Фізико-хімічні властивості природних сорбентів та металокомплексних каталізаторів на їх основі: навчальний посібник для студентів хімічного факультету за спеціальністю 102 Хімія. Одеса: «Одеський національний університет», 2018. 152 с.
6. Ракитська Т.Л., Труба А.С., Кіосе Т.О. Новітні матеріали в технологіях захисту навколишнього середовища: навчальний посібник для студентів факультету хімії та фармації за спеціальністю 102 Хімія. Одеса: Олді+, 2022. 184 с.

**ФОРМУВАННЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНИХ ОСНОВ ХІМІЧНОГО
КОНСТРУЮВАННЯ НОВИХ ТИПІВ МЕТАЛОКОМПЛЕКСНИХ
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНИХ АРХІТЕКТУР БІМЕДИЧНОГО ПРИЗНАЧЕННЯ
ЯК ВЕКТОР ДОСЛІДЖЕНЬ В ОНУ імені І.І. МЕЧНИКОВА**

Інна Сейфулліна¹, Олена Марцінко¹

¹Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, Одеса, Україна
e-mail: seiful@ukr.net

Координаційні сполуки металів як медико-біологічні засоби складають основу багатьох сучасних соціально, технологічно значущих інноваційних розробок та патентів, спрямованих на підвищення імунітету, лікування та профілактику цілого ряду патологічних станів населення України, викликаних стресами, епідеміями, екологічними та гуманітарними катастрофами, в тому числі пов'язаних з військовим станом.

За останні роки авторами визначено найбільш перспективний шлях створення органо-неорганічних матеріалів на основі складних гетерометалічних і одночасно різнолігандних супрамолекулярних архітектур, які за природою максимально наближені до існуючих в біосистемах. Знайдено способи ефективного керування комплексоутворенням іонів s-, p-, d-металів з N-, O-, P-вмісними лігандами, отримано масив експериментальних даних про склад, будову, термічні і спектральні властивості біля 200 нових структур (моно-, бі-, поліядерних та кластерних). Одержано ряд різнометальних комплексів Ge(IV), Sn(IV) з комплексонами, лимонною, винною, яблучною, ксиларовою, глюконою, 1-гідроксіетилідендифосфоною кислотами та s-, d-, f-металами, протонуваними молекулами ніотинової кислоти, нікотинамідом, ізоніазидом тощо, а також 2,2-біпіридиновими, 1,10-фенантроліновими катіонами 3d-металів. Всебічно охарактеризовано моноядерні комплекси Ge(IV) з піридиноіл- і амінобензоілгідрозонами 2-гідроксиарилальдегідів. Встановлено, що ліганди зв'язуються з германієм O, N, O-трідентатно-циклічно в гідрохлоридній формі, утворення якої відбувається в результаті протонування вакантних екзохелатних атомів нітрогену піридинового кільця і аміно-груп гідрозонів. Підібрано умови (метод синтезу, розчинник, концентрація), виділено в твердому стані та визначено структуру комплексів 3d-металів з тіокарбамоїлсульфенамідами, дитіокарбаматами, 2-(7-бromo-2-оксо-5-фенил-3H-1,4-бенздіазепин-1-ил)ацетогідразидом (денний транквілізатор – гідазепам), а також координаційних сполук Sn(IV) і 3d-металів з продуктами конденсації гідазепаму та заміщених бенз- і нафталальдегідів.

Із застосуванням сучасних методів (ІЧ-, ЯМР ¹H, EXAFS-спектроскопії, мас-спектрометрії, вимірювання магнітної сприйнятливості та молярної електропровідності, ДТА, РСА, аналізу кристалічної структури методом поверхонь Хіршфельда) визначено способи координації функціональних груп лігандів, їх місткової ролі в утворенні гетерометалічних комплексів, особливостей упаковки молекул комплексів в кристалічних ґратках, системи водневих зв'язків за участю молекул розчинника і вплив на них хімічної і просторової будови усіх складових. На основі скринінгу на біологічну та фармакологічну активність нових сполук (гепатопротекторну, серцево-судинну, протигіпоксичну, нейротропну, іміностимулюючу, протимікробну, противірусну, церебропротекторну, анальгетичну, впливу на біосинтез та активність ферментів) простежено зв'язок між їх складом, структурою, властивостями і видами активності. Створено базу експериментальних даних, необхідних для хемоінформатики (в тому числі і структурних для Кембриджського банку). Розвинуто теорію селективної взаємодії комплексних аніонів і катіонів металів різних електронних блоків з відповідними органічними лігандами на підставі даних щодо умов аніонтемплатних реакцій, спрямованого утворення поодиноких ансамблів, іонних пар, функцій аніонів в супрамолекулярній хімії. Отримані результати є цінними як для створення нового покоління фармакологічних препаратів без прояву негативної побічної дії, в тому числі на основі відомих лікарських засобів, так і для підготовки здобувачів вищої освіти, висококваліфікованих конкурентноспроможних фахівців в галузі хімії.

Секція 1.

ФУНКЦІОНАЛЬНІ НЕОРГАНІЧНІ МАТЕРІАЛИ

СИНТЕЗ ТА ЛЮМІНЕСЦЕНТНІ ВЛАСТИВОСТІ ЛЕГОВАНИХ ІОНАМИ Cr^{3+} МІКРО- ТА НАНОРОЗМІРНИХ ОРТОБОРАТІВ ІНДІО

*Ірина Березовська¹, Олена Хоменко¹, Сергій Кулешов², Олена Трунова²,
Нінель Єфрюшина¹, Володимир Доценко¹*

¹ Фізико-хімічний інститут ім. О.В. Богатського НАН України, Одеса, Україна

² [Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського](#) НАН України, Київ, Україна
e-mail: ssclab@ukr.net

Методами РФА, СЕМ та люмінесцентної спектроскопії досліджено леговані іонами Cr^{3+} ортоборати зі структурою кальциту MBO_3 ($\text{M} = \text{Sc}, \text{In}$). Мікро- та нанорозмірні зразки $\text{MBO}_3:\text{Cr}^{3+}$ було отримано методом твердофазних реакцій та шляхом термолізу аморфного прекурсору, відповідно. При 293 К спектри люмінесценції Cr^{3+} у мікророзмірних (1-3 мкм) зразках MBO_3 ($\text{M} = \text{Sc}, \text{In}$) (див. рис. 1) складаються з широкої смуги в області 700-1050 нм з максимумом при 805-810 нм. Вочевидь, що ця смуга обумовлена дозволеним за спином переходом ${}^4\text{T}_2 \rightarrow {}^4\text{A}_2$ іонів Cr^{3+} . У спектрах збудження цієї люмінесценції спостерігаються три відносно широкі смуги з максимумами при 301, 463 та 642 нм ($\text{ScBO}_3:\text{Cr}^{3+}$) та при 307, 474 та 652 нм у випадку $\text{InBO}_3:\text{Cr}^{3+}$, які зумовлені відповідно переходами з основного (незбудженого) рівня ${}^4\text{A}_2$ на ${}^4\text{T}_1$ (P), ${}^4\text{T}_1$ (F) та ${}^4\text{T}_2$ рівні іонів Cr^{3+} .

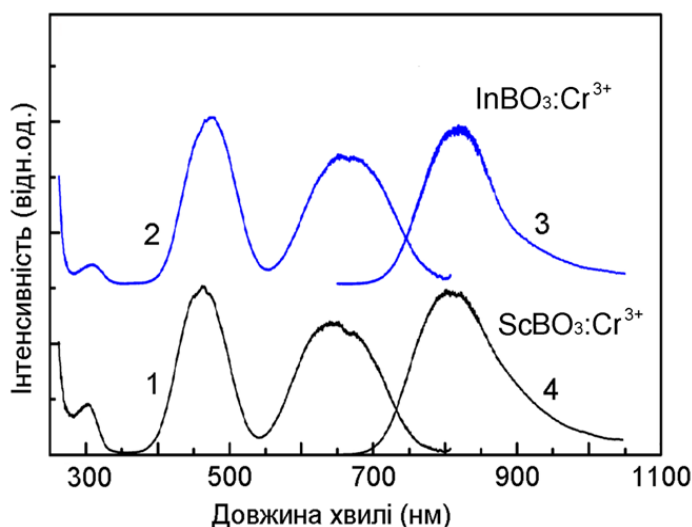


Рис. 1. Спектри збудження (1,2) та люмінесценції (3,4) іонів Cr^{3+} у $\text{MBO}_3:\text{Cr}^{3+}$ ($\text{M} = \text{Sc}, \text{In}$) при 293 К

Показано, що, на відміну від інтенсивності емісії, спектральне положення максимумів смуг люмінесценції іонів Cr^{3+} та її збудження у отриманих матеріалах практично не залежить від розміру кристалітів. Встановлено, що при 293 К квантова ефективність люмінесценції мікророзмірних зразків $\text{MBO}_3:\text{Cr}^{3+}$ ($\text{M} = \text{Sc}, \text{In}$) досить висока й сягає $\eta \approx 0,70$, тоді як для нанорозмірних зразків $\text{InBO}_3:\text{Cr}^{3+}$ η лише 0,26-0,30. Цей ефект приписується гасінню люмінесценції Cr^{3+} внаслідок взаємодії з недосконаlostями кристалічної ґратки, включаючи поверхневі дефекти, роль яких зростає при зменшенні розмірів частинок. Вплив поверхневих та об'ємних дефектів також призводить до неоднорідного уширення смуги люмінесценції іонів Cr^{3+} у нанорозмірному InBO_3 та до відсутності тонкої структури у спектрах його люмінесценції при 80 К. Можлива природа точкових дефектів у нанорозмірному InBO_3 обговорюється.

Беручи до уваги сприятливий спектральний склад випромінювання, високу хімічну стійкість InBO_3 зроблено висновок, що за умови оптимізації процедури синтезу та підвищення квантової ефективності люмінесценції нанорозмірний $\text{InBO}_3:\text{Cr}^{3+}$ може бути використаний для розробки ІЧ світлодіодів різного призначення..

ФУНКЦІОНАЛЬНІ МАТЕРІАЛИ НА ОСНОВІ La-TiO₂ ДЛЯ ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО СЕНСОРА РОЗЧИНЕНОГО КИСНЮ

Віра Воробець, Ірина Медик, Геннадій Колбасов

Інститут загальної та неорганічної хімії імені В.І. Вернадського НАН України, Київ, Україна
e-mail: vorobetsvs@i.ua

Функціональні матеріали відіграють життєво важливу роль у сучасному світі завдяки своїм унікальним властивостям і застосуванню в різних галузях промисловості. Вони є основою сучасної науки і техніки та багатьох технологічних розробок і знаходять широке застосування (електронні матеріали для комунікаційних та інформаційних технологій, біоматеріали для потреб медицини, датчики, енергетичні матеріали для відновлюваної енергії та довкілля, легкі сплави для кращого транспортування, матеріали для стратегічного застосування та ін.). Серед них – діоксид титану, який є перспективним матеріалом для застосування в екологічному фотокаталізі, для виробництва електроенергії в сонячних і паливних елементах, газових датчиках, оптичних і захисних покриттях, електрохімічних пристроях, як каталізатор відновлення кисню тощо [1]. У даній роботі наведено результати дослідження фото- та електрокаталітичних властивостей електродних матеріалів на основі наноструктурованих плівок діоксиду титану, модифікованого La для застосування в електрохімічних мультисенсорах токсичних елементів і кисню, розробка яких є актуальною на сьогоднішній день.

Електрокаталітичні плівки на основі нанодисперсного діоксиду титану, модифікованого La, одержували золь-гель методом із розчинів тетраізопропоксиду титану, який містив тритон X-100 в якості пороутворюючого компонента та нітрат лантану в якості модифікатора [1]. Плівки наносились на Ti підкладку і відпалювались при температурах 430–500°C. Підготовлені зразки було охарактеризовано за допомогою рентгенівської дифракції та спектральних залежностей фотоелектрохімічного струму в ультрафіолетовому та видимому діапазонах. Середній розмір наночастинок в залежності від вмісту La у плівках становив 7 – 11 нм. Результати XRD показали, що електроди TiO₂ і La-TiO₂, кальциновані при 500°C, склалися з анатазу як унікальної фази. Окремих кристалічних фаз сполук La на рентгенограмах не виявлено. На рентгенограмах плівок La-TiO₂ з вмістом La 3-5% спостерігалась поява гало в області значень $2\theta < 15^\circ$, що може свідчити про утворення у цих плівках аморфної фази.

Із спектральних залежностей фотоструму встановлено, що модифікування плівок TiO₂ лантаном підвищує значення квантового виходу фотоструму електродів La-TiO₂ ($0 \leq C_{La} \leq 3$ мол.%) в УФ-діапазоні. При цьому спостерігається зсув потенціалу плоских зон електродів у бік більш від'ємних значень у порівнянні з немодифікованим TiO₂.

Досліджено електрокаталітичні властивості TiO₂ та TiO₂-La електродів у процесах електровідновлення кисню. Із вольт-амперних залежностей було встановлено, що потенціал відновлення кисню змінювався зі складом плівки. Показано, що модифікування плівок TiO₂ лантаном (вміст лантану до 3%) підвищує каталітичну активність електродів на їх основі у реакції електровідновлення кисню, що проявляється у зменшенні потенціалу напівхвилі відновлення кисню і збільшенні динамічного діапазону електровідновлення O₂. При вищому вмісті лантану в плівках (>3%) електрокаталітична активність електродів зменшувалась, що може бути пов'язано з впливом неактивної аморфної фази. Встановлено, що досліджені La-TiO₂ електроди відрізнялись високою чутливістю до розчиненого кисню ($(4-5) \cdot 10^{-6}$ г/л), а також стабільністю і відтворюваністю характеристик в процесі електровідновлення O₂ і перспективні для використання в електрохімічному сенсорі кисню.

[1] N.Smironova, V.Vorobets, O.Linnik, et al. Surf. And Interface Analysis, 2010, 42,1205.

НОВІ ТЕТРАРНІ СПОЛУКИ У СИСТЕМАХ {Nd,Sm}–Ni–Al–Ge

Роман Дацко, Наталія Муць, Роман Гладішевський

Львівський національний університет імені Івана Франка,

кафедра неорганічної хімії, Львів, Україна

e-mail: roman.datsko@lnu.edu.ua

Наші попередні дослідження [1] вказали на утворення нової тетрарної сполуки $\text{Pr}_2\text{Ni}_{1,30}\text{Al}_{5,77}\text{Ge}_{4,93}$ (символ Пірсона $tP28$, просторова група $P4/nmm$, $a = 5,9039$, $c = 15,0902$ Å). Кристалічна структура цієї сполуки є близькоспорідненою до таких структур як $\text{Sm}_2\text{Ni}(\text{Ni}_{0,27}\text{Si}_{0,73})\text{Al}_4\text{Si}_6$ (СП $tP28$, ПГ $P4/nmm$, $a = 5,806$, $c = 14,845$ Å) [1] та $\text{Ce}_2\text{CoGa}_9\text{Ge}_2$ (СП $tP28$, ПГ $P4/nmm$, $a = 5,9582$, $c = 15,0137$ Å) [2]. Ці три структурні типи описують однаковими символом Пірсона ($tP28$), просторовою групою ($P4/nmm$), і також набором правильних систем точок (j^2fc^3a), а параметри елементарних комірок згаданих структур мають близькі значення. Різниця у структурах полягає в заповненні положень $2c$ ($1/4$ $1/4$ z) та $8j$ (x y z). Структурний тип $\text{Ce}_2\text{CoGa}_9\text{Ge}_2$ є повністю впорядкованим, тоді як у структурі сполуки $\text{Sm}_2\text{Ni}(\text{Ni}_{0,27}\text{Si}_{0,73})\text{Al}_4\text{Si}_6$ положення $2c$ займає статистична суміш атомів нікелю та алюмінію ($M = \text{Ni}_{0,27}\text{Si}_{0,73}$), а у структурі сполуки $\text{Pr}_2\text{Ni}_{1,30}\text{Al}_{5,77}\text{Ge}_{4,93}$ положення $2c$ та $8j$ зайняті атомами статистичних сумішей: $M1 = \text{Ni}_{0,125(12)}\text{Al}_{0,875(12)}$ та $M2 = \text{Ni}_{0,044(11)}\text{Al}_{0,224(11)}\text{Ge}_{0,732(11)}$, відповідно [1].

З метою пошуку ізоструктурних сполук нами синтезовано зразки складу $\text{Nd}_{15}\text{Ni}_9\text{Al}_{41}\text{Ge}_{35}$ та $\text{Sm}_{15}\text{Ni}_9\text{Al}_{41}\text{Ge}_{35}$ методом електродугового сплавлення з чистих полікристалічних простих речовин: Nd і Sm із вмістом основного компонента 99,89%, Ni – 99,99%, Al – 99,995% і Ge – 99,999%. Гомогенізаційний відпал зразків тривав 87 днів за температури 600 °C. Фазовий аналіз зразків провели на масивах рентгенівських дифракційних даних (дифрактометр ДРОН-2.0М з промінням Fe $K\alpha$). Уточнення вмісту фаз і параметрів структур здійснено методом Рітвельда за допомогою програми FullProf Suite.

За результатами рентгенофазового аналізу встановлено існування двох нових тетрарних фаз у системах Nd–Ni–Al–Ge та Sm–Ni–Al–Ge. Уточнення кристалічної структури нових тетрарних фаз проводили в моделі структурного типу $\text{Sm}_2\text{Ni}(\text{Ni}_{0,27}\text{Si}_{0,73})\text{Al}_4\text{Si}_6$ (СП $tP28$, ПГ $P4/nmm$). Параметри елементарної комірки для ізоструктурних сполук $\text{Nd}_2\text{Ni}_{1,27}\text{AlGe}_{6,73}$ та $\text{Sm}_2\text{Ni}_{1,27}\text{AlGe}_{6,73}$ зменшуються від сполуки з неодимом ($a = 5,8869(7)$, $c = 15,125(2)$ Å) до сполуки з самарієм ($a = 5,855(1)$, $c = 15,043(4)$ Å) внаслідок лантанної стиснення атомів рідкісноземельних металів.

Дослідження виконано в рамках науково-дослідної держбюджетної теми (номер державної реєстрації 0124U000989).

- [1] V. Humenchuk, R. Datsko, N. Muts, Ya. Tokaychuk, R. Gladyshevskii *Coll. Abs. XV Int. Conf. Cryst. Chem. Internet. Compd., Lviv, 2023.* – P. 88.
- [2] X.Z. Chen, S. Sportouch, B. Sieve, P.W. Brazis, C.R. Kannewurf, J.A. Cowen, R. Patschke, M.G. Kanatzidis, *Chem. Mater.* 10 (1998) 3202-3211.
- [3] M.A. Zhuravleva, M.G. Kanatzidis, *Inorg. Chem.* 47 (2008) 9471-9477.

ДОСЛІДЖЕННЯ ВЗАЄМОДІЇ СУЛЬФІДУ ЦИНКУ З ФТОРИДОМ ЄВРОПІУ СПЕКТРОСКОПІЧНИМИ МЕТОДАМИ

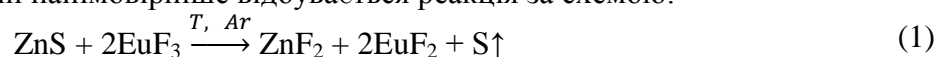
Віктор Зінченко¹, Ігор Магунов¹, Антон Бабенко^{1,2}, Павло Дога¹

¹Фізико-хімічний інститут ім. О.В. Богатського НАН України, м. Одеса, 65080, Україна

²Одеський національний університет ім. І.І. Мечникова, м. Одеса, 65026, Україна

e-mail: anton.octane.sr@gmail.com

Представлено результати дослідження сульфідів Цинку з фторидом Європію методом ІЧ спектроскопії пропускання, спектроскопії дифузного відбиття та фотолюмінесцентної спектроскопії у твердофазному стані. Метою роботи є з'ясування впливу оксидної домішки (ZnO) у сульфіді Цинку на характер взаємодії останнього з EuF_3 і подальшої нейтралізації впливу ZnO на базовий матеріал для інтерференційної оптики ІЧ діапазону спектру. За термодинамічними даними найімовірніше відбувається реакція за схемою:



Досліджено зразки ZnS, один з яких є вихідним продуктом самопоширюваного високотемпературного синтезу (СВС), а другий – продукт, позбавлений оксидної домішки.

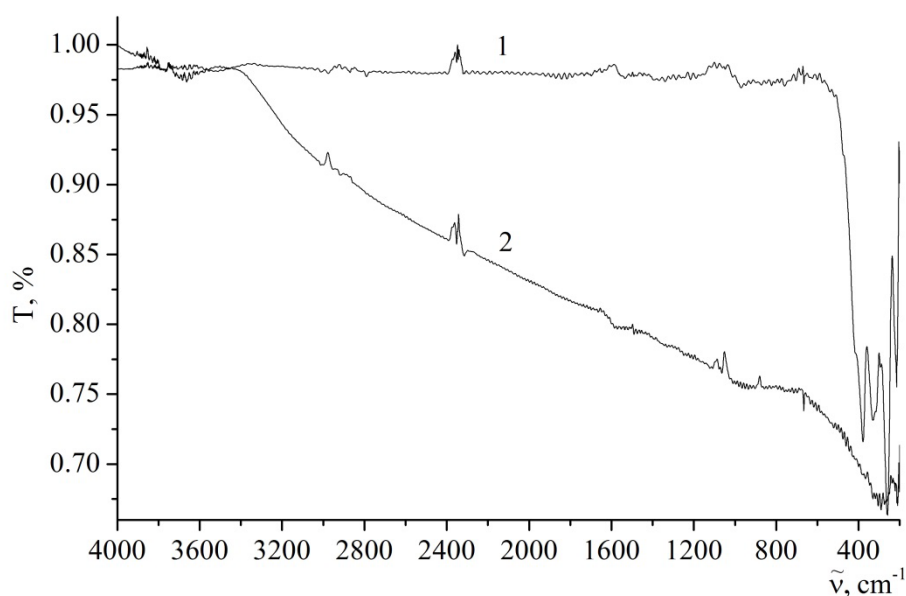


Рис. 1. ІЧ спектри пропускання системи ZnS(c) — EuF_3 механічної суміші (1) та зразку після термообробки (2)

За виглядом ІЧ кривих пропускання можна зробити висновок про глибоку взаємодію у системі. Зазначені матеріали жовтуватого (ZnS-ж) та сіруватого (ZnS-с) кольорів проявляють доволі відмінні спектральні характеристики як у вихідному стані, так і після високотемпературної (900°C , 1 год.) обробки у середовищі інертного газу. Одержані результати показують суттєві зміни у характері спектрів різного типу, при цьому найсуттєвіші з них відбуваються на стадії перетворення шихти – сплав (спек). Спостережувані зміни свідчать на користь перебігу хімічної реакції між компонентами системи, а також продуктами твердофазної реакції. Одержані зразки можуть бути використані як матеріал для тонкоплівкових покриттів.

ЗАКРІПЛЕНІ НА ПРИРОДНИХ НОСІЯХ МОНО- ТА БІМЕТАЛЬНІ КОМПОЗИЦІЇ В РЕАКЦІЇ ХЕМОСОРБЦІЙНО-КАТАЛІТИЧНОГО ОКИСНЕННЯ ДІОКСИДУ СУЛЬФУРУ

Тетяна Кіосе, Тетяна Ракитська, Людмила Раскола, Олеся Данюкіна

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова,
кафедра неорганічної хімії та хімічної освіти, Одеса, Україна

e-mail: kiose@onu.edu.ua

Діоксид сульфуру є найпоширенішим забруднювачем навколишнього середовища. Для зменшення його концентрації в повітрі застосовують різні хемосорбенти і каталізатори. Серед каталізаторів добре вивчені рідкофазні металокомплексні, а також оксидні та металеві, активні при високих температурах. Однак практично не досліджено нанесені на різні носії металокомплексні каталізатори, перевага яких полягає в простій технології отримання, можливості у широких межах варіювати активність за рахунок природи солей d-металів, носія та інших компонентів, що входять до складу каталітичних композицій. Особливий інтерес представляють подвійні системи, для яких у деяких випадках спільна присутність іонів металів приводить до синергізму їх дії. Для поглинання діоксиду сульфуру вивчені нанесені на природний бентоніт (П-Бент) і трепел (П-Тр) монометальні та біметальні композиції на основі хлоридних солей купруму(II), феруму(III) і паладію(II). Для біметальних систем з урахуванням $\tau_{ГПК}$ ($\tau_{ГПК}$ – час захисної дії сорбента) нами розрахований коефіцієнт синергізму K_S , як відношення значення $\tau_{ГПК}$ для біметальної композиції до суми цих показників для відповідних монометальних композицій. Для досліджених біметальних систем на основі природного бентоніту та трепелу значення $K_S > 1$, що вказує на синергізм дії Cu(II)-Fe(III) і Cu(II)-Pd(II) в реакції окиснення діоксиду сульфуру киснем (табл.).

Таблиця 1. Характеристики процесу окиснення діоксиду сульфуру киснем в присутності моно- та біметальних композицій на основі природного бентоніту і трепелу $C_{Cu(II)} = 5,9 \cdot 10^{-5}$, $C_{Fe(III)} = 1,0 \cdot 10^{-6}$, $C_{Pd(II)} = 2,72 \cdot 10^{-5}$ моль/г; $C_{SO_2}^0 = 150$ мг/м³; $U = 4,2$ см/с; $t = 20$ °C

Склад композиції	τ_0 , хв	$\tau_{ГПК}$, хв	$\tau_{1/2}$, с	$Q_{експ} \cdot 10^4$, моль SO ₂	K_S
П-Бент	10	15	2100	1,11	-
CuCl ₂ /П-Бент	15	25	3300	1,20	-
FeCl ₃ /П-Бент	25	30	3900	1,57	-
CuCl ₂ -FeCl ₃ /П-Бент	30	110	27600	10,20	2.0
PdCl ₂ /П-Бент	1	5	1800	0,77	-
PdCl ₂ -CuCl ₂ /П-Бент	5	140	26400	12,30	4.7
П-Тр	5	10	3900	0,96	-
CuCl ₂ /П-Тр	300	340	28800	11,9	-
FeCl ₃ /П-Тр	15	30	4800	1,86	-
CuCl ₂ -FeCl ₃ /П-Тр	400	480	37800	15,1	1,3
PdCl ₂ /П-Тр	15	30	5100	1,65	-
PdCl ₂ -CuCl ₂ /П-Тр	440	520	40200	16,4	1,1

Зіставлення активності композицій на основі двох різних за походженням носіїв дозволяє зробити такі висновки. Для монометальних композицій на основі природного трепелу показники, що характеризують захисні (τ_0 і $\tau_{ГПК}$), сорбційні ($Q_{експ}$) і кінетичні ($\tau_{1/2}$) параметри вище, ніж для зразків на основі природного бентоніту. Слід зазначити, що в присутності біметальних композицій на основі П-Тр процес перебігає без встановлення стаціонарного режиму і синергізм дії набагато менший, але це не перешкоджає біметальним композиціям на основі природного трепелу демонструвати більш високі захисні, кінетичні і адсорбційні параметри в процесі поглинання діоксиду сульфуру, що робить їх більш перспективними для застосування у засобах захисту органів дихання.

BEE POLLEN, A NATURAL WEALTH OF BIOLOGICALLY ACTIVE COMPOUNDS AS AN ADDITIVE TO COMPOZITES

Klaudia Kowalska¹, Ewa Skwarek¹

¹Maria Curie-Skłodowska University, Lublin, Poland

e-mail: klaudia.kowalska113@gmail.com

Composites based on green clay and bee pollen with additives of hydroxyapatite, silica and zinc oxide as new carriers of biologically active substances with possible applications in the cosmetics, pharmaceutical or medical industry.

Pollen grains are an essential source of protein for bees. This is an necessary element for their survival. It owes its properties to a composition rich in vitamins and antioxidants. Dried bee pollen is a valuable addition to the human diet, ensuring a harmonious balance of the body. We can see a wide range of colors changing from white and cream to dark brown, yellow, orange, red, or greenish, depending on the chemical composition [1]. Clays are widely used in various fields of industry, medicine, cosmetics, agriculture, etc. due to their naturalness and biocompatibility. They can be easily modified and mixed with other nanoparticles, so we can benefit from their rich properties [2].

The samples were prepared mechanochemically (Table 1). The ingredients were weighed and then ground for 3 minutes in a knife mill. The concentration of carotenoids, anthocyanins and the presence of vitamin C were determined using a UV-VIS spectrophotometer. The particle size was checked using a Mastersizer 2000 from Malvern using the static light scattering method. The zeta ζ potential was also measured using a Zetasizer Nano series (NanoZS90). IR spectra, XRD and ASAP studies were also performed.

Table 1. Percentage composition of composites

No	Green clay, %	Green clay burnt at 200°C, %	Hydroxyapatite, %	Silica, %	ZnO, %	Bee pollen, %
1	67	-	-	3	-	30
2	-	70	-	-	-	30
3	-	65	5	-	-	30
4	-	67	-	3	-	30
5	-	62	5	3	-	30
6	-	67	-	-	3	30

[1] L.B. Almeida-Muradian, L.C. Pamplona, S. Coimbra, O.M. Barth, J. Food Compos. Anal., 18 (2005).

[2] I. Protsak, V.V. Paientko, O.I. Oranska, Yu. I. Gornikov, P.A. Prokhnenko, S.A. Alekseev, L.M. Babenko/

СИНТЕЗ ТА ФОТОЕЛЕКТРОХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ПЛІВОК ОКСИДА ЗАЛІЗА

Геннадій Колбасов, Сергій Фоманюк, Ігор Русецький, Сергій Мальований

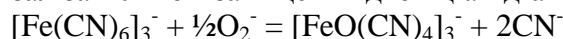
Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського НАН України, Київ, Україна

e-mail: gennadii.kolbasov@gmail.com

Оксид заліза є одним з багатообіцяючих матеріалів для фотоелектрохімічної конверсії води та отримання водню. $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ - напівпровідник n-типу з шириною забороненої зони 2.1 eV та високим коефіцієнтом поглинання світла ($\sim 10^4 \text{ см}^{-1}$), що дозволяє використовувати значну видиму частину сонячного спектру для окиснення води до O_2 [1]. Крім того, це відносно дешевий напівпровідник він екологічно безпечний, досить поширений і стійкий в нейтральних та лужних середовищах. На практиці його використання обмежено із-за лімітованої рухливості електронів ($10^{-2} \text{ см}^2\text{В}^{-1}\text{с}^{-1}$) [2] та коротким шляхом дифузії дірок (2-4) нм, час існування яких, як відомо, обмежено 10 пс [3]. Однак ці недоліки можна подолати за допомогою відповідного методу синтезу плівок Fe_2O_3 , що дозволяє мінімізувати опір перенесення заряду та зменшити втрати на рекомбінацію. Одним з шляхів зменшення рекомбінаційних втрат, викликаних дефектами ґратки та поверхневими дефектами, є отримання плівок оксиду заліза з крупно дисперсними кристалітами. При цьому важливим є вибір оптимальної товщини таких плівок, оскільки від неї залежить ефективність фотоелектрохімічних процесів, а саме величина фотоструму. Наявне дослідження спрямоване на перевірку ефективності методики комбінованого синтезу плівок $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ з берлінської лазурі порівняно з іншими відомими методами синтезу, зокрема електрохімічним отриманням Fe_2O_3 . Саме тому нами розроблено методику синтезу оксиду заліза шляхом окиснення плівок берлінської лазурі певної товщини в нітратному розплаві. Основа такого синтезу полягає в електрохімічному осадженні плівок берлінської лазурі заданої товщини з подальшим окисненням в розплаві нітрату до $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$. Такі розплави мають ряд переваг: низька температура плавлення (в основному використовувалася евтектика калійно-натрієвої селітри, плавиться при 218°C), що нижче за температуру термічного розкладання берлінської блакиті; змочування поверхні кристалітів і, таким чином, стабілізація наночасток від рекристалізації; високі окислювальні властивості, основність по Люксу за рахунок самодисоціації та утворення радикалу O_2^- :



Механізм утворення оксидів у нітратному розплаві наступний. Рушійна сила хімічного перетворення пов'язана з присутністю в розплаві аніону O_2^- . Рідина проникає в пористу частину гальванопокриття та основної форми O_2^- і реагує з ціанокомплексом на основі заліза шляхом заміщення двох ціанід-аніонів:



В цілому реакція протікає з виділенням тільки газів окисного характеру, домішок металевого заліза або карбіду заліза не виявлено:



Такий підхід дозволяє отримувати нанокристалічні плівки з структурою гематиту, подальша термообробка яких дозволяє отримувати кристаліти більшого розміру, що позитивно впливало на оптичні та фотоелектрохімічні властивості плівок $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, де квантовий вихід фотоструму складав 10-12%.

[1] A. Kay, I. Cesar, M. Gratzel, Journal of the American Chemical Society. 2006. V.128. P. 5714-15721.

[2] T. Lindgren, H. Wang, N. Beermann Solar Energy Materials and Solar Cells. 2002. V.71. P. 231-243.

[3] A. Joly, J. Williams, S. Chambers Journal of Applied Physics. 2006. V.99. P. 053521-053521.

НАТРІЙ, МАГНІЙ ТА КАРБОНАТ-ВМІСНІ КАЛЬЦІЙ ФОСФАТИ: СИНТЕЗ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ

Єва Комащенко¹, Наталія Струтинська¹, Ірина Гринюк², Дмитро Прохоренко²

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, Україна

² Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського", Київ, Україна

e-mail: evakoma0809@gmail.com

Актуальним та перспективним напрямком досліджень є розробка функціональних матеріалів медичного призначення. Для такої мети використання кальцій фосфатів апатитового типу ($\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$) та біфазних кальцій фосфатів (суміші $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ та $\beta\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2$) є оптимальним рішенням, оскільки характеризуються біосумісністю та забезпечують остеointegraцію синтетичного матеріалу. Важливою перевагою використання кальцій фосфатів являється їх гнучкий каркас, що дає змогу легувати йонами різного заряду та природи. В свою чергу це дозволяє покращувати функціональні властивості, а також розглядати синтетичні матеріали як носії мікроелементів, що відіграють важливу роль у процесах відновлення кісткової тканини. Зокрема введення йонів Mg^{2+} і Na^+ у катіонну підґратку кальцій фосфатів дозволяє покращувати клітинну адгезію, впливати на мінералізацію і наблизити склад синтетичного матеріалу до відповідного для неорганічної компоненти природної кістки. Серед аніонного модифікування найбільшої уваги привертає введення CO_3^{2-} -груп, що також містяться у мінеральній компоненті, а у синтетичних матеріалах впливають на біорезорбцію.

Метою наведеної роботи було дослідження особливостей комплексного легування кальцій фосфату різними кількостями катіонів $\text{Mg}^{2+} + \text{Na}^+$, при одночасному заміщенні у аніонній підґратці фосфату на карбонат та вплив модифікування на біоактивність фосфатів у модельованому розчині.

Зразки синтезовано методом співосадження з водних розчинів для загальних складів $\text{Ca}_{(10-y)}\text{Mg}_{a1,a2}\text{Na}_{b1,b2}(\text{PO}_4)_{6-z}(\text{CO}_3)_z(\text{OH})_2$ ($a1 = 0,1; 0,25; 0,5; 0,75$, $b1 = 0,25$); ($a2 = 0,25$, $b2 = 0,25; 0,5; 0,75; 1$) для $z = 0$ чи $0,5$ та нагріто до 500 і 600°C . За даними порошкової рентгенографії встановлено формування фаз апатитового типу (гексагональна сингонія, пр. гр. $R\bar{6}_3/m$) для карбонатвмісних зразків ($z = 0,5$), а у випадку зразків синтезованих без додавання карбонату ($z = 0$) по мірі збільшення кількості магнію у вихідних розчинах ($a1 \geq 0,25$) одержано біфазні кальцій фосфати (суміш фаз на основі $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ та $\beta\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ – тригональна сингонія, пр. гр. $R\bar{3}c$). Розрахунок параметрів комірок для яких та їх порівняння з відповідними вихідними кальцій фосфатами свідчить про їх легування мікроелементами. У ІЧ спектрах фаз апатитового типу положення коливальних мод карбонатних груп підтверджує реалізацію Б-типу ($\text{PO}_4^{3-} \rightarrow \text{CO}_3^{2-}$) заміщення у структурі. Розміри частинок модифікованих кальцій фосфатів, нагрітих до 500°C , становлять до 40 нм, а нагрівання до 600°C призводить до їх збільшення (до 80 нм).

Оцінка біоактивності *in vitro* синтезованих кальцій фосфатів та їх композицій у модельованому розчині складу наближеного до біологічного (при $\text{pH} = 7,4$ та температурі 37°C) полягала у періодичному контролі pH . Встановлено, що у випадку біфазних кальцій фосфатів pH збільшується на 30% впродовж перших 24 годин та залишається практично незмінним у посліуючі 96 годин, в той час, як для чистих карбонат вмісних фаз апатитового типу по мірі збільшення кількості катіонів магнію спостерігається підвищення pH від 50% (у перші 24 години) до 54% (впродовж наступних 96 годин). Одержані результати свідчать про вплив модифікування кальцій фосфатів мікроелементами на їх біоактивність, що може бути використано у розробках матеріалів для відновлення кісткової тканини.

Роботу виконано за фінансової підтримки НФДУ (реєстраційний номер №2023.03/0109).

НОВИЙ ПРЕДСТАВНИК РОДИНИ ФАЗ НОВОТНОГО У СИСТЕМІ Мо–Ru–Ge

Богдан Коротошин, Наталія Муць, Лев Аксельруд, Ярослав Токайчук, Роман Гладисhevський
Львівський національний університет імені Івана Франка,
кафедра неорганічної хімії, Львів, Україна
e-mail: bohdan.korotoshyn@lnu.edu.ua

У потрійній системі Мо–Rh–Ge встановлено існування двох тернарних сполук, структура яких належить до фаз Новотного [1]: $\text{Mo}_{6,2}\text{Rh}_{4,8}\text{Ge}_{18}$ (просторова група $I-42d$, символ Пірсона $tI116$, $a = 5,885$, $c = 52,62$ Å), $\text{Mo}_{11,75}\text{Rh}_{1,25}\text{Ge}_{22}$ ($I-42d$, $tI140$, $a = 5,922$, $c = 62,88$ Å). Фази Новотного (англ. Nowotny Chimney-Ladder) відносяться до класу композитних сполук, що складаються із двох підструктур: атома перехідного металу (T) IVB–VIII груп та p -елемента (M) переважно IIIA–VA груп. Обидві підкомірки тісно переплітаються та взаємодіють між собою, утворюючи гомологічну серію структур зрощення. З огляду на неспіввимірність підкомірок, у фазах Новотного спостерігається одновимірна модуляція вздовж осі c . Нарощенням структурних фрагментів обох підструктур можна отримати апроксиманти. Особливістю реалізації структури “Chimney-Ladder” в інтерметалічних сполуках є правило 14 валентних електронів, що припадають на один атом перехідного металу. Для деяких фаз Новотного концентрація валентних електронів (VEC_T) може набувати значень близьких до 14 [2]. Завдяки унікальності кристалічної структури, фази Новотного є перспективними матеріалами, що можуть використовуватись у термоелектричних пристроях. Наприклад, у дослідженнях термоелектричних властивостей бінарної фази $\text{V}_{17}\text{Ge}_{31}$ з нестачею валентних електронів ($VEC_T = 12,3 < 14$) автори праці [3] пропонують замінити d -елемент VB групи елементами VI–VIII груп, на кшталт Мо та Ru з більшою кількістю валентних електронів, для зменшення діркових носіїв заряду та максимізації термоелектричних властивостей.

З метою пошуку нових представників фаз Новотного у потрійній системі Мо–Ru–Ge, ми синтезували зразок складу $\text{Mo}_{7,9}\text{Ru}_{14,8}\text{Ge}_{77,3}$ методом електродугового топлення шихти чистих компонентів. Після гомогенізаційного відпалу впродовж 70 днів при температурі 600 °С, наступними етапами дослідження були рентгенофазовий та рентгеноструктурний аналізи (STOE Stadi P, $\text{Cu } K\alpha_1$), енергодисперсійна рентгенівська спектроскопія (Tescan Vega 3 LMU). За результатами аналізу зразок $\text{Mo}_{7,9}\text{Ru}_{14,8}\text{Ge}_{77,3}$ виявився двофазним: він містить нову тернарну сполуку $\text{Mo}_{2,5}\text{Ru}_{5,5}\text{Ge}_{13}$ (74,13 мас. %) та просту речовину – германій (25,87 мас. %).

Використовуючи концепцію модульованих композитних кристалічних структур у (3+1)-вимірному надпросторі, розроблено модель кристалічної структури в межах надпросторової групи P : $I4_1/amd(00ss)$: $P4/nnc(q0q0)$. У рамках цієї моделі і відповідно до попереднього підходу [4], кристалічна структура представлена як взаємопроникнення двох підструктур: (Mo,Ru) (ПГ $I4_1/amd$) і германію (ПГ $P4/nnc$), реалізованих в одній надпросторовій групі $I4_1/amd(00\gamma)00ss$. Співвідношення параметрів двох підкомірок сполуки $\text{Mo}_{2,5}\text{Ru}_{5,5}\text{Ge}_{13}$ визначають z -компоненту вектора модуляції ($\gamma = 1,6246$). Для уточнення кристалічної структури використовували програмний пакет WinCSD [5].

Апроксимант сполуки $\text{Mo}_{2,5}\text{Ru}_{5,5}\text{Ge}_{13}$ уточнено в просторовій групі $P-4c2$, символ Пірсона $tP84$, параметри комірки $a = 5,8320(2)$, $c = 37,616(2)$ Å, структурний тип $\text{Zr}_8\text{Bi}_{13}$. Концентрація валентних електронів на один атом перехідного металу для отриманої сполуки становить $VEC_T = 13,9$.

- [1] F.E. Rohrer, H. Lind, L. Eriksson, A.K. Larsson, S. Lidin, *Z. Kristallogr.* 215 (2000) 650-660, <https://doi.org/10.1524/zkri.2000.215.11.650>.
- [2] E. Parthé, L. Gelato, B. Chabot, M. Penzo, K. Cenzual, R. Gladyshevskii, *Springer-Verlag* 1-4 (1993) 1596, <https://doi.org/10.1007/978-3-662-02909-1>.
- [3] H. Hamada, Y. Kikuchi, K. Hayashi, Y. Miyazaki, *J. Mater. Res.* 45 (2016) 1365-1368, <https://doi.org/10.1007/s11664-015-4036-6>.
- [4] A. Yamamoto, *Acta Crystallogr.* 49 (1993) 831-846, <https://doi.org/10.1107/s0108767393004404>.
- [5] L. Akselrud, Y. Grin, WinCSD: software package for crystallographic calculations (Version 4) / *J. Appl. Crystallogr.* 47 (2014) 803-805.

НОВІ ТЕТРАРНІ ФАЗИ ЗІ СТРУКТУРОЮ ТИПУ CrB

Христина Місько, *Наталія Муць*, Роман Гладішевський
Львівський національний університет імені Івана Франка,
кафедра неорганічної хімії, Львів, Україна
e-mail: nataliya.muts@lnu.edu.ua

Чотирикомпонентну систему Tb–Zr–Al–Si досліджували лише на предмет утворення сполук: у системі реалізуються дві фази зі структурою типу CrB (символ Пірсона *oS8*, просторова група *Cmcm*): $(\text{Tb}_{0,03}\text{Zr}_{0,97})(\text{Al}_{0,22}\text{Si}_{0,78})$ та $(\text{Tb}_{0,70}\text{Zr}_{0,30})(\text{Al}_{0,17}\text{Si}_{0,83})$ [1]. З метою подальшого дослідження цієї системи ми синтезували серію зразків методом електродугового сплавлення з подальшою їхньою гомогенізацією за температури 600 °C впродовж 3 місяців. Масиви рентгенівських дифракційних даних від полікристалічних зразків отримано на дифрактометрах ДРОН-2,0 (проміння Fe K α) та Panalytical X'Pert (проміння Cu K α_1). Рентгеноспектральний аналіз проводили за допомогою скануючого електронного мікроскопа Tescan Vega 3 LMU. За результатами рентгенофазового, рентгеноструктурного та енергодисперсійного рентгеноспектрального аналізів у системі Tb–Zr–Al–Si встановлено існування нових тетрарних складів, при яких утворюється фаза з ромбічною структурою типу CrB (СП *oS8*, ПГ *Cmcm*): $(\text{Tb}_{0,43}\text{Zr}_{0,57})(\text{Al}_{0,40}\text{Si}_{0,60})$, $(\text{Tb}_{0,77}\text{Zr}_{0,23})(\text{Al}_{0,04}\text{Si}_{0,56})$ та $(\text{Tb}_{0,81}\text{Zr}_{0,19})(\text{Al}_{0,23}\text{Si}_{0,77})$. Атоми статистичної суміші Tb/Zr займають положення атомів Cr, а суміш атомів меншого розміру (Al/Si) – положення атомів В. У таблиці 1 наведені параметри елементарної комірки для різних складів фази зі структурою типу CrB визначених у синтезованих нами зразках, а також параметри сполук відомих з літератури: бінарних (ZrSi, ZrAl), твердого розчину на основі сполуки ZrSi ($\text{ZrAl}_x\text{Si}_{1-x}$), тернарної ($\text{Tb}(\text{Al}_{0,15}\text{Si}_{0,85})$) та тетрарних ($(\text{Tb}_{0,03}\text{Zr}_{0,97})(\text{Al}_{0,22}\text{Si}_{0,78})$, $(\text{Tb}_{0,70}\text{Zr}_{0,30})(\text{Al}_{0,17}\text{Si}_{0,83})$). Параметри елементарної комірки для цих складів закономірно збільшуються при збільшенні вмісту тербію у статистичній суміші (Tb/Zr), що можна пояснити заміщенням менших за розміром атомів цирконію на більші атоми Tb.

Таблиця 1. Параметри елементарної комірки для різних складів фази зі структурою типу CrB (СП *oS8*, ПГ *Cmcm*) у системі Tb–Zr–Al–Si

Зразок	Склад (фаза)	<i>a</i> , Å	<i>b</i> , Å	<i>c</i> , Å	Літ.
	ZrAl		3,407	10,776	4,284
ZrSi		3,762	9,912	3,754	2
$\text{ZrAl}_x\text{Si}_{1-x}$ (<i>x</i> = 0-0,5)		3,762-3,745	9,912-9,863	3,754-3,745	2
$(\text{Tb}_{0,03}\text{Zr}_{0,97})(\text{Al}_{0,22}\text{Si}_{0,78})$		3,78240	10,01640	3,77950	1
$\text{Tb}_{17,5}\text{Zr}_{32,5}\text{Al}_{9,8}\text{Si}_{40,2}$	$(\text{Tb}_{0,15}\text{Zr}_{0,85})\text{Si}$	3,836(3)	10,022(8)	3,783(3)	*
$\text{Tb}_{22,2}\text{Zr}_{33,3}\text{Al}_{11,1}\text{Si}_{33,4}$	$(\text{Tb}_{0,43}\text{Zr}_{0,57})(\text{Al}_{0,40}\text{Si}_{0,60})$	3,8941(2)	10,158(5)	3,749(2)	*
	$(\text{Tb}_{0,70}\text{Zr}_{0,30})(\text{Al}_{0,17}\text{Si}_{0,83})$	4,16300	10,42300	3,85430	1
$\text{Tb}_{35}\text{Zr}_{15}\text{Al}_{8,5}\text{Si}_{41,5}$	$(\text{Tb}_{0,77}\text{Zr}_{0,23})(\text{Al}_{0,04}\text{Si}_{0,56})$	4,170(2)	10,441(4)	3,836(2)	*
$\text{Tb}_{25}\text{Zr}_{25}\text{Al}_{12,5}\text{Si}_{37,5}$	$(\text{Tb}_{0,81}\text{Zr}_{0,19})(\text{Al}_{0,23}\text{Si}_{0,77})$	4,209(2)	10,491(5)	3,840(2)	*
	$\text{Tb}(\text{Al}_{0,15}\text{Si}_{0,85})$	4,2715	10,5595	3,8393	1
$\text{Tb}_{22,2}\text{Zr}_{33,4}\text{Al}_{22,2}\text{Si}_{22,2}$	$\text{Tb}(\text{Al}_{0,59}\text{Si}_{0,41})$	4,281(2)	10,772(5)	3,842(1)	*

Примітка: * – результати цієї роботи

На основі порівняння параметрів елементарної комірки нових складів тетрарної фази та параметрів сполук, приведених в літературі, ймовірно, що у чотирикомпонентній системі Tb–Zr–Al–Si утворюється протяжний твердий розчин зі структурою типу CrB. Область гомогенності простягається принаймні від складу $(\text{Tb}_{0,03}\text{Zr}_{0,97})(\text{Al}_{0,22}\text{Si}_{0,78})$ до складу $(\text{Tb}_{0,81}\text{Zr}_{0,19})(\text{Al}_{0,23}\text{Si}_{0,77})$.

Дослідження виконано в рамках науково-дослідної держбюджетної теми (номер державної реєстрації 0124U000989). Н. Муць дякує за фінансову підтримку програмі Simons Foundation (Award Number: 1290588).

[1] N. Muts, R. Gladyshevskii, *Z. Anorg. Allg. Chem.*, 632 (2006). Vol. 632. P. 2345-2349.

[2] P. Villars, K. Cenzual (Eds.), *Pearson's Crystal Data: Crystal Structure Database for Inorganic Compounds*, ASM International: Materials Park, Ohio, USA, Release 2023/24.

ТВЕРДІ РОЗЧИНИ У СИСТЕМІ $\text{GdNiIn}_{1-x}\text{Sn}_x$

Г. Ничипорук, Я. Вільчинська, М. Горяча, А. Зелінський, В. Заремба

Львівський національний університет імені Івана Франка,

вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

e-mail: halyna.nychporuk@lnu.edu.ua

З метою пошуку нових матеріалів методами рентгенівського фазового та, частково, локального рентгеноспектрального аналізів вивчено взаємодію компонентів у системі GdNiIn-GdNiSn у повному концентраційному інтервалі за температури 870 К.

Для досліджень виготовили одинадцять зразків сплавленням шихти з компактних металів (чистотою не менше 0,998 масової частки) в електродуговій печі з мідним водоохолоджувальним подом і невитрачувальним вольфрамовим електродом в атмосфері очищеного аргону. Сплави, поміщені у вакуумовані кварцові ампули, відпалювали при 870 К протягом місяця з подальшим загартовуванням у холодній воді без розбивання ампул. Відпалені, як і литі, зразки стійкі до дії навколишнього середовища протягом тривалого часу.

Масиви експериментальних відбиттів отримали з використанням дифрактометра ДРОН 2.0М (Fe $K\alpha$ -випромінювання). Розрахунки для фазового аналізу і структурних уточнень проводили з використанням пакетів програм Powder Cell та FullProf. Мікроструктурні дослідження мікрошліфів виконали на скануючому електронному мікроскопі TescanVega 3 LMU з детектором Oxford Instruments SDD X-Max^{N20}.

Встановлено обмежену розчинність p -елемента (Sn та In) у вихідних сполуках еквіатомного складу, уточнено межі та параметри елементарних комірок твердих розчинів заміщення при складах: $\text{GdNiIn}_{1,0-0,4}\text{Sn}_{0-0,6}$ (СТ ZrNiAl; ПГ $P-62m$; $a = 0,74526(5)–0,74564(7)$; $c = 0,38364(3)–0,38343(5)$ нм) і $\text{GdNiSn}_{1,0-0,8}\text{In}_{0-0,2}$ (СТ TiNiSi; ПГ $Pnma$; $a = 0,72241(7)–0,72253(10)$; $b = 0,44835(5)–0,44870(7)$; $c = 0,76806(9)–0,76916(12)$ нм).

Взаємозаміщення індію на станум підтверджено структурним уточненням монокристала, отриманого з відпаленого зразка складу $\text{Gd}_{0,33}\text{Ni}_{0,33}\text{In}_{0,26}\text{Sn}_{0,07}$. Структуру уточнено з використанням пакету програм JANA 2006 [1] в рамках моделі структурного типу ZrNiAl [2]: $\text{GdNiIn}_{0,79}\text{Sn}_{0,21}$; ПГ $P-62m$; $hP9$, $a = 0,74618(3)$; $c = 0,38291(2)$ нм; $V = 0,18464(1)$ нм³; $R_1 = 0,0157$ $wR_2 = 0,0364$. Склад статистичної суміші (In, Sn) зафіксовано згідно вихідного складу зразка та результатів EDX аналізу.

Взаємодія компонентів у дослідженій системі є подібною до вивчених раніше споріднених систем з лантаном і церієм [2].

- [1] Petříček V., Dušek M., Palatinus L. Crystallographic Computing System JANA 2006: General features. Z. Kristallogr. 2014. Vol. 229, No 5. P. 345-352.
- [2] Крип'якевич П.І., Марків В. Я., Мельник Е. В. Кристалічна структура сполук ZrNiAl, ZrCuGa і їх аналогів // Допов. АН УРСР, Сер. А. 1967. С. 750–753.
- [3] Nychporuk G., Dominyuk N., Muts I., Zelinskiy A., Pöttgen R., Zaremba V. $\text{LaNiIn}_{1-x}\text{Sn}_x$ and $\text{CeNiIn}_{1-x}\text{Sn}_x$ solid solutions at $T = 870$ K // Z. Naturforsch. B. 2023. Vol. 78, No. 7-8. P. 427-433.

РОЗЧИННІСТЬ Ni У СПОЛУЦІ Ti₅Si₃

Світлана Пукас, Наталія Семусь, Роман Гладішевський
Львівський національний університет імені Івана Франка,
кафедра неорганічної хімії, Львів, Україна
e-mail: svitlana.pukas@lnu.edu.ua

Сплави на основі силіцидів тугоплавких металів Mo, Nb, Ti набули широкого значення у зв'язку із застосуванням в автомобільній та авіаційній промисловості для виготовлення двигунів, що працюють при високих температурах. Інтерес до цих сполук пояснюється їхньою високою плавкістю, помірною щільністю, стійкістю до окиснення і здатністю піддаватися пластичній деформації при підвищенні температури.

Серед п'яти силіцидів титану привабливим для дослідження є Ti₅Si₃, який утворюється з розплаву при температурі 2130°C, що є вищою ніж у MoSi₂ (2020°C), та щільністю 4,41 г/см³, що є нижчою ніж у MoSi₂ (6,30 г/см³). Введення у сплави легуючих елементів сприяє одержанню сплавів заданого хімічного складу і структури з необхідними властивостями. Легуванням змінюють міцність і пластичність сплавів, підвищують їхню стійкість проти зношування, жароміцність, корозійну стійкість, магнітні властивості. Максимальна концентрація легуючої добавки у титанових сплавах становить 32 мас.% та відповідає Ni.

Метою дослідження є встановлення межі розчинності Ni у Ti₅Si₃ та визначення характеру твердого розчину. З огляду на близькі радіуси атомів Ni ($r = 1,24 \text{ \AA}$) та Si ($r = 1,32 \text{ \AA}$) можливе утворення твердого розчину заміщення частини атомів Si на атоми Ni, або ж твердого розчину заміщення частини атомів Ti на атоми Ni через те, що кристалічна структура відповідних простих речовин належить до одного типу – Cu. Також є ймовірність утворення твердого розчину включення атомів Ni у порожнечі структури сполуки Ti₅Si₃.

Синтезовано серію сплавів Ti_{62,5}Ni_xSi_{37,5-x} ($x = 0, 2,5, 5,0, 7,5, 10,0, 12,5$) сплавленням компонентів в електродуговій печі та гомогенізовано їх при 600°C. Для зразків знято масиви рентгенівських порошкових дифракційних даних на дифрактометрі STOE Stadi P (проміння Cu K α_1). В результаті рентгенофазового аналізу сплавів визначено, що розчинність Ni у бінарній сполуці Ti₅Si₃ становить 5,5-7 ат.%. Сплави Ti_{62,5}Si_{37,5}, Ti_{62,5}Ni_{2,5}Si₃₅ та Ti_{62,5}Ni_{5,0}Si_{32,5} виявилися однофазними та містили фазу Ti₅(Ni,Si)₃. Сплав із дещо більшим вмістом Ni (Ti_{62,5}Ni_{7,5}Si₃₀) вже містив невелику кількість (10 мас.%) другої фази (Ti₂Ni), проте параметри елементарної комірки фази Ti₅(Ni,Si)₃ у цьому сплаві ще зменшуються ($a = 7,4415(1)$, $c = 5,1402(1) \text{ \AA}$) у порівнянні із параметрами комірки фази Ti₅(Ni,Si)₃ у сплаві Ti_{62,5}Ni₅Si_{32,5} ($a = 7,445(1)$, $c = 5,141(1) \text{ \AA}$), тобто гранична межа розчинності Ni у сполуці Ti₅Si₃ у сплаві Ti_{62,5}Ni₅Si_{32,5} ще не досягнута. Якщо аналізувати параметри елементарної комірки фази Ti₅(Ni,Si)₃ у двох інших двофазних сплавах, Ti_{62,5}Ni₁₀Si_{27,5} ($a = 7,442(3)$, $c = 5,139(2) \text{ \AA}$) та Ti_{62,5}Ni_{12,5}Si₂₅ ($a = 7,440(1)$, $c = 5,140(1) \text{ \AA}$), то вони практично відповідають параметрам комірки фази Ti₅(Ni,Si)₃ у сплаві Ti_{62,5}Ni_{7,5}Si₃₀, тобто граничним значенням параметрів елементарної комірки твердого розчину Ti₅(Ni,Si)₃. Спостерігається поступове заміщення атомів Si на атоми Ni, тобто твердий розчин Ti₅(Ni,Si)₃ є розчином заміщення. Рентгенівським методом порошку проведено уточнення параметрів структури цього твердого розчину у сплаві Ti_{62,5}Ni_{7,5}Si₃₀ (уточнений склад Ti₅Ni_{0,219(2)}Si_{2,781(2)}).

Таблиця 1. Координати та ізотропні параметри зміщення атомів у структурі сполуки Ti₅(Ni,Si)₃ (структурний тип Mn₅Si₃, символ Пірсона *hP16*, просторова група *P6₃/mcm*, $a = 7,4415(1)$, $c = 5,1402(1) \text{ \AA}$, $M = 0,927(2)\text{Si} + 0,073(2)\text{Ni}$).

Атом	ПСТ	x	y	z	$B_{\text{ізо}}, \text{ \AA}^2$
Ti1	6g	0,2481(2)	0	1/4	0,86(4)
Ti2	4d	1/3	2/3	0	0,86(4)
<i>M</i>	6g	0,6068(3)	0	1/4	1,12(5)

С. Пукас та Н. Семусь вдячні Simons Foundation (Grant ID 1290588) за фінансову підтримку.

ОДЕРЖАННЯ ТА ВЛАСТИВОСТІ МОНОКРИСТАЛІВ Tl_4SnS_4 , Tl_2SnS_3 ТА Tl_4SnS_3
*Мар'ян Сабов^{1,2}, Ігор Барчій¹, Міхал П'ясецькі³, Тетяна Малаховська¹, Артем Погодін¹,
 Михайло Пон¹, Вікторія Сабов¹, Михайло Філен^{1,2}*

¹ ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород, Україна

² Закарпатський угорський інститут ім. Ф. Ракоці II, Берегове, Україна

³ Університет Яна Длугоша в Ченстохові, Ченстохова, Польща;

e-mail: marian.sabov@uzhnu.edu.ua

Однією із актуальних проблем сталого розвитку є більш широке використання альтернативних джерел енергії. До тих, які мінімалізують втручання в оточуюче середовище відносяться засновані на явищах безпосереднього перетворення світлової (фотовольтаїка) та теплової (термоелектрика) енергії в електричну. Спільним для цих явищ є те, що їх значна ефективність досягається при використанні напівпровідникових матеріалів. Враховуючи відносно низький к.к.д. фото- та термоелектричних перетворювачів важливою проблемою лишається пошук ефективних напівпровідникових матеріалів з фотовольтаїчною та термоелектричною функцією, що становило мету даного дослідження, а саме дослідити оптичні та термоелектричні властивості монокристалічних зразків Tl_4SnS_4 , Tl_2SnS_3 та Tl_4SnS_3 .

Згідно літературних даних всі три сполуки плавляться конгруентно, а відтак можливим є одержання їх монокристалів методом спрямованої кристалізації із розплаву методом Бріджмена. Однак, при дослідженні характеру фізико-хімічної взаємодії у системі $Tl - Sn - S$ було встановлено, що сполука Tl_4SnS_3 утворюється за перитектичною реакцією: $L + Tl_2S \leftrightarrow Tl_4SnS_3$. У зв'язку із цим, монокристали Tl_4SnS_3 були отримані двома шляхами: із розплаву-розчину, що відповідає складу вихідної шихти на гілці первинної кристалізації Tl_4SnS_3 та із шихти стехіометричного складу. Фазовий склад та результати ДТА для обидвох виявилися ідентичними. Монокристали Tl_4SnS_4 та Tl_2SnS_3 вирощували із шихти стехіометричного складу. У всіх випадках ріст здійснювали у конусоподібних вакуумованих кварцових ампулах. Температура у гарячій зоні ростової печі була 50 К вище температур плавлення, а у зоні росту порядку 480 К. Швидкість переміщення фронту кристалізації становив 0.1-0.3 мм/год; аксіальний градієнт температури в зоні кристалізації –2-4 К/мм; відпал у зоні кристалізації при температурі 480-573 К проводили протягом 3-х діб, а охолодження до кімнатної температури із швидкістю не більше 30 К/год.

Методом Рітвельда було досліджено кристалічну структуру отриманих кристалів за порошкограмми із використання структурних моделей відомих з літературних джерел. Визначені параметри елементарних комірок представлені у таблиці 1.

Таблиця 1. Параметри елементарної комірки кристалів Tl_4SnS_3 , Tl_4SnS_4 , Tl_2SnS_3

Сполука	ПГ	Розраховані				Літературні			
		a, Å	b, Å	c, Å	β	a, Å	b, Å	c, Å	β
Tl_4SnS_3	P4/ncc	8.3242	8.3242	12.6387	–	8.305	8.305	12.647	–
Tl_4SnS_4	P2 ₁ /c	8.3517	8.2369	15.3204	103.6	8.395	8.280	15.398	103.7
Tl_2SnS_3	C2/m	23.0793	3.8418	7.3955	94.0	23.030	3.834	7.379	94.1

Було проведено першопринципні квантово-хімічні розрахунки в межах теорії функціоналу густини, за якими встановлено електронну структуру та визначено ширини забороненої зони, що становили близько 1.59 (Tl_4SnS_4), 0.78 (Tl_2SnS_3) та 0.10 (Tl_4SnS_3) eV. Визначені по спектрам поглинання за допомогою побудови Тауца значення ширин забороненої зони виявилися значно вище: 1.94 (Tl_4SnS_4), 1.67 (Tl_2SnS_3) та 1.00 (Tl_4SnS_3) eV.

Дослідження температурної залежності коефіцієнту Зеебека показало, що всі кристали є напівпровідниками n-типу вище кімнатної температури. Однак для Tl_4SnS_3 характерним є зміна типу провідності при близько 450 К. Максимальні значення термоелектричної добротності досягаються близько 490 К для Tl_4SnS_4 та Tl_2SnS_3 і 425 К для Tl_4SnS_3 , а значення безрозмірної добротності становлять 0.9 – 1.0.

ФАЗИ ЗІ СТРУКТУРОЮ ПЕРОВСКІТУ У СИСТЕМАХ {Pr,Sm}–Pd–Ge
Катерина Степанович, Оксана Заремба, Ярослав Токайчук, Роман Гладішевський
 Львівський національний університет імені Івана Франка,
 кафедра неорганічної хімії, Львів, Україна
 e-mail: kateryna.stepanovych@lnu.edu.ua

Перовскіти – відома родина сполук, які описуються загальною формулою ABX_3 і кристалізуються з кубічною структурою типу $CaTiO_3$ або його похідних. Фази зі структурою перовскіту володіють широким спектром унікальних властивостей, завдяки яким їх застосовують у багатьох галузях, зокрема для виготовлення магнітних датчиків, оптичних пристроїв, лазерів, надпровідників, каталізаторів, складових сонячних панелей, електродів акумуляторів тощо. Структурний тип $CaTiO_3$ є одним із найбільш поширених серед складних неорганічних речовин. Згідно з базою даних Pearson's Crystal Data переважна більшість фаз зі структурою кубічного перовскіту містить атоми неметалічних елементів, в тому числі кисню, галогенів, нітрогену, карбону, бору, і, навіть, гідрогену. Відомості ж про інтерметалічні перовскітні фази є лише у 15 потрійних системах. Зважаючи на те, що у літературі повідомляється про існування фази зі структурою типу $CaTiO_3$ у системі Sm–Pd–Ge, метою нашої роботи є пошук сполук зі структурою перовскіту серед інтерметалідів, зокрема в системах R–Pd–Ge, де R – рідкісноземельний метал. Роботу розпочато із дослідження Pr-вмісної системи.

Сплави складів $RPd_3Ge_{0,5}$ (R = Pr та Sm) синтезували методом електродугового сплавлення вихідних компонентів (R ≥ 99,8 мас. %, Pd ≥ 99,95 мас. %, Ge ≥ 99,99 мас. %) у печі з мідним подом і вольфрамовим електродом в атмосфері очищеного аргону. Відпал проводили за 600°C впродовж одного місяця. Склади контролювали методом енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії, виконаної на скануючому електронному мікроскопі TESCAN Vega3 LMU. Рентгенівські дані отримували на дифрактометрі STOE Stadi P (проміння Cu $K\alpha_1$, Ge111-монокроматор). Для аналізу кристалічної структури застосовували метод Рітвельда з використанням пакету програм FullProf Suite.

Нами підтверджено утворення перовскітної фази у системі Sm–Pd–Ge за температури 600°C. Результати уточнення кристалічної структури цієї фази представлено в табл. 1. Показано, що на основі бінарної сполуки $SmPd_3$ (СТ Cu_3Au) утворюється одночасно як твердий розчин заміщення атомів Pd на атоми Ge, так і часткового включення атомів Ge в октаедричні порожнини $[Pd_6]$ вихідної структури. На користь останнього свідчить також збільшення параметру елементарної комірки тернарного германіду у порівнянні з бінарною сполукою $SmPd_3$.

Таблиця 1. Результати уточнення кристалічної структури перовскітної фази $Sm(Pd_{2,28(9)}Ge_{0,72(9)})Ge_{0,11(1)}$ у зразку вихідного складу $SmPd_3Ge_{0,5}$, відпаленого за 600°C (СТ $CaTiO_3$, СП $cP5$, ПГ $Pm-3m$, $a = 4,2093(5)$ Å, $R_B = 0,0903$)

Атом	ПСТ	Координати атомів			Зайнятість положення	$B_{ізо.}$ (Å ²)
		x	y	z		
Pd	3d	1/2	0	0	0,76(3)	0,9(2)
Ge					0,24(3)	
Sm	1b	1/2	1/2	1/2	1	0,8 (3)
Ge	1a	0	0	0	0,11(1)	1,3 (3)

У системі Pr–Pd–Ge за температури 600°C існування перовскітної фази виявлено вперше. Формується ізоструктурна сполука $PrPd_3Ge_{0,22(2)}$: СТ $CaTiO_3$, СП $cP5$, ПГ $Pm-3m$, $a = 4,2452(4)$ Å, $R_B = 0,0535$.

Дослідження виконано в рамках науково-дослідної держбюджетної теми (номер державної реєстрації 0124U000989). О. Заремба та Я. Токайчук дякують за фінансову підтримку програми Simons Foundation (Award Number: 1290588).

СИНТЕЗ ТА АНТИМІКРОБНІ ВЛАСТИВОСТІ ЦИРКОНІЙ ТА ЦИНК-ВМІСНИХ КАЛЬЦІЙ ФОСФАТІВ АПАТИТОВОГО ТИПУ

*Наталія Струтинська¹, Лідія Дремова¹, Ірина Гринюк²,
Ольга Василюк³, Микола Слободяник¹*

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, Україна

²Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського", Київ, Україна

³ Інститут мікробіології і вірусології ім. Д.К. Заболотного НАН України, Київ, Україна
e-mail: n.strutynska@knu.ua

Кальцій фосфати апатитового типу ($\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$) завдяки їх високій біосумісності і біоактивності привертають значний інтерес у розробках ефективних матеріалів для відновлення кісткової тканини. Властивості таких матеріалів можуть бути покращені шляхом легування структури кальцій фосфату мікроелементами або заміщенням у аніонній підґратці чи створенням композитів на їх основі з природними чи синтетичними полімерами чи неорганічними оксидами полівалентних металів.

Метою роботи було синтез цирконій, цинк та карбонатвмісних кальцій фосфатів та дослідження впливу їх модифікування на антимікробні властивості щодо умовно патогенних мікроорганізмів *Staphylococcus aureus* та *Pseudomonas aeruginosa*.

Синтез зразків здійснено з водних розчинів за мольних співвідношень: $\text{Ca}^{2+} : \text{Zr}^{4+} : \text{Zn}^{2+} : \text{PO}_4^{3-} = (9-x) : 0.5 : x : 6$, ($x = 0, 0.5$) та $\text{Ca}^{2+} : \text{Zr}^{4+} : \text{Zn}^{2+} : \text{PO}_4^{3-} : \text{CO}_3^{2-} = (8.75-x) : 0.5 : x : 5.5 : 0.5$ ($x = 0.1, 0.5$), з подальшим нагріванням зразків до 500°C . За даними порошкової рентгенографії встановлено формування монофазних кальцій фосфатів, що належать до гексагональної сингонії (просторова група $R\bar{6}_3/m$), а параметри комірок корелюють з кількістю легуючих катіонів у їх складі. Розміри частинок розраховано за рівнянням Шеррера знаходяться в межах значень 30–40 нм. В ІЧ спектрах синтезованих кальцій фосфатів присутні коливальні моди фосфатних тетраєдрів, ОН-групи, сорбованої води та CO_3^{2-} -груп. Положення останніх свідчить про реалізацію часткового заміщення фосфату на карбонат (Б-тип) у структурі кальцій фосфату апатитового типу.

Досліджено антимікробну активність синтезованих цирконій, цинк та карбонатвмісних кальцій фосфатів апатитового типу у кількостях 5–20mM щодо грампозитивних (*S. aureus*) та грамнегативних (*P. aeruginosa*) бактерій. Встановлено, що легування кальцій фосфату катіонами Zr^{4+} (до 5мас%) сприяє зменшенню виживаності штамів до 10% в більшій мірі грампозитивних *S. aureus*. Додаткове легування катіонами цинку дозволяє дещо покращити цю характеристику. Найвищу антимікробну активність щодо обох штамів (*S. aureus* та *P. Aeruginosa*) встановлено для модифікованого кальцій фосфату апатитового типу, що містив 4,5 мас% Zr^{4+} та 3мас% Zn^{2+} . А саме, десятикратне зниження виживаності у порівнянні з контролем спостерігалось вже через 24 год. інкубації при додаванні модифікованого фосфату у кількості 20 mM.

Таким чином, одержані результати вказують на перспективність використання легованих цирконієм та цинком кальцій фосфатів апатитового типу для розробки біоматеріалів зі спеціальною антимікробною активністю.

Роботу виконано за фінансової підтримки НФДУ (реєстраційний номер №2023.03/0109).

СИНТЕЗ ТА ЛЮМІНЕСЦЕНТНІ ВЛАСТИВОСТІ ФОСФАТНО-БОРАТНОГО СКЛА, ЩО МОДИФІКОВАНО ОКСИДОМ МОЛІБДЕНУ(VI) ТА ЄВРОПІЮ(III)

Катерина Терембіленко, Лілія Саєнко, Микола Слободяник

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Україна

e-mail: kateryna_terebilenko@knu.ua

У зв'язку з енергетичною кризою, що стала особливо гострою проблемою в Україні останній рік, стався якісний стрибок у застосуванні додаткових люмінесцентних покриттів для полікристалічних кремнієвих сонячних панелей. Роль таких покриттів полягає у використанні змішаних стекел як аморфної основи та часточок люмінофорів як конверторів ультрафіолетового світла до видимого діапазону. Таким чином вдається підвищити ККД полікристалічних кремнієвих сонячних панелей на 2- 4 %. Серед ефективних систем – конверторів УФ світла у видиме світло визначальну роль прийнято віддавати власне часточкам люмінофору, при цьому очевидним є зниження ефективності конвертування світла отриманого покриття у зв'язку з «розбавленням» активного компоненту в аморфній матриці. В представленій роботі розглядається можливість виготовлення скла, склад який модифіковано оксидом молібдену як можливого сенсibiliзатора люмінесценції для йонів європію(III).

Скло $(45-0.5x)P_2O_5-xB_2O_3 -10,0MoO_3 -(45-0.5x)Na_2O$ ($x = 20,0-60,0$) отримували методом плавлення високотемпературного розплаву з наступним швидким його охолодженням на мідному листі для загартування.

Спектр дифузного відбиття легованого скла наведено на рис. 1а. Варто відмітити, що навіть при незначному вмісті Eu_2O_3 у спектрі присутня смуга низької інтенсивності при 464 нм, що відноситься до ${}^7F_0 \rightarrow {}^5D_1$ електронного переходу. Ширина забороненої зони для отриманого люмінесцентного скла встановлена як 3,65 еВ. У спектрі люмінесценції скла $34,95P_2O_5 - 20,0B_2O_3 - 10,00MoO_3 - 34,95Na_2O - 0,1Eu_2O_3$, отриманого при збудженні 395 нм та кімнатній температурі найбільш інтенсивними є смуги з максимумом при 593, 614, 650 та 701 нм, що відносяться до випромінювальних електронних переходів йону європію(III). Найвищу інтенсивність має смуга при 614 нм, що відповідає електрон-дипольного переходу ${}^5D_0 \rightarrow {}^7F_2$. До магнітно-дипольного переходу ${}^5D_0 \rightarrow {}^7F_1$ належить смуга 593 нм.

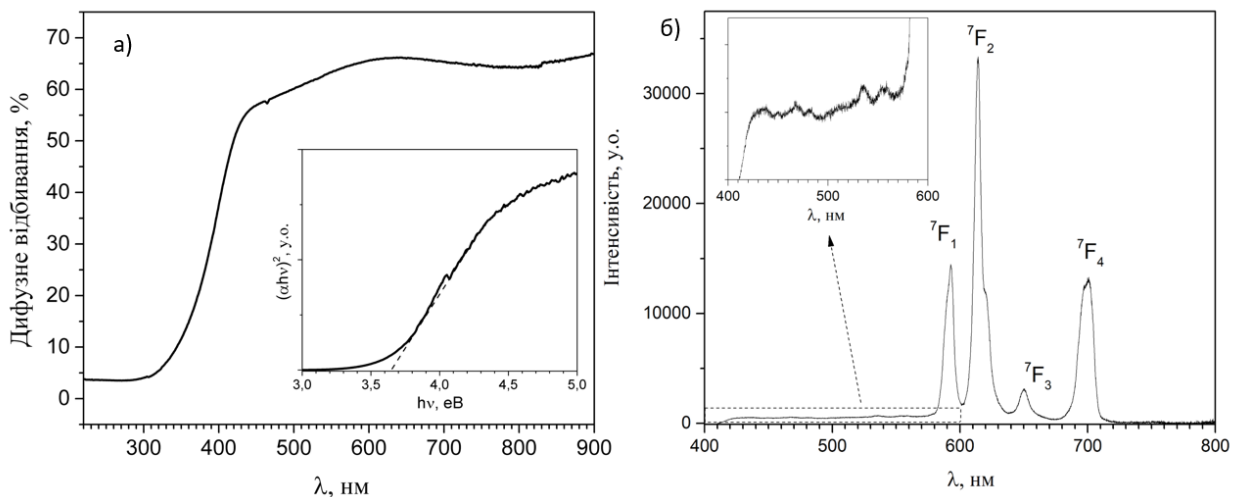


Рис.1. Спектр дифузного відбиття (а) та спектр люмінесценції при $\lambda_{zb} = 395$ нм та $T = 300$ К скла $34,95P_2O_5-20,0B_2O_3 -10,00MoO_3 -34,95Na_2O - 0,1Eu_2O_3$

Показано, що найбільш перспективним для моделювання червоних люмінофорів є скло $34,95P_2O_5 - 20,0B_2O_3 - 10,00MoO_3 - 34,95Na_2O - 0,1Eu_2O_3$, який ефективно збуджується УФ випромінюванням. Встановлені закономірності можуть бути використані для розробки композитних матеріалів – конверторів УФ випромінювання у видиме світло для полікристалічних сонячних батарей.

ANALYSIS OF THE MICROSTRUCTURE AND MECHANICAL CHARACTERISTICS OF SUPERIONIC $\text{Ag}_{6+x}(\text{P}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_5\text{I}$ CERAMIC MATERIALS

*Shender I.O.¹, Pogodin A.I.¹, Malakhovska T.O.¹, Filep M.J.^{1,2},
Kokhan O.P.¹, Bilanych V.S.¹, Suslikov L.M.¹*

¹Uzhhorod National University, Uzhhorod, Ukraine

²Ferenc Rákóczi II Transcarpathian Hungarian Institute, Beregovo, Ukraine

e-mail: iryna.shender@uzhnu.edu.ua

The safety of lithium-ion batteries (LIBs), which are widely used in electronics and are a potential solution for reducing CO₂ emissions, is a concern due to their high flammability and risk of ignition. This fact stimulates research into alternative technologies, including all-solid-state batteries (ASSBs) [1]. Among the promising materials for ASSBs are silver-containing argyrodites, which have high ionic conductivity and moisture resistance [2, 3].

This work is devoted to the study of the microstructural and mechanical properties of ceramic superionic materials based on $\text{Ag}_{6+x}(\text{P}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_5\text{I}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$) solid solutions. Due to their significant ionic conductivity, these compounds are of great interest for various applications in the field of solid-state ionics. Their properties open up broad prospects for the creation of efficient ASSBs, electrode materials, supercapacitors, etc. [2]. Today, ceramic superionic materials are important in science and industry due to their unique physical and chemical properties. The study of their mechanical and structural characteristics is key to the further development and integration of these materials into production processes.

The samples under study were obtained by cold pressing of pre-synthesized polycrystalline powders and analyzed by X-ray spectroscopy with energy dispersive analysis (EDS), scanning electron microscopy (SEM), and microhardness measurements. Results of the EDS and SEM methods indicate a phase homogeneity of the obtained ceramics. According to the results of microstructural analysis, it was found that the average size of crystallites is in the range of ~3.1-4.7 μm . The compositional dependence of the crystallites average size varies nonlinearly with a maximum for $\text{Ag}_{6.25}(\text{P}_{0.75}\text{Ge}_{0.25})\text{S}_5\text{I}$ and a minimum for $\text{Ag}_{6.75}(\text{P}_{0.25}\text{Ge}_{0.75})\text{S}_5\text{I}$. For all the studied ceramic samples of the composition $\text{Ag}_{6+x}(\text{P}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_5\text{I}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$), a «normal» indentation size effect was found, confirmed by a decrease in the microhardness H with an increase in the load P . It was found that when applying P loads greater than 0.5 N, the cationic substitution of P atoms by Ge atoms has virtually no effect on the microhardness value, and the compositional dependence of the microhardness of ceramic samples at higher loads is characterized by a tendency to a nonlinear monotonic decrease.

- [1] Y. Subramanian, R. Rajagopal, K.-S. Ryu, High ionic-conducting Li-argyrodites synthesized using a simple and economic liquid-phase approach and their application in all solid-state-lithium batteries, *Scripta Mater.* 204 (2021), 114129, <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2021.114129>.
- [2] W.F. Kuhs, R. Nitsche, K. Scheunemann, The argyrodites – a new family of tetrahedrally close-packed structures, *Mater. Res. Bull.* 14 (1979) 241–248, [https://doi.org/10.1016/0025-5408\(79\)90125-9](https://doi.org/10.1016/0025-5408(79)90125-9).
- [3] T. Nilges, A. Pfitzner, A structural differentiation of quaternary copper argyrodites: Structure - property relations of high temperature ion conductors// *Z. Kristallogr.-2005.- Vol.220*, pp. 281 – 294.

Секція 2.

КООРДИНАЦІЙНА ТА СУПРАМОЛЕКУЛЯРНА ХІМІЯ

PROSPECTS FOR USING PYRAZOLES IN SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY

Yuliia Davydenko

Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, Ukraine

e-mail: davydenko300808@gmail.com

Pyrazole has a five-membered aromatic ring structure containing two vicinal nitrogen atoms, an acidic pyrrole-like nitrogen with a lone pair of electrons involved in aromaticity, a basic sp^2 -hybridized pyridine-like nitrogen, and three carbon atoms and these combined features must be carefully taken into account in the context of reactivity. The combination of two dissimilar and adjacent nitrogen atoms in this azole (-N-N(H)- motif) allows it to simultaneously donate and accept hydrogen bonds (HB) (Figure 1), which favors the establishment of intermolecular interactions, either among pyrazole molecules themselves, forming different types of linear and/or cyclic complexes contingent upon the physical state and the nature of the substituents in the ring, or between pyrazoles and neighboring molecules that participate in proton transfer processes. Regarding the aggregation pattern of pyrazole in the solid state, X-ray crystal studies unraveled the formation of linear catemers and cyclic dimers, trimers, tetramers, and hexamers [1]. This is of great interest to supramolecular chemistry. Pyrazoles serve as important ligands in coordination chemistry. They are also used as building blocks in organic synthesis, facilitating the construction of more complex molecules of considerable interest in supramolecular chemistry. Pyrazole-based compounds possess diverse biological activities such as analgesic, anticonvulsant, antitumor, antidiabetic, antimicrobial, antipyretic, antiviral, antimalarial, local anesthetic, etc. [2].

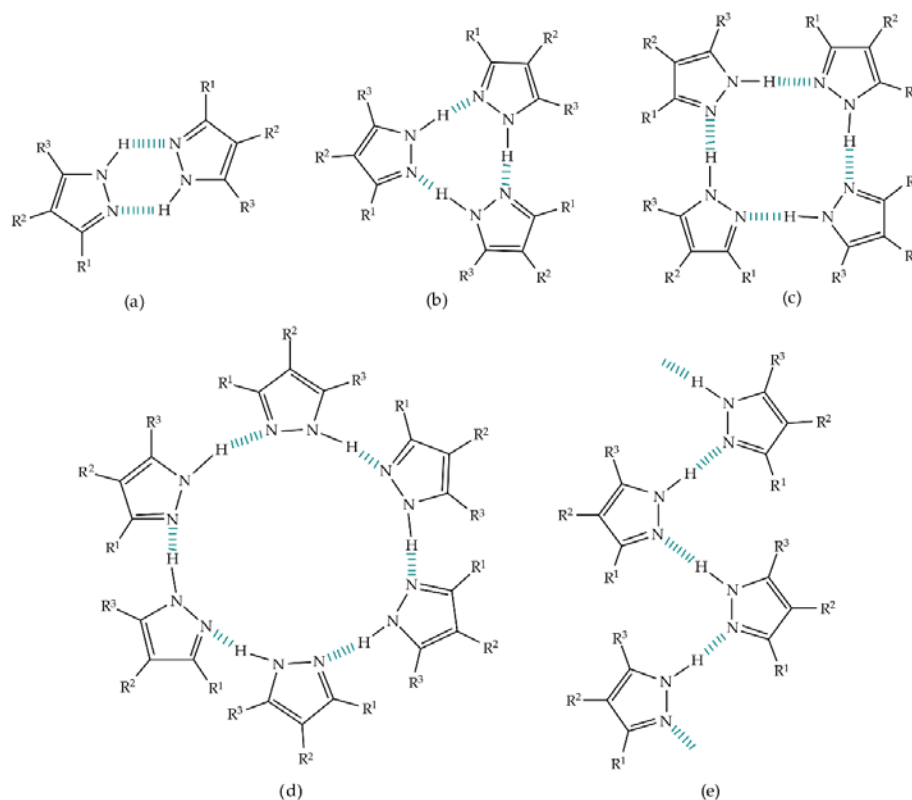


Figure 1. Representation of structures formed from self-association of pyrazole derivatives: (a) dimers, (b) trimers, (c) tetramers, (d) hexamers, (e) catemers.

[1] Costa, R. F., Turones, L. C., Cavalcante, K. V. N., Rosa Júnior, I. A., Xavier, C. H., Rosseto, L. P., & Fajemiroye, J. O. (2021). Heterocyclic compounds: pharmacology of pyrazole analogs from rational structural considerations. *Frontiers in Pharmacology*, 12, 666725.

[2] Castaneda, J.P.; Denisov, G.S.; Kucherov, S.Y.; Schreiber, V.M.; Shurukhina, A.V. Infrared and ab initio studies of hydrogen bonding and proton transfer in the complexes formed by pyrazoles. *J. Mol. Struct.* 2003, 660, 25–40.

THE SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF THE PROPYL 4-((1-(4-NITROPHENYL)-1H-1,2,3-TRIAZOL-4-YL)METHOXY) BENZOATE-COPPER COMPLEX

*Hakimov Muminjon*¹, *Ortikov Ilkhomjon*², *Tojiboev Akmaljon*³

¹Namangan State University, Namangan, Uzbekistan

²Alfraganus university, Yukari Karakamysh str. 2A, Tashkent.

³University of Geological Sciences, Tashkent, Uzbekistan

e-mail: hakimov1094@yahoo.com

Nowadays, the creation of safe and highly effective drugs in pharmacology is of urgent importance. This type of substance also includes 1H-1,2,3-triazole derivatives and complexes based on them. The 1H-1,2,3-Triazole derivatives are very important ligands for coordination compounds [1]. The complex of propyl 4-((1-(4-nitrophenyl)-1h-1,2,3-triazol-4-yl) methoxy) benzoate ligand with copper was synthesized and its structural characteristics were determined.

In this work, we succeeded in synthesizing the corresponding 1,2,3-triazole derivative by coupling p-propargyl-oxybenzoic acid propyl ether with 4-nitrophenyl azide. The 1H-1,2,3-triazole derivative and copper (II) chloride were dissolved in ethanol in a 2:1 molar ratio. The resulting solution was heated and stirred mechanically at 55-50°C for 65-70 minutes. Afterward, the clear solution was left in the flask at room temperature to evaporate. After 10-15 days, light pink crystals formed at the bottom of the container. That copper (II) complex was synthesized for the first time, also the melting point (491 K) and solubility (DMSO) of the synthesized substance were studied. [2]. As a result, consecutive nitrogen chains in the central ring of that molecule are active in forming a complex bond both in terms of the electrons of the element atom and in terms of the outer shell of the molecule.

The title compound crystallizes in the monoclinic *P21/c* space group, with the asymmetric unit consisting of a single molecule. Although the structure lacks classical strong hydrogen bonds, the following intramolecular interactions C—H···O, C—H···Cl were observed. In contrast to other complexes [3], two molecules of the organic ligand of 1H-1,2,3-triazole type are connected trans to copper metal through a coordination bond (Figure 1).

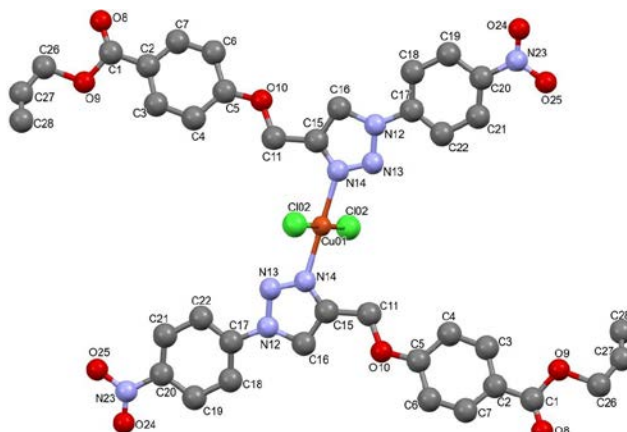


Fig. 1. The structure of the title compound

The crystal structure of the title compound displays monomeric units and a ligand-metal ratio of 2:1, with a square planar geometry around the metal center. The significance of the synthesized new complex as an anticancer drug and catalyst will be extensively studied in the future, at a later stage.

- [1] Zhou X.-H. et al., *Cryst.Eng.Comm* 11 (2009), p.1964.
- [2] Ortikov I.S. et al., 10th -Republic to the scientific conference of young chemists, Namangan, 2022, p.40.
- [3] William K.Chu. et al., (2022), *Molecules* 27 (7): p.2058.

КОМПЛЕКСИ ЛАНТАНІДІВ З 1,2,4-ТРИАЗОЛВМІСНИМИ ОСНОВАМИ ШИФФА ТА ПІРИДИНОЇЛГІДРАЗОНАМИ: СИНТЕЗ ТА ЛЮМІНЕСЦЕНТНІ ВЛАСТИВОСТІ

Валерія Галущенко^{1,2}, Олександр Коровін¹, Наталя Шматкова², Сергій Смола¹, Дмитро Хоменко^{3,4}, Роман Дорошук^{3,4}, Наталя Русакова¹

¹Фізико-хімічний інститут ім. О.В. Богатського НАН України, Одеса, Україна

²Факультет хімії та фармації Одеського національного університету імені І.І. Мечникова, Одеса, Україна

³Хімічний факультет Київського національного університету імені Тараса Шевченка, Київ, Україна

⁴ ТОВ Єнамін, Київ, Україна

e-mail: galushenko.valeriya@stud.onu.edu.ua

Дослідження комплексів лантанідів з основами Шиффа викликані їх застосуванням у люмінесцентних зондах, магнітно-резонансній томографії та магнітних матеріалах. Включення до структури основ Шиффа різноманітних гетероароматичних фрагментів є відомим способом модифікації як їх комплексоутворювальних властивостей, так і оптичних характеристик, а саме поглинання та випромінювання світла. Можна очікувати, що в комплексах лантанідів з основами Шиффа з передорганізованим набором донорних центрів будуть отримані нові перспективні сполуки для подальшого практичного застосування та створення новітніх люмінесцентних систем зі специфічними властивостями.

У роботі представлено результати дослідження комплексів лантанідів з модифікованими основами Шиффа: рядом *bis*(гідроксифенілтриазолів) - гетероциклічних аналогів Salen з 1,2,4-триазольними містковими фрагментами та β,γ -піридиноілгідразонами – нікотиноіл/ізонікотіноіл гідразонами 2-гідрокси-1-нафтальдегіду (рис. 1).

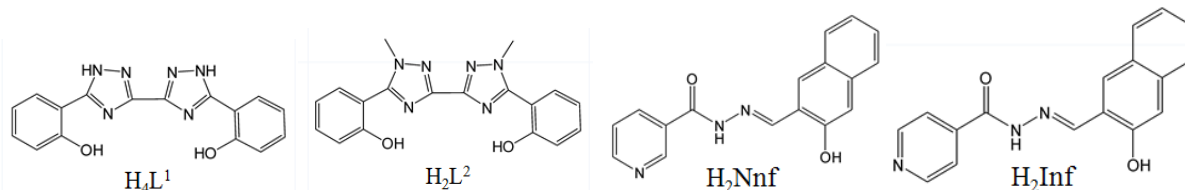


Рис. 1. Схематична будова використаних основ Шиффа

Сполуки було досліджено як у твердому стані, так і у розчинах. Тверді сполуки різного складу (1:1, 1:2) виділяли реакцією ацетату європію з *bis*(гідроксифенілтриазолами) і аналізували за допомогою мас-спектрометрії та ІЧ-спектроскопії. Крім того, було виявлено, що сполуки європію з *bis*(гідроксифенілтриазоловими) лігандами Salen-типу існують у розчині у складі 1:3. З піридиноілгідразоновими лігандами шляхом взаємодії з нітратами лантанодів як у розчині, так і у твердому стані отримано комплекси складу 1:2 за участю Nd(III), Eu(III) та Yb(III).

При УФ-збудженні комплекси *bis*(гідроксифенілтриазолу) проявляли інтенсивну 4f-люмінесценцію ($\Phi = 17-30\%$), спектри люмінесценції аналізували для зразків у твердому стані та в розчинах при різних температурах. Було виявлено, що *bis*(гідроксифенілтриазол)-ліганди типу Salen сенсibilізують червону та зелену люмінесценцію в комплексах Eu(III) та Tb(III) відповідно. Проте в комплексах з піридиноілгідразонами спостерігалось гасіння сигналів видимої області, а для Nd(III) та Yb(III) виявлено інтенсивне світіння в ближній ІЧ-області. Yb-центрована смуга випромінювання при 976 нм у комплексах з нікотиноіл (H₂Nnf) та ізонікотіноіл (H₂Inf) гідразонами була розділена на чотири компоненти, з невеликими відмінностями в їхніх максимумах через ізомерію ліганду. Таким чином, триазольмісні ліганди типу Salen були ідентифіковані як ефективні донори енергії для люмінесценції лантанодів у видимому спектрі, тоді як піридиноілгідразони ефективно сенсibilізували 4f-люмінесценцію в ближній ІЧ-області.

QUANTUM-CHEMICAL CALCULATIONS OF THE STRUCTURE OF Gd(III) COMPLEXES WITH 2,5-DIMETHYLHEPTEN-1-3,5,-DIONE

Artur Horbenko, Oleksandra Berezhnytska, Olena Trunova

V.I. Vernadsky Institute of General and Inorganic Chemistry of the NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine
e-mail: gorbenkoarthur@gmail.com

Coordination compounds of gadolinium are of great interest due to their various applications: from mannitol liquids for medical purposes to magnetic refrigerators in spintronics. Complexes of Gd with β -diketones, which contain unsaturated substituents in the α -position of the chelate ring, are interesting from this point of view. Due to the high energy of the ground state of the gadolinium ion, it is possible to calculate the energies of the triplet and singlet levels of the ligands in the phosphorescence spectra, which makes it possible to purposefully synthesize new luminescent compounds taking into account the energy gap between the triplet ligand level and the resonance level of the lanthanide ion.

Mono- and heteroligand complexes of Gd(III) with asymmetric β -diketone (2,5-dimethylhepten-1-3,5,-dione (dmhpd), dipyriddy (dipy) and phenatroline (phen) were synthesized and quantum chemical calculations were carried out. The geometry of the metal complexes was calculated using the PM7 method, in which the lanthanide atom is represented as a point charge, and the complex formation enthalpy was calculated molecules and bond lengths, parameters of electron occupancy on atomic orbitals and charges on atoms of complexes (table 1).

Table 1. Characteristics of the structure and electronic populations of complexes.

Estimated parameter	Gd(dmhpd) ₃	Gd(dmhpd) ₃ -dipy	Gd(dmhpd) ₃ -phen
Total energy (eV)	-5653,835	-7343,431	-7589,303
Heat of formation (kJ/mol)	-660,906	19,04	43,426
The dipole moment	0,479	7,936	8,207
E _{HOMO} (eV)	-9,355	-8,208	-8,135
E _{LUMO} (eV)	0,033	-1,363	-1,38
Energy gap	9,388	6,845	6,755
Ionization potential (eV)	9,354	8,208	8,135
Electron affinity (eV)	-0,033	1,363	1,38
Bond length O-Ln (Å)	2,319	2,3509	2,352
Bond length I _{av} N-Ln (Å)		2,5474	2,5475

The formation process of the Gd(dmhpd)₃ complex is exothermic, which corresponds to a negative enthalpy value. For heteroligand complexes (HLC), the enthalpy has positive values, the formation of which requires additional energy costs. The lengths of the O-Ln and N-Ln bonds in HLC molecules are comparable, but exceed the length of the O-Ln bond in the monoligand complex, which is due to the different occupancy of the orbitals. The E_{HOMO} and E_{LUMO} energy values indicate that the complexes will exhibit weak electron-accepting properties. As a result of calculations, geometrically optimized HLC structures were obtained (Fig. 1). The complexes have a non-planar structure, the β -diketonate ligands are bidentate-chelate coordinated and located in different planes. The introduction of additional phen and dipy ligands helps to reduce the ionization energy and, as a result, to reduce the "stiffness" of the structure.

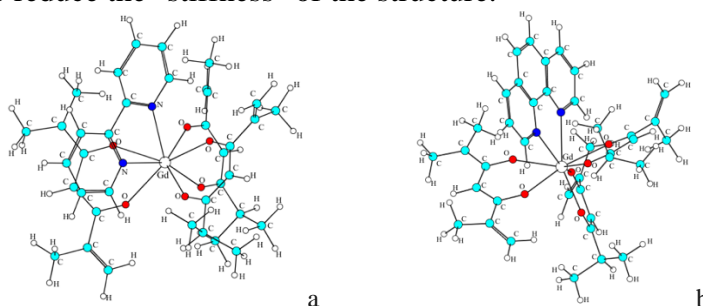


Fig. 1. Geometrically optimized structures of complexes: Gd(dmhpd)₃-dipy (a), Gd(dmhpd)₃-phen (b).

LUMINESCENT CHARACTERISTICS OF ZINC COMPLEXES WITH CURCUMINOIDS

Oleksandra Berezhnytska^{1,2}, Nadiia Ivakha^{1,2}, Olena Trunova¹

¹V.I.Vernadsky Institute of General and Inorganic Chemistry of the NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

²National Technical University of Ukraine «Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute»

e-mail: ivakhanadiia@gmail.com

Curcumin is a structural analogue of acetylacetone, belongs to bidentate ligands and is able to form stable chelate compounds with most metals of the periodic table. Several curcuminoids are known to exist, namely: 1,7-bis-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-1,6-heptadiene-3,5-dione (or diferuloylmethanoate) this particular curcuminoid is the "original" curcumin, demethoxycurcumin (dmcu), bisdemethoxycurcumin (bdmcu). Zn(II) complexes with the following ligands were studied in the work: curcumin from Merck (dfmth), curcumin obtained by condensation from vanillin and acetylacetone (cur), and Schiff base synthesized from dfmth with alanine (dfmth@al).

Figure 1 shows the luminescence spectra of the synthesized complexes of zinc with curcumin and its derivatives.

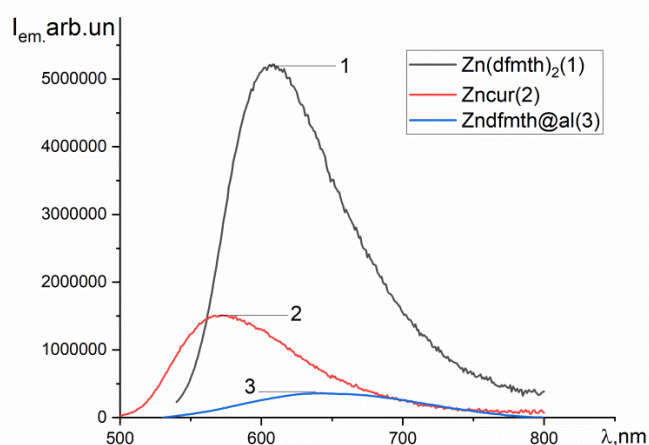


Figure 1 – Luminescence spectra of synthesized zinc complexes

In the table 1 shows the emission characteristics of zinc complexes in comparison with the original ligands.

Table 1 - Emission characteristics of curcuminoids and Zn complexes

Complexes	λ	λ_{\max}	$I_{em.} \cdot 10^{-6} \text{ arb.un}$
dfmth	$\lambda_{ex.} = 363$	$\lambda_{\max em} = 564$	2.22
cur	$\lambda_{ex.} = 363$	$\lambda_{\max em} = 565$	1.88
dfmth@al	$\lambda_{ex.} = 363$	$\lambda_{\max em} = 646, \lambda_{\max em} = 670$	1.37, 1.38
$Zn(dfmth)_2 \cdot 2H_2O$	$\lambda_{ex.} = 361$	$\lambda_{\max em} = 610$	5.25
$Zn(cur)_2 \cdot 2H_2O$	$\lambda_{ex.} = 361$	$\lambda_{\max em} = 575$	1.51
$Zn dfmth@al \cdot 3H_2O$	$\lambda_{ex.} = 363$	$\lambda_{\max em} = 640, \lambda_{\max em} = 662$	0.36, 0.34

A rather interesting result emerges from the analysis of the presented data. It is known that zinc has its own emission in the UV region of the spectrum, but it is not registered for curcuminates. In the emission spectra, we observe a band characteristic of curcuminoids, however, upon complexation, it undergoes significant changes compared to the original ligands. If for zinc curcuminates due to the sensitizing action of the complexing ion, the composition $Zn(dfmth)_2$, we observe a 2.5-fold increase in emission intensity, then for $Zn(cur)_2$ and the alanine-based complex $Zn dfmth@al$, there is a 1.2-fold decrease in emission intensity and 3.8 times, respectively. The results of thermogravimetric analysis indicate that the central metal ion, in these cases, coordinates only one curcuminoid molecule, which causes the presence of a larger number of coordinated water molecules in the composition of the coordination compound, which are known to exhibit a rather strong quenching effect.

SYNTHESIS AND STUDY OF STEREOCHEMISTRY OF NINE NEW SUPRAMOLECULAR COMPOUNDS OF METHYLENE BLUE

Mukarram Kadirova and Vakhobjon Sabirov

Pharmaceutical Education and Scientific Research Institute, Tashkent, Uzbekistan

e-mail: m.kadirova70@mail.ru

Abstract. Methylene blue pentahydrate, MbCl₅·5H₂O during the mechanochemical reaction with, the following 9 compounds were synthesized: (Mb)₂CuCl₄·H₂O (1), (Mb)₂CuCl₄ (2) and (Mb)CuCl₂ (3), (Mb)₂ZnCl₄·H₂O (4), (Mb)₂MnCl₄·H₂O (5), (Mb)₂CoCl₄·H₂O (7), (Mb)₂CoCl₄ (8), (Mb)FeCl₄ (9). The chemical composition and crystal structures of the compounds were determined during the study of single-crystal X-ray diffraction. Crystallographic data: (1), (3), (4), (5), (6), (7)- triclinic $P\bar{1}$, $Z=2$, (2), (8), (9) - monoclinic $P2_1/n$, has $Z=4$. The asymmetric unit of supramolecular compounds is composed of: (1), (4), (5), (6), (7) two Mb⁺ cations and [CuCl₄]²⁻ anion and one molecule of water of crystallization; (2), (8) two Mb⁺ cations and [CuCl₄]²⁻ anion; (3) three (Mb)CuCl₂ molecules, (9) one Mb⁺ cation and [FeCl₄]⁻. (3) in the complex, the oxidation states of Cu are +1, and those of Fe are +3. In compounds (1), (2), (4), (5), (6), (7), (8), (9), the coordination environment of metal atoms is a different distorted coordination tetrahedron. In the third compound, all three Cu(I) atoms are surrounded by a trigonal mode distorted by two chlorine ions and a nitrogen atom of the phenothiazine ring(1).

The complex has been obtained as a result of the mechanochemical reaction of MeCl₂ × n H₂O with [Mb]Cl × 5H₂O that eliminate the adverse effect of the solvent on the course of the reaction. Reagents MeCl₂ × n H₂O (0.1 mmol) and [Mb]Cl × 5H₂O (82 mg, 0.2 mmol) in a 1:2 stoichiometric ratio were ground in an agate mortar until a gold-like thin mass was formed. 5.0 ml of DMF was gradually added dropwise to the reaction mixture and the process was continued until a homogeneous dark blue solution was formed.

The used HF/3-21G energy calculations were described in detail earlier in [5]. However, we believe that some details of the energy calculation should be briefly repeated here. The π - π stacking energy for all crystals was calculated by the CRYSTALEXPLORER 17.5 program using the Hartree-Fock (HF) method at the theoretical level of HF/3-21G with 4 components of intermolecular interactions: 1) electrostatic, 2) polarization, 3) dispersion and 4) repulsive interaction energies. For their graphical representation, energy frameworks were constructed.

The obtained energies are represented by cylinders whose radius corresponds to the energy value. The highest interaction energy corresponds to the dispersion energy. This result is consistent with the results observed for other compounds with aromatic rings. The value of the total π - π stacking energy in crystals (1)-(10)- varies from -29.0 to -54.7 kJ/mol.

To study the dependence of the π - π stacking effect on the mutual arrangement of neighboring molecules, the distances between the planes of neighboring cations Mb⁺ and the distances between the centroids of the central rings were calculated.

In conclusion, for the first time, 9 new complexes of Cu(II), Zn(II), Mn(II), Co(II), Ni(II), Fe(III) chlorides with (Mb)Cl·5H₂O were synthesized and a mechanochemical method for complexation of Mb with 3d-metal chlorides was developed. It was found that 2 types of complex crystals are formed. Complexes of the 1st type are anhydrous crystals of complexes, and crystals of the 2nd type are hydrated. Using the CRYSTALEXPLORER17.5 program at the theoretical level of HF/3-21G, the energies of intermolecular π - π -stacking interactions were calculated and energy frameworks were constructed. Weak interactions and π - π -stacking effects in crystals were studied using the Hirshfeld surface and energy framework methods.

ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ДІЕТАНОЛАМІНІВ

Кац Андрій, Марія Мироняк, Гогунський Олександр, Олена Волнянська, Микола Ніколенко
Український державний університет науки і технологій, м. Дніпро, Україна
e-mail: mari.mironyak@gmail.com

Експрес-діагностика хімічного забруднення навколишнього середовища, що може відбуватися внаслідок збройних конфліктів, аварій на об'єктах комунального господарства або виробництвах для швидкої ліквідації наслідків таких надзвичайних ситуацій в сьогоdnішніх реаліях в нашій країні та світі є актуальним питанням. В цьому сенсі цікавими об'єктами є супрамолекулярні сполуки на основі поліоксометалатів, що можуть бути використані в якості хімічно чутливого елемента для розробки сенсорних електрохімічних систем, за допомогою яких можна експресно визначати наявність та концентрацію органічних забруднювачів в ґрунті або питній воді.

Оскільки одним з основним промислових та побутових забруднювачів навколишнього середовища є поверхнево-активні речовини, основним об'єктом для дослідження було обрано неіонну поверхнево-активну речовину – кокамід діетаноламіну, що широко застосовується в різних галузях промисловості та може заподіяти шкоду організму людини при потраплянні з питною водою або сільськогосподарською продукцією.

Діетаноламід жирних кислот є неіонними (за деякими даними амфолітними) поверхнево-активними речовинами і використовуються в миючих засобах для піноутворення, підвищення стійкості піни, захисту від жорсткої води, емульгування, загушення, стабілізації.

Кокамід діетаноламіну має виняткові миючі властивості та характеристики піноутворення. Завдяки своїй здатності утворювати щільну піну, його часто використовують як загусник і миючий засіб у різних туалетних засобах, таких як шампуні, піни для ванн, гелі для душу та мило для рук. Однак, не дивлячись на позитивні технологічні властивості, кокамід діетаноламіну при цьому може бути подразником шкіри і сенсibilізатором.

Іншими напрямками використання неіонних поверхнево-активних речовин на основі діетаноламіну у промисловості є наступні: інгібітор корозії у водорозчинних, напівсинтетичних та синтетичних металообробних рідинах та полірувальних агентах; як мастило у промисловості пластмас, у процесах виробництва на основі поліетилену та поліпропілену.

Оскільки застосування цієї неіонної поверхнево-активної речовини дуже широке, то гостро стоїть питання про її виявлення та регулювання кількості у навколишньому середовищі. Цю сполуку було виявлено у великій кількості зразків морської води, взятих з різних узбережь європейських країн. Тому моніторинг кількісного вмісту даної сполуки у об'єктах навколишнього середовища є актуальним питанням.

На сьогодні основними методами кількісного визначення кокамиду діетаноламіну є хроматографічні методи – газова та рідинна хроматографія. Але ці методи є досить складними та коштовним у виконанні, потребують наявності складного обладнання та навченого персоналу.

В якості альтернативи, нами запропоновано електрохімічне визначення діетаноламиду кокосової олії за допомогою потенціометричного сенсору. Як електроактивну речовину для пластифікованої мембрани сенсору використано супрамолекулярні комплекси на основі кокамиду діетаноламіну та поліоксометалатів молібдену. Результати експериментальних досліджень показали, що найкращі результати досягаються при використанні в мембрані 0,82 % супрамолекулярної речовини на основі комплексу кокамиду діетаноламіну та окисної форми поліоксометалату, узятих в співвідношенні 2:1, при застосуванні мембранного розчинника дибутилфталату та рН аналіту 10. При цьому додаткове використання солей барію при отриманні осаду супрамолекулярної речовини сприяє збільшенню чутливості сенсора та покращенню його лінійності, навіть при використанні 0,17% електроактивної супрамолекулярної речовини в мембрані.

ПОРІВНЯННЯ РОЗРАХУНКОВОГО ТА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ІЧ СПЕКТРІВ КООРДИНАЦІЙНОЇ СПОЛУКИ ЦИННАМАТУ НІКЕЛЮ З ТІОСЕМІКАРБАЗИДОМ

Ковальов А. Ю., Кокшарова Т. В.

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

e-mail: a.kovalyov@stud.onu.edu.ua

У представленій роботі за допомогою пакетів Orca та Multiwfn проведено DFT розрахунки для найвірогіднішої конформації $\text{NiL}_2(\text{Cinn})_2$ (L – тіосемікарбазид, HCinn – корична кислота), а також розраховано ІЧ спектр цієї конформації та проведено його порівняння з експериментальним спектром.

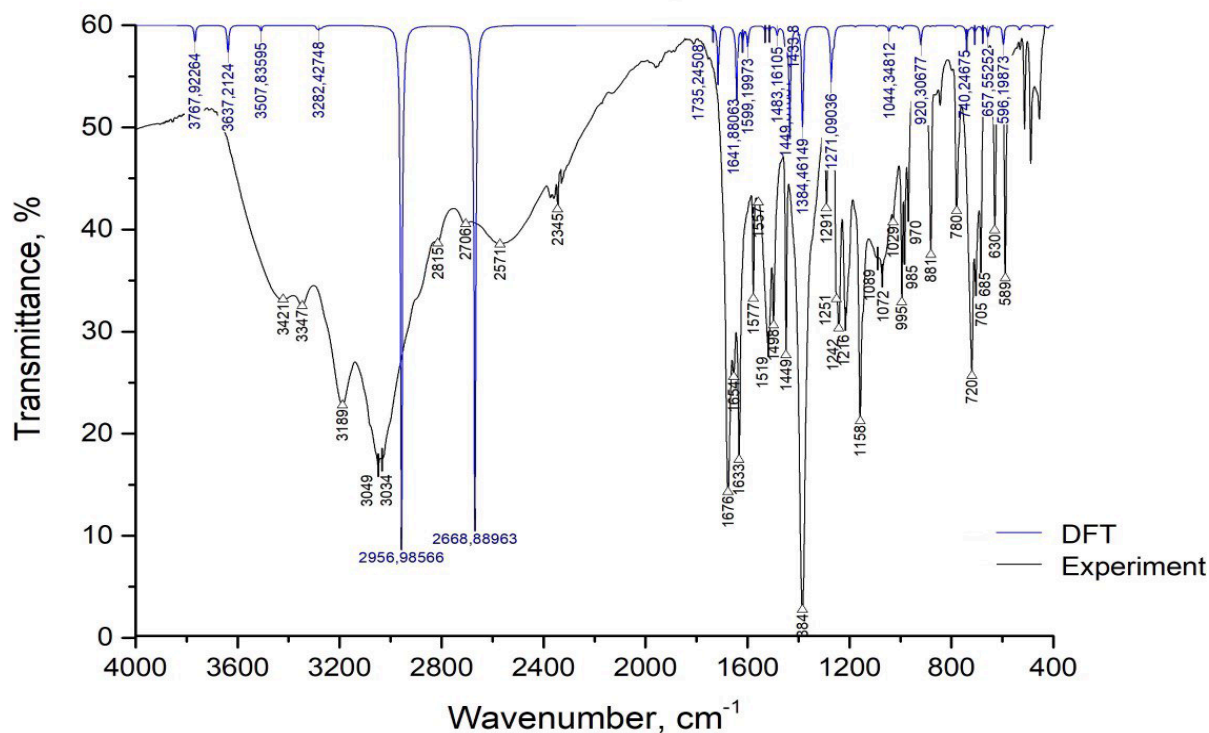


Рис. 1. Порівняння розрахованого (DFT) та експериментального (Experiment) ІЧ спектрів $\text{NiL}_2(\text{Cinn})_2$

Таблиця 1. Віднесення смуг (cm^{-1}) та порівняння розрахованого та експериментального ІЧ спектрів $\text{NiL}_2(\text{Cinn})_2$

Коливання	ν (NH)	Тіоамідні смуги			
		I	II	III	IV
Розраховані частоти	2957 с.	1599 сер.	1384 с.	1000 плече	740 сер.
Експериментальні частоти	3347 сл., 3189 сер., 3049 сер., 3034 сер.	1577 сер.	1384* дуже с.	1000 плече	780 сер.

З табл. 1 видно, що експериментальні та розраховані тіоамідні смуги відрізняються за частотами не більш ніж на 40 cm^{-1} , що можна вважати гарним результатом. Для NH-коливань різниця є більшою, адже в експериментальному спектрі в цьому регіоні окрім коливань NH великий внесок мають коливання інших груп, наприклад C-H.

КОМПЛЕКСИ ГЕРМАНІЮ(IV) З ГАЛОВОЮ КИСЛОТОЮ ТА ЇЇ ЕТИЛОВИМ ЕСТЕРОМ ЯК МОДИФІКАТОРИ ПОЛІГЛІКОЛЬМАЛЕЇНАТФТАЛАТІВ

Микола Мартинюк¹, Олена Марцінко¹, Олена Фінік², Євген Фадєєв², Інна Сейфулліна¹,
Сергій Савін¹, Олеся Кіосе¹

¹Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, Одеса, Україна

²ВЦ ТОВ «ІНСПЕКТОРАТ УКРАЇНА», Одеса, Україна

e-mail: lborn@ukr.net

На теперішній час кополімери ненасичених олігоестерів з вініловими мономерами є найпоширенішими з усіх термореактивних пластмас промислового виробництва. Це пояснюється низькою вартістю та доступністю основних компонентів, які використовують при їх виробництві. Введення модифікаторів на стадії синтезу поліглікольмалеїнатфталату (ПГМФ) дозволяє покращити як якість напівфабрикату, так і кінцевого полімерного продукту. Вивчення кінетики поліконденсації в присутності модифікаторів та подальшої кополімеризації дозволяє оптимізувати умови цих процесів для забезпечення високої ефективності та стабільності виробничого процесу.

В останні роки авторами було виявлено вплив різноманітних комплексів германію(IV) на властивості ненасичених олігоестерів та їх кополімерів. В продовження цих досліджень було синтезовано нові комплекси германію(IV) з галовою кислотою (H_4Gal) та її етиловим естером ($H_3Gal-Et$), вивчено їх в якості модифікаторів ПГМФ. Склад та структуру сполук визначено методами елементного аналізу, ІЧ-спектроскопії, термогравиметрії та мас-спектрометрії (рис. 1). Так, мас-спектр сполуки з галовою кислотою в негативній полярності містить інтенсивний сигнал з $m/z = 579$, що відповідає однозарядному комплексному аніону $[Ge(H_2Gal)_2(H_3Gal)]^-$ з брутто-формулою $GeC_{21}H_{13}O_{15}^-$ та сигнал з $m/z = 289$, якій відповідає двохзарядному аніону $[Ge(H_2Gal)_3]^{2-}$ з брутто-формулою $GeC_{21}H_{12}O_{15}^{2-}$.

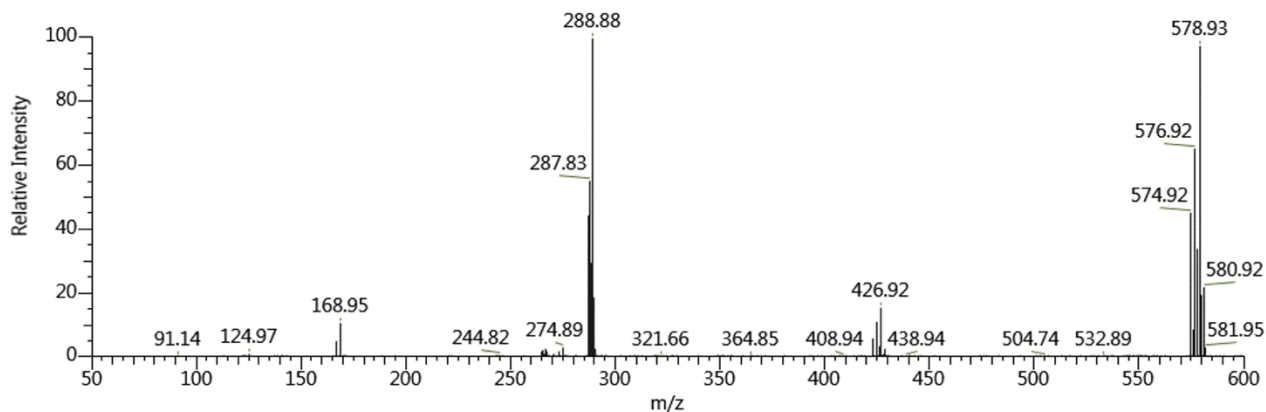


Рис. 1. ESI(-)-мас-спектр водно-метанольного розчину $[Ge(H_3Gal)_2(H_2Gal)] \cdot 2H_2O$

Показано, що застосування комплексів германію(IV) з галовою кислотою та з її етиловим естером в якості модифікаторів поліглікольмалеїнатфталатів (ПГМФ) суттєво не впливає на швидкість реакції поліконденсації та в'язкість системи. Проте при подальшій кополімеризації модифікованого ПГМФ з метилметакрилатом відзначено зниження температурного коефіцієнту реакції кополімеризації з 2,1 до 1,9.

Таким чином, запропоновано модифікатори поліглікольмалеїнатфталатів, які забезпечують нижчий температурний коефіцієнт реакції їх кополімеризації з метилметакрилатом, що дозволяє отримувати полімерні блоки більшого розміру при затвердженні в неізотермічному режимі.

МОНІТОРИНГ ВМІСТУ АКТИВНИХ КОМПОНЕНТІВ ҐРУНТУ

Марія Мироняк, Єлизавета Прилуцька, Нікіта Гуназа, Оксана Лабяк, Микола Ніколенко
Український державний університет науки і технологій, м. Дніпро, Україна
e-mail: mari.mironyak@gmail.com

В умовах воєнних дій, коли забруднення навколишнього середовища набуває гігантських масштабів, найбільший негативний вплив відчуває екосистема ґрунтів – відбувається руйнування рівної поверхні, потрапляння уламків снарядів та виділення токсичних газів.

З залишків боєприпасів до ґрунтів потрапляють ферум, сульфур та купрум, які згодом надходять в кругообіг речовин навколишнього середовища та включаються у харчові ланцюги. Також можливе потрапляння збідненого урану, що негативно відображається на загальному стані ґрунту та його родючої частини. Під час вибухів в атмосферу викидаються токсичні гази (оксид сульфуру, оксид нітрогену та монооксид карбону), які повертаються у ґрунт через кислотні дощі та змінюють рН ґрунту.

Також сама вибухова хвиля механічно пошкоджує структуру ґрунту, такий ґрунт вважають деградованим, бо в ньому змінюється інтенсивність процесів (гуміфікація, вилуговування, вивітрювання, кругообіг води), які домінували на довоєнному ландшафті.

Для того, щоб оцінити масштаби руйнування ґрунту та його якість необхідна розробка нових методів аналізу основних активних компонентів ґрунту. Оскільки одним з результатів впливу воєнних дій на ґрунти є порушення процесів гуміфікації - перетворення органічних залишків у верхніх шарах ґрунту на специфічні гумусові речовини, то перспективним напрямом може бути розробка методів визначення кількісного вмісту цих речовин у складі ґрунту для оцінки масштабів руйнувань.

Результатом гуміфікації є утворення з мертвого органічного матеріалу в результаті біохімічних реакцій за участю мікроорганізмів так званих гумінових речовин: гумусових кислот та гумінів. За структурою це високополімерні сполуки, що піддаються розкладанню набагато повільніше і тому накопичуються у ґрунті.

Гумінові речовини сприяють покращенню водно-фізичних властивостей ґрунту, активізують мікрофлору, впливають на міграцію поживних речовин, зв'язують токсичні агенти (пестицидів, важких металів), транспортують метали та інші поживні речовини з ґрунту до рослини та пролонгують їх дію, поступово вивільняючи їх з комплексів. Кожна функціональна група фрагменту молекул гумінових кислот виконує свою безпосередню роль, а таких груп дуже багато, тому дія гуматів на воду, ґрунт та всі стадії росту рослин багатогранна.

З хімічної точки зору гумусові кислоти – це високомолекулярні органічні оксикислоти з бензойним ядром, що в залежності від типу розчинності поділяються на нітрогенвмісні гумінові кислоти (розчинні у лугах, нерозчинні в кислотах), гіматомеланові кислоти (розчинні в спиртах), фульвокислоти (розчинні у воді, лугах та кислотах).

Зважаючи на загальну будову гумусових кислот, перспективним є отримання супрамолекулярних речовин на основі поліоксометалатів з електроактивними властивостями, на основі яких в подальшому можливо розробити сенсорні системи потенціометричного типу для визначення вмісту даних речовин у складі зразків ґрунту для визначення перспектив його подальшого використання у сільському господарстві.

Попередні дослідження свідчать, що сенсорні системи на основі супрамолекулярних комплексів поліоксометалатів та різних типів органічних речовин (наприклад, нітрогеновмісних полімерів та консервантів, поверхнево-активних оксиетиленових та четвертинних амонієвих сполук) є простими у використанні, не потребують наявності коштовного обладнання та додаткових складних операцій пробопідготовки, але при цьому володіють достатньою чутливістю, експресністю та селективністю.

CRYSTAL STRUCTURE OF 2-ETHYLHINAZOLON-4-ONE AND 2-BUTYLHINAZOLON-4-ONE

*Davlatboyev Muzaffar*¹, *Tulkin Sattorov*¹, *Yakubov Ubaydullo*²

¹Namangan State University, Namangan, Uzbekistan.

²Institute of Chemistry of Plant Substances. senior researcher

e-mail: davlatboyev.muzaffar@mail.ru

Quinazoline and their derivatives play an important role in pharmaceuticals and biologically active substances. They are characterized by anticarcinogenic, antibacterial and anti-inflammatory properties [1]. In order to improve the effectiveness and safety of these substances, it is necessary to study their molecular and crystal structure in depth. X-ray structural analysis and Hirshfeld surface analysis are the main methods to achieve this goal. These methods allow to determine the crystal structure of quinazoline derivatives, intermolecular interactions and their physicochemical properties. In this work, the hydrochloride salt of 2-ethylquinazolon-4-one (I) and the hydrochloride salt of 2-butylquinazolon-4-one (II) were examined using X-ray structural analysis (XRT) and Hirshfeld surface analysis methods [1].

Intermolecular interactions, including hydrogen bonds C-H...O and π - π bonds, in the crystal lattice of quinazoline derivatives were studied by Hirshfeld surface analysis. A detailed analysis of the crystal structure, including Hirshfeld surface analysis, allows to determine the effectiveness of these compounds against various diseases and to develop new therapeutic agents. Therefore, new studies on the complex synthesis and Hirshfeld surface analysis based on quinazolines are important and relevant. Here, we report the structural characterization of the title compounds. Single crystal X-ray structure analyse established the structures of 2-(ethyl, butyl)-quinazoline-4-one hydrochlorides. The identified conformations were described in the context of intra- and intermolecular interactions. The title compounds both of them crystallize in the triclinic P-1 system. Asymmetric cells of crystals consist of quinazoline cation and Cl⁻ anion. In the crystal the molecules are interconnected by intermolecular C—H...Cl and N—H...Cl hydrogen bonds. According to the Hirshfeld surface analysis, it was found that H...H, H...C/C...H, H...Cl/Cl...H, and H...O/O...H contacts prevail in the crystal structures.

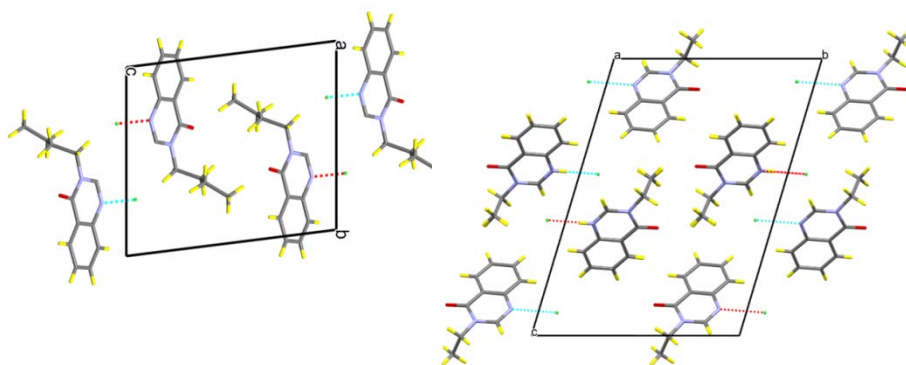


Fig. 2. On the left is the view of compound I along the α -axis, on the right is the view of substance II along the α -axis, or on the 001 plane, molecules are connected through D-H...A hydrogen bonds. a flat layer of iron.

The obtained RST and Hirshfeld surface analysis results are important for understanding the structure and intermolecular interactions of quinazoline and its derivatives, creating new drugs.

1. Aishah M. et al. (2023). *MDPI, Molecules*, 28, 978

THE HETERONUCLEAR NMR AND X-RAY PHOTOELECTRON SPECTROSCOPY IN THE COORDINATION CHEMISTRY OF TRANSITION METAL COMPOUNDS

Svitlana Orysyk¹, Polina Novikova¹, Viktor Orysyk²,
Yurii Zborovskii², Myhailo Vovk²

¹V.I. Vernadsky Institute of General and Inorganic Chemistry NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine, 03680, Palladin Avenue, 32/34

²Institute of Organic Chemistry NAS of Ukraine, Kyiv, 02094, Murmanska Street, 5.
e-mail: s.oryslend@ukr.net

Heteronuclear NMR spectroscopy is mainly used to study the stereochemistry and stereodynamics of coordination compounds, in particular, it allows obtaining clear data on the structure of *cis-trans* isomeric square planar and octahedral complexes of metals, and also used to study the competitive coordination of ligands and the location of the coordination bond.

Currently, a modern approach is used to establish a method of localization of a coordination bond using the method of heteronuclear NMR spectroscopy, which includes the comparison of NMR spectral tests of characteristic fragments of ambient ligands and coordination compounds, as well as their comparison with X-ray diffraction data of key structures.

We use ¹H/¹³C NMR spectroscopy to find out the coordination pathway of ambidentate ligands (*syn*- and *anti*-hydroxyimines, substituted thioureas, and hydrazides of carboxylic acids) in transition metal complexes, as well as to study the influence of the nature of coordination stereofication and substituents in ligands on the spectral characteristics of coordination compounds. The main objects of our investigation are coordination compounds of Co³⁺, Cu⁺, Ni²⁺, Zn²⁺, Ru²⁺, Rh³⁺, Pd²⁺, Pt²⁺ ions (Figure).

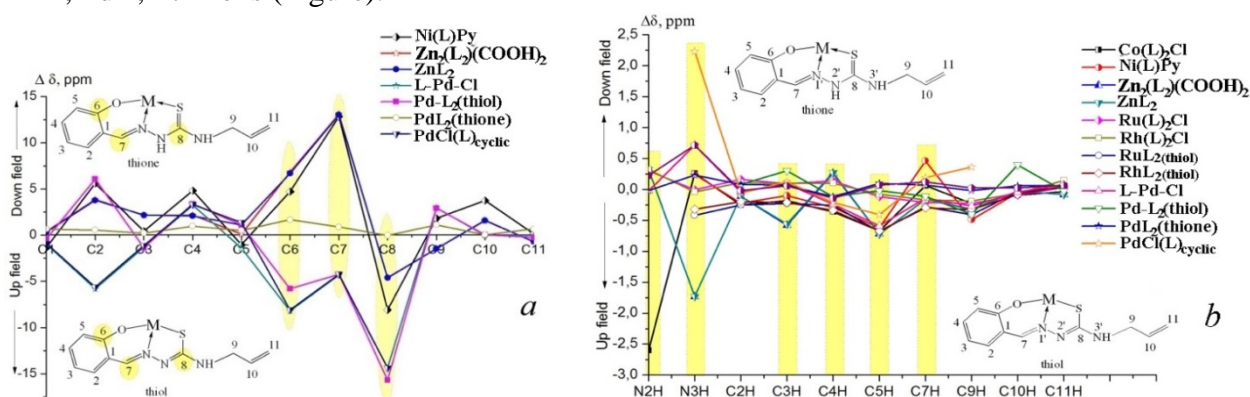


Fig. Diagrams of chemical shifts of ¹³C (a) and ¹H (b) signals in NMR spectra of complexes

The chelating way of ligand coordination is accompanied by a significant displacement of the N²H and N³H protons of the carbothioamide group, which is due to the formation of a five-membered metallocycle, which includes the N²H proton. The N³H proton is close to the C=S group, which is involved in the formation of the M←S or M-S bond. In addition, the signals of protons C⁷H of the azomethine group and C⁵H, C⁴H, C³H of the phenoxy nucleus, which are in the ortho- and para-position to the main carbon skeleton, undergo a significant shift. In the ¹³C NMR spectra, the tridentate-chelate mode of H₂L coordination is accompanied by a significant shift of C⁶, C⁷, C⁸ signals directly connected to O, N, S atoms, through which M-O, M-N, M-S bonds are formed (Fig. 1a, b).

It should be noted that a fairly informative methods for determining the oxidation of the metal and form of coordinated ligands in the complexes is X-ray photoelectron spectroscopy (XPS). This is one of the main methods of investigation of chemical bond in compounds. It allows studying the valence and inner electron levels of atoms. It is shown that increase in the S2p_{3/2} electron binding energy in the spectra of complexes (ΔE_{bind}S2p 0.6-1.3 eV) characterizes the coordination ligand in thionic tautomer form. The bond formation (NH→M) hardly causes a shift of N1s binding energy, which characterizes the weak donor-acceptor interaction between the NH and the metal ion.

АВ ІНІТІО ПОРІВНЯННЯ МАЛЕЇНАТНИХ π -АЦИДОАКВАКОМПЛЕКСІВ Cu^+ У ВОДНОМУ РОЗЧИНІ

Євген Осокін

Primus Inter Pares School, Дніпро, Україна

e-mail: osokin@cf.dnu.dp.ua

Особливе місце в хімії координаційних сполук займають π -комплекси Cu(I) з різноманітними ненасиченими органічними сполуками в якості ліганду, через свої високі бактерицидні та каталітичні властивості.

В попередній роботі досліджувались π -ацидоаквакомплекси Cu^+ з ненасиченими карбоновими кислотами [1] такими як акрилова, фумарова та малеїнова кислоти. Аналіз цих досліджень показав, що квантово-хімічні розрахунки для малеїнатних π -ацидоаквакомплексів Cu^+ виконані без врахування внутрішньо-молекулярного водневого зв'язку (ВВЗ) між двома карбоксильними групами у самій молекулі малеїнової кислоти.

Метою даної роботи стало квантово-хімічне моделювання та порівняння малеїнатних π -ацидоаквакомплексів Cu^+ з врахуванням ВВЗ у водному розчині.

Моделювання виконувалось DFT-методом з використанням функціоналу B3LYP. Атоми Купруму описувались базисним набором Wachters+f, атоми лігандів – 6-311G(d, p). Водний розчин враховувався за допомогою моделі поляризаційного континууму (PCM). Порівнюючим фактором була використана різниця електронних енергій комплексів, тобто $\Delta E = E(\text{Без ВВЗ [1]}) - E(\text{з ВВЗ})$.

Було проведено порівняння електронних енергій (sum of electronic and zero-point energies) комплексів розрахованих в роботі [1] та в поточній роботі. За табл. 1 видно, що для молекулярної форми кислоти наявність ВВЗ суттєвим чином не впливає на енергію системи. Для комплексів з депротонованою за першим ступенем кислоти, ситуація дещо відрізняється. Зокрема, комплекси $[\text{Cu}^+(\text{HM}^-)(\text{H}_2\text{O})_3]$ (рис. 1) та $[\text{Cu}^+(\text{HM}^-)(\text{H}_2\text{O})_2]$ на 22,28 та 37,87 кДж/моль, відповідно, більш енергетично вигідні ніж їх аналоги без ВВЗ. Негативні значення ΔE для деяких комплексів, попри стабілізацію системи через ВВЗ, обумовлені додатковими водневими зв'язками між молекулами води внутрішньої координаційної сфери та карбоксильними групами кислоти. При цьому помітне зменшення енергій зв'язування для комплексів із негативним значенням ΔE .

Таблиця 1. Порівняння електронних енергій π -комплексів $[\text{Cu}^+(\text{H}_2\text{M})(\text{H}_2\text{O})_n]$

$n(\text{H}_2\text{O})$	$E(\text{з ВВЗ}),$ Хартрі	$E(\text{Без ВВЗ}$ [1]), Хартрі	$\Delta E,$ Хартрі	$\Delta E,$ кДж/моль
$[\text{Cu}^+(\text{H}_2\text{M})(\text{H}_2\text{O})_n]$				
3	-2325,48605	-2325,48622	-0,00017	-0,45
2	-2249,03940	-2249,03867	0,00072	1,90
1	-2172,57602	-2172,57683	-0,00081	-2,14
0	-2096,09451	-2096,09947	-0,00496	-13,03
$[\text{Cu}^+(\text{HM}^-)(\text{H}_2\text{O})_n]$				
3	-2325,06202	-2325,05353	0,00849	22,28
2	-2248,61699	-2248,60257	0,01443	37,87
1	-2172,15492	-2172,15539	-0,00047	-1,23
0	-2095,68025	-2095,68478	-0,00453	-11,89

1. Vargalyuk, V. F., Osokin, Y. S., Polonskyu, V. A., & Glushkov, V. N. (2019). Features of ($d\pi$ - π)-binding of Cu(I) ions with acrylic, maleic and fumaric acids in aqueous solution. *Journal of Chemistry and Technologies*, 27(2), 148–157. <https://doi.org/10.15421/081916>

ДІАМІНОКАРБОНОВІ КОМПЛЕКСОНАТИ ГЕРМАНІЮ(IV) ЯК ПЕРСПЕКТИВНІ СТИМУЛЯТОРИ ФІЗІОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ РОСЛИН

*Дмитро Печінка¹, Олена Марцінко¹, Олена Фінік², Інна Сейфулліна¹, Євген Фадєєв²,
Ольга Снурнікова², Олена Песарогло³*

¹Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, Одеса, Україна

²ВЦ ТОВ «ІНСПЕКТОРАТ УКРАЇНА», Одеса, Україна

³Одеський державний аграрний університет, Одеса, Україна

e-mail: d.pechinka@gmail.com

Розробка безпечних і ефективних препаратів, здатних стимулювати ріст харчових рослин та збагачувати їх корисними речовинами, – одна з важливих задач сучасної агрохімії. Загально відомими стимуляторами є амінокарбоніві комплексонати металів, застосування яких покращує ріст кореневої системи, підвищує імунітет рослин до захворювань та їх стійкість до стресів, таких як посуха. Їх використовують як в традиційному ґрунтовому сільському господарстві, так і в гідропоніці.

В результаті систематичних досліджень авторами показано, що комплексонати германію(IV) є перспективними регуляторами росту рослин. Наприклад, запатентовано амоній етилендіамінтетраацетатогерманат(IV), який сприятливо впливає на ріст і розвиток озимої пшениці. Відомо, що позитивний ефект деяких рослин (часник, алое, женьшень) на живий організм частково пов'язаний з підвищеним вмістом германію, який виступає імуномодулятором та антиоксидантом. Тому створення агрохімічних препаратів на основі координаційних сполук германію(IV), які природним чином стимулюють фізіологічні процеси рослин є перспективним напрямом.

Розроблено методику синтезу та встановлено будову онієвих комплексонатів германію(IV) на основі етилендіамінтетраоцтової (H_4Edta), 2-гідроксипропілен-1,3-діамінтетраоцтової (H_5Hpdt) кислот та нікотинамиду (Nad). Сполуки охарактеризовано методами елементного аналізу, ІЧ-спектроскопії та термогравіметрії. Методом мас-спектрометрії доведено існування протонованої форми $HNad^+$ та комплексних аніонів $[Ge(OH)(Edta)]^-$ та $[Ge(OH)(HNpdt)(H_2O)]^-$.

Досліджено вплив обробки насіння гороху Baltrap (рис. 1) водними розчинами сполук $(HNad)[Ge(OH)(Edta)] \cdot H_2O$, $(HNad)[Ge(OH)(HNpdt)(H_2O)]$ на його ріст, вміст білку та германію в порівнянні з контролем (вода) та комплексним добривом. Показано виразну стимулюючу дію комплексу $(HNad)[Ge(OH)(Edta)] \cdot H_2O$ на початкових етапах росту і розвитку мікрозелені гороху та приросту вегетативної маси на 6 % порівняно з контролем. Обробка насіння призводила до підвищення в мікрозелені вмісту білка (для $(HNad)[Ge(OH)(Edta)] \cdot H_2O$ – 6,4%, $(HNad)[Ge(OH)(HNpdt)(H_2O)]$ – 6,65%, контроль – 5,22%, комплексне добриво – 5,26%) і германію ($(HNad)[Ge(OH)(Edta)] \cdot H_2O$ – 218 ppm, $(HNad)[Ge(OH)(HNpdt)(H_2O)]$ – 180 ppm, контроль – 4,2 ppm, комплексне добриво – 2,8 ppm).

Отримані результати свідчать про перспективу подальшого вивчення впливу передпосівної обробки насіння комплексонатами германію(IV) на підвищення врожайності, стійкості до стресу, посилення антиоксидантних та імуностимулюючих властивостей оброблених рослин.



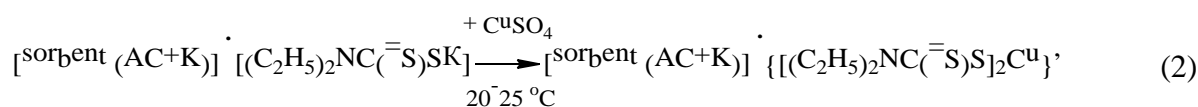
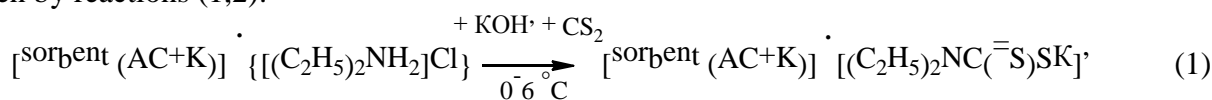
Рис. 1. Обробка насіння гороху Baltrap та вплив водних розчинів комплексонатів германію(IV) $(HNad)[Ge(OH)(Edta)] \cdot H_2O$ (4), $(HNad)[Ge(OH)(HNpdt)(H_2O)]$ (5) на вегетативну масу мікрогріну в порівнянні з контролем (вода, 6) та комплексним добривом (7)

OBTAINING MODIFIED THICKENERS BY TOPOCHEMICAL TRANSFORMATIONS ON A SOLID SURFACE

Anatoliy Ranskiy, Olha Sandul, Olga Gordienko, Taras Titov, Roksolana Korinenko
Vinnitsia National Technical University, Vinnitsia, Ukraine
e-mail: sandulola11@gmail.com

Modern plastic lubricants contain lubricating fluids (petroleum, synthetic, vegetable oils), inorganic and organic thickeners (Li, Na, K, Ca - soaps, highly dispersed modified SiO₂, oleophilic graphite, MoS₂) and functional additives that provide in friction pairs high anti-wear, anti-corrosion, anti-friction and other operational properties [1,2].

Such properties of plastic lubricants are determined mainly by the type of thickener used. Thus, in work [3] we obtained and studied new C,S,N-containing plastic lubricants using industrial waste as secondary raw materials. The regeneration of mixed sorbents of activated carbon (AC) Dekolar A and kieselguhr (K) Bekogur 200 and Bekogur 3500 (PP "VF "Panda", Vinnitsia) was carried out according to [4], and the sequence of topochemical reactions on the surface (AC+K) is given by reactions (1,2):



The developed new C,N,S-containing plastic lubricants contained a new thickener in the form of a structured frame with a modified surface, which provided them with high operational properties. Modification of the surface of activated carbon (AC) was provided by the final adsorption of bis-(diethyldithiocarbamate)copper(II), and the surface of kieselguhr (K)/silica gel by the formation of surface structures between the sorbed fragment of monoethanolamine and ethylamine (N→B) borane.

Performed industrial tests of the obtained plastic lubricants at PP "Eksim" (Kherson) proved that when using the developed plastic lubricants, the temperature in the friction nodes did not exceed the standard values in accordance with GOST 1033-79. At the same time, the surface of the bearing rolls remained clean, smooth, without rolls and cracks after 12 months of preventive observations.

1. X. Shao, I. Wang, Y. Yang, T. Yang, G. Deng, Y. He, et al. 2023, 181, 108306. <https://doi.org/10.1016/j.triboint.2023.108306>
2. A.P. Ranskiy, S.V. Boichenko, O.A. Gordienko, N.O. Didenko, V.A. Voloshynets. 2012, Vinnitsia VNTU, 328. <https://press.vntu.edu.ua/index.php/vntu/catalog/book/207>
3. A. Ranskiy, O. Sandul, O. Gordienko, N. Didenko, T. Titov. 2024, Vol.1, №6(127), 13-21. <https://doi.org/10.15587/1729-4061.2024.296622>
4. H. V. Sakalova, O.M. Sandul, A.P. Ranskiy, T.M. Vasylynych. 2024, Visnyk VPI, 3, 14-20. <https://doi.org/10.31649/1997-9266-2024-174-3>

ПОРФІРИНИ, КОРОЛИ ТА ФТАЛОЦІАНІНИ ЯК СЕНСИБІЛІЗАТОРИ 4f-ЛЮМІНЕСЦЕНЦІЇ

Микола Семенішин¹, Валерія Лінник^{1,2}, Наталя Русакова¹

¹Фізико-хімічний інститут ім. О.В. Богатського НАН України, Одеса, Україна

²ОНУ імені І.І. Мечникова, Одеса, Україна

e-mail: ssmbikola@yahoo.com

Завдяки розвиненій π -системі для всіх тетрапірольних макроциклів та їх похідних характерно дуже ефективно світлопоглинання ($\lg \epsilon > 5$), емісія у видимому діапазоні у вигляді надшвидкої т.з. блакитної флуоресценції, молекулярної флуоресценції та у ближньому інфрачервоному (ІЧ) діапазоні у вигляді фосфоресценції. Ці ключові особливості вже дозволяють використовувати власне макроциклічні тетрапіроли та їх численні металопохідні у якості компонентів сонячних батарей DSSC, як сенсорні системи для визначення різних металів, газів та інших речовин, як агенти для фотодинамічної терапії та люмінесцентної діагностики, тощо. Окремо виділимо комплекси тетрапіролів з лантанідами, в яких може реалізуватися 4f-сенсibilізаційна активність відносно ІЧ-випромінюючих іонів лантанідів (Yb^{3+} , Er^{3+} , Nd^{3+} тощо) за рахунок низько розташованих триплетних донорних рівнів тетрапіролів. Потенційно такі системи здатні до ефективного ІЧ-випромінювання, що є вельми затребуваним у медицині та техніці завдяки цілій низці переваг використання саме цього діапазону в порівнянні з іншими.

У представленій роботі розглянуто комплекси лантанідів з порфіринами, королами та фталоціанінами, як найбільш відомими та перспективними представниками класу макроциклічних тетрапіролів. Запропоновано використання не тільки “core-coordinated” лантанід-тетрапіролів, але й комплексів на основі політопних тетрапіролів, що надає сполукам можливість селективно взаємодіяти з іонами металів. Також запропоновано отримання багатопалубних координаційних сполук, сполук, що мають у складі різні макроциклічні тетрапіроли, а також полядерних f-f, f-p та f-d сполук.

В роботі вперше синтезовано АПК-модифікований корол (АПК – амінополікарбонова кислота), вперше синтезовано лантанід-короли та вперше продемонстровано 4f-сенсibilізуючу активність королів. Окрім того вперше виявлено 4f-сенсibilізуючу активність фталоціанінів. Показано принципові відмінності емісійних властивостей лантанід-королів та лантанід-порфіринів. Показана залежність емісійних характеристик від природи іона лантаніду у різнолігандних комплексах.

Отримано регіоізимери АПК-королу та АПК-порфірину та комплекси лантанідів вна їх основі. Виявлено залежність ефективності 4f-сенсibilізації в ряду відповідних ізомерів від певних структурних параметрів. Показано що просторове взаєморозташування донора (хромофора) та акцептора (іона лантаніду) відіграє ключову роль та може в декілька разів змінювати інтенсивність 4f-люмінесценції.

СТРУКТУРНІ ОСОБЛИВОСТІ π -КООРДИНАЦІЙНИХ СПОЛУК КУПРУМУ(I) З АЛІЛЬНИМИ ПОХІДНИМИ 1,2,4-ТРИАЗОЛУ

Юрій Сливка¹, Дмитро Дмитрів¹, Evgeny Goreshnik², Андрій Батюк¹

¹Львівський національний університет

імені Івана Франка, вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

² Jožef Stefan Institute, Jamova 39, SI-1000 Ljubljana, Slovenia

e-mail: yurii.slyvka@lnu.edu.ua

1,2,4-Тріазоли мають широкий спектр застосувань у фармації, виявляючи протигрибкову, противірусну, гербіцидну та інші активності. Їхні різноманітні функціональні похідні виявились зручними лігандами для конструювання численних металоорганічних сполук перехідних металів, які володіють біохімічними, каталітичними та люмінесцентними властивостями. Не менш цікавими з точки зору конструювання купрум-вмісних функціональних матеріалів виявились алільні похідні 1,2,4-тріазолу, спектр координаційної активності яких розширений можливістю координації до ц.а. ненасиченого зв'язку алільного радикалу [1, 2]. В нашій роботі використовуючи метод змінно-струмного електрохімічного синтезу одержано серію кристалічних π, σ -комплексів Cu(I) на основі 5-тіоалільних похідних 1,2,4-тріазолу. 3-Алілтіо-4-аліл-5-феніл-1,2,4-тріазол (L1) виявляє тенденцію до формування стійких будівельних блоків $\{Cu_2(L1)_2Hal_2\}$, які є основним конструкційним елементом у побудові гомо- та гетерометалічних координаційних сполук. У кристалічних структурах цих комплексів молекула тріазолу виступає π, σ -містковим лігандом, координуючись до центрального іона двома атомами N гетероциклу та зв'язком C=C алільного замісника. Подібні органометалічні димери утворює 3-алілтіо-4,5-дифеніл-1,2,4-тріазол (L2) з іонними солями купруму(I), однак у присутності бромід-іона цей ліганд, зберігаючи аналогічний спосіб координації до іонів Cu(I), не утворює димерів, але формує нескінченні ланцюги $\{Cu^I Cu^{II} Br_3\}_n$. Дослідження генерації другої оптичної гармоніки кристалами одержаних комплексів показало, що ці кристали генерують сигнал вищої інтенсивності у порівнянні із кристалами самого тріазолу. Незважаючи на присутність фенілсечовинного фрагменту у N-феніл-N'-{3-алілтіо-4-аміно-5-феніл-4H-1,2,4-тріазол-4-іл}сечовині, тенденція до утворення димерних конструкційних блоків не змінюється і ці димери поєднуються курогалогенідними містками у драбиноподібний нескінченний ланцюг $\{Cu_4(L3)_2Hal_4\}_n$. 5-(2-піридил)-заміщені похідні тріазолів активно координуються до ц.і. також і гетероатомом піридилного ядра, вносячи зміни у побудову 1D-координаційних полімерів.

Юрій Сливка висловлює подяку організації Simons Foundation за фінансову підтримку (“Grant for chemists of Lviv University”, ID – 1290588)

Література:

- [1] O.R. Hordiichuk, Y.I. Slyvka, V.V. Kinzhybalo, E.A. Goreshnik, T.J. Bednarchuk, O. Bednarchuk, J. Jedryka, I. Kityk, M.G. Mys'kiv, Construction of heterometallic and mixed-valence copper(I/II) chloride π -complexes with 1,2,4-triazole allyl-derivative, *Inorganica Chim. Acta.* 495 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.ica.2019.119012>.
- [2] A.M. Fedko, Y.I. Slyvka, E.A. Goreshnik, J. Jedryka, P. Rakus, D. Morozov, Crystal structure, computational study and nonlinear optical properties of the novel copper(I) π, σ -complexes based on 3,4-diphenyl-5-allylsulfanyl-4H-1,2,4-triazole, *J. Mol. Struct.* 1319 (2024 (online version)) 139552. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2024.139552>.

НОВІ КОМПЛЕКСИ РІДКІСНОЗЕМЕЛЬНИХ МЕТАЛІВ З 3-(2-ПІРИДИЛ)-1,2,4-ТРИАЗОЛВМІСНИМ ЛІГАНДОМ ТА ЛЮМІНЕСЦЕНТНІ ГІБРИДНІ МАТЕРІАЛИ НА ЇХ ОСНОВІ

Сергій Смола¹, Олександр Коровін¹, Валерія Галущенко^{1,2}, Дмитро Хоменко³, Ростислав Лампека³, Наталя Русакова¹

¹Фізико-хімічний інститут ім. О.В. Богатського НАН України, Одеса, Україна

²Факультет хімії та фармації Одеського національного університету імені І.І. Мечникова, Одеса, Україна

³Хімічний факультет Київського національного університету імені Тараса Шевченка, Київ, Україна

e-mail: sssmola@gmail.com

Комплексні сполуки рідкісноземельних елементів з полідентатними N,O-донорними лігандами відіграють ключову роль у сучасній координаційній хімії. Їхня здатність легко регулювати властивості комплексу металів, наприклад люмінесценцію, за допомогою простих структурних модифікацій лігандів робить їх ідеальними для розробки нових люмінофорів із різноманітними кольорами випромінювання. Похідні 1,2,4-триазолу є особливо ефективними у якості лігандів, сприяючи утворенню координаційних сполук із заданим складом та структурами. Крім того, ці похідні є привабливими як низькомолекулярні флуорофори і можуть функціонувати як лінкери між кількома молекулярними блоками.

У роботі представлено результати дослідження комплексів рідкісноземельних металів з новим лігандом, що являє собою 3-(2-піридил)-1,2,4-триазол з естерною групою. Кристалічна та молекулярна структура $[La(NO_3)_2L_2]$ визначена методом рентгеноструктурного аналізу (рис. 1). Комплекси з подібними структурами, де Ln = Nd, Eu, Gd, Tb і Lu, були охарактеризовані за допомогою ¹H ЯМР, ІЧ, ESI мас-спектрометрії, UV-VIS та фотолюмінесцентної спектроскопії при 77K і 298K. Експериментальні дані проаналізовано для сполук у розчинах та у кристалічному стані. Слід зазначити, що комплекси Eu(III) і Tb(III) демонструють червоне (максимальна інтенсивність при 614 нм) і зелене (546 нм) випромінювання, відповідно. Комплекси Nd(III) випромінюють в ближньому інфрачервоному діапазоні. Спектроскопічні властивості сполук були ретельно вивчені.

Враховуючи, що метильна група у складнофірному фрагменті модифікованого ліганду 3-(2-піридил)-1,2,4-триазолу може бути легко замінена в спиртових розчинах, було можливо ковалентно приєднати $[Ln(NO_3)_2L_2]$ до неорганічної матриці, отриманої з відповідного прекурсорів-алкоксидів, а саме тетраетоксисилану, ізопропоксиду алюмінію, бутоксиду титану за допомогою золь-гель методу. Цей підхід дозволив синтезувати люмінесцентні гібридні матеріали на різних неорганічних носіях, властивості яких згодом були вивчені. Гібридні матеріали показали характерну Ln-центровану люмінесценцію при 2% вмісті комплексу, показники якої зберігаються з тими, що спостерігаються в молекулярних комплексах.

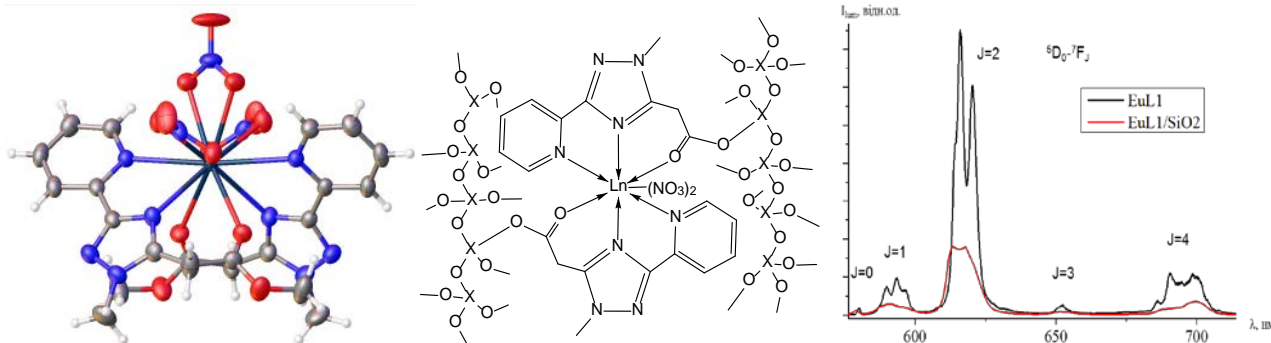


Рис. 1. Кристалічна структура $[LaL_2(NO_3)_2]$, умовна будова люмінесцентного блоку у гібридних матеріалах (Ln = Nd(III), Eu(III), Tb(III), X = Si(IV), Ti(IV), Al(III)), порівняння спектрів люмінесценції комплексу європію та гібридного матеріалу на його основі

REGULARITIES OF FORMATION OF HETEROMETALLIC LUMINESCENT COMPLEXES OF LANTHANIDES AND 3d METALS WITH AMINOPOLYCARBOXYLIC ACIDS

Olena Trunova, Oleksandra Berezhytska, Liudmyla Sliusarchuk, Tamara Makotryk

V.I. Vernadsky Institute of General and Inorganic Chemistry of the NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine
e-mail:trekon@gmail.com

The synthesis of new f-d heterometallic complexes (HMC) with polydentate structure-forming aminopolycarboxylate ligands is currently an urgent task. There are still open questions regarding the influence of the nature of metals on the composition, structure and properties of such complexes, the possibility of their use as precursors for obtaining luminescent materials. It is in d-f-metal complexes that d metals can be used both as «antennas» of energy transfer for sensitization of the 4f-luminescence of Ln^{III} ions, and as «energy gaps» between the triplet level of the ligand and the emission level of the lanthanide ion, which facilitates the sensitization of its luminescence.

Heterometallic d-f complexes of metals with ethylenediaminedisuccinic (H₄EDDS, L¹) and ethylenediaminetetraacetic (H₄EDTA, L²) acids were synthesized by the «block» synthesis method, in which mononuclear complexes of 3d elements act as building blocks with vacant chelate nodes, and free donor atoms of the ligands perform bridge function. At the same time, simultaneous complexation occurs on two coordination centers (N,O) due to the incompletely realized dentateness of the ligand in relation to one metal ion. New heterometallic complexes of the general formula [(LnML^{1,2})·(H₂O)_n]·nH₂O (Ln^{III}= Nd, Pr, Er; Yb, Gd; Dy; M^{II}=Zn, Co) were synthesized, their structure was determined, and their spectral luminescent characteristics.

Heterometallic aminopolycarboxylate complexes belong to the «coiled» type complexes and are coordination polymers. The ligand-complexon realizes the maximum dentateness to Ln^{III} ions, and the coordination sphere of the 3d cation is formed by the chain carboxyl groups of the ligands and intrasphere water molecules. Both EDTA and EDDS are maximally dentate in relation to Ln^{III} ions, and the coordination sphere of 3d metal ions is formed by bridging oxygen atoms of carboxylate groups of ligands and intraspherical water molecules. In complexes with EDTA, the lanthanide coordination polyhedron is formed due to the hexadentate coordination of one molecule of the complex (2N+4O), two oxygen atoms of COO⁻ groups of the complex ion [MO₄]²⁻. In ethylenediaminedisuccinate complexes, the Ln^{III} coordination environment is formed due to the 5-dentate coordination (2N+3O) of one EDDS ion and 3 water molecules. The M^{II} ion is bound monodentately to the bridging β-carboxyl group and bidentately to the oxygen atoms of two α-carboxyl groups of the EDDS molecule. At the same time, heteronuclear ethylene diamine tetraacetates are 2-3 orders of magnitude more stable than HMC with EDDS, which is due to the different sizes and number of chelate cycles. Cations of 3-d metals are in a distorted octahedral environment, and the coordination polyhedron of the lanthanide ion corresponds to a single-capped square antiprism with the coordination number Ln^{III}=8.

The spectrophotometric characteristics (oscillator power, nepheloxetic effect, Judd – Ofelt parameters) of heteronuclear complexes are compared. It was found that the oscillator forces in EDDS-based complexes are greater than in EDTA-based complexes, which is explained by differences in the structure of the coordination environment of the lanthanide ion in the corresponding compounds. Sensitization of 4f-luminescence of lanthanide ions due to intramolecular d → f energy transfer is observed in heterometallic complexes. The quantum yield of 4-f luminescence is greater for HMC than for monometallic compounds regardless of the complexone, while φ is greater for ethylenediaminedisuccinates than for ethylenediaminetetraacetates.

FEATURES OF SYNTHESIS AND STRUCTURE OF COORDINATION POLYMER Ni(II) WITH 2-(4-BROMOPHENOXY)ACETOHYDRAZIDE

Kyrylo Tsymbaliuk^{1,2}, *Olena Martsynko*¹, *Olena Finik*², *Mariia Nesterkina*³, *Iryna Kravchenko*³,
*Viktoriya Dyakonenko*⁴, *Svitlana Shishkina*^{4,5}

¹Odesa I.I. Mechnikov National University, Odesa, Ukraine

²LLC „INSPECTORAT UKRAINE“, Odesa, Ukraine

³Helmholtz Institute for Pharmaceutical Research Saarland (HIPS) – Helmholtz Centre for Infection Research (HZI), Saarbrücken, Germany

⁴SSI “Institute for Single Crystals”, National Academy of Sciences of Ukraine, Kharkov, Ukraine

⁵Institute of Organic Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine

e-mail: kiorgg@yahoo.com

Drugs having the hydrazide functional group are an important category within antituberculosis, antibacterial, antifungal, and antimicrobial pharmaceuticals. The coordination of hydrazides to biometal ions often leads to an increase in the biological activity of compounds, as well as an expansion of its spectrum. Thus, the study of complexation of new hydrazides with transition metals opens the way to the synthesis of more effective drug substances with a wide spectrum of pharmacological action.

2-(4-bromophenoxy)acetohydrazide (L) was obtained from the corresponding ester by reaction with hydrazine hydrate in refluxed methanol (Fig.1). Ester precursor was synthesized from *p*-bromophenol by reaction with methyl chloroacetate.

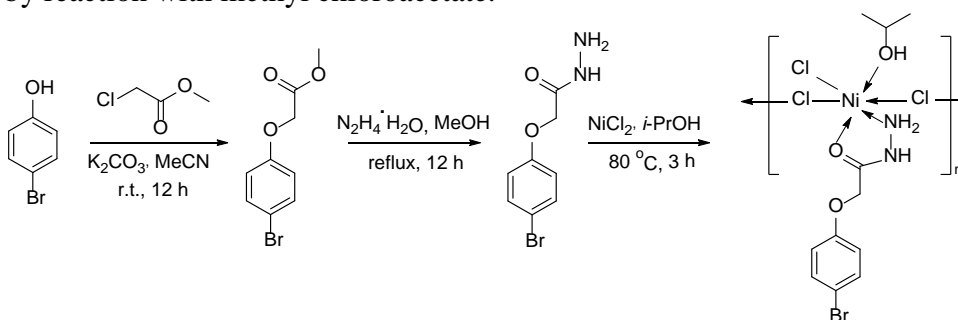


Fig. 1. Synthesis of coordination compound $[\text{NiCl}_2\text{L}(2\text{-PrOH})]_n$

Using the method of thermogravimetric analysis, it was established that in range 80–210°C one molecule of solvated 2-propanol is removed to the gas phase. The IR spectrum of complex exhibits that the ligand carbonyl stretching band is relocated to lower frequency by 45 cm^{-1} : $\nu(\text{C}=\text{O}) = 1653 \text{ cm}^{-1}$. Also, $\delta(\text{C}=\text{O})$ and $\gamma(\text{C}=\text{O})$ ligand bands undergo shifts by 7 and 5 cm^{-1} , respectively. There are changes in the position of bands of valence vibrations $\nu_{\text{as}}(\text{NH}_2)$, $\nu_{\text{s}}(\text{NH}_2)$, $\nu(\text{NH})$, and their intensity after coordination with Ni(II). According to the X-ray diffraction study, it was determined that the coordination compound exhibits a polymeric structure (Fig. 2). Complexing agent is six-coordinated, its distorted octahedron forms due to bidentate coordination of 2-(4-bromophenoxy)acetohydrazide through the carbonyl oxygen atom and the amine nitrogen, and oxygen of molecule of isopropanol, chlorine atom and also two chlorine atoms, which serve as bridges between two metal atoms.

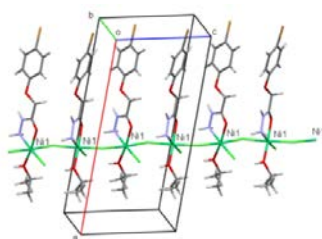


Fig. 2. Polymeric chain in the [001] crystallographic direction in the crystal $[\text{NiCl}_2\text{L}(2\text{-PrOH})]$

ВЗАЄМОДІЯ КЛАСТЕРУ РЕНІЮ(III) З СУРФАКТИНОМ

Олена Величко

Український державний університет науки і технологій, ННІ Український державний хіміко-технологічний університет, Дніпро, Україна
e-mail: lenavelichko87@gmail.com

Розширення класу координаційних сполук, які містять у своєму складі біядерний центр Re_2^{6+} , є важливою теоретичною і практичною задачею. Біядерний кластер ренію(III) з почверним зв'язком метал-метал надає комплексним речовинам антирадикальні, протипухлинні, антиоксидантні властивості. Приєднання до цього фрагменту біологічно активних лігандів дозволяє розширити коло координаційних сполук, які можуть проявляти нові види біоактивності.

Для дослідження такого приєднання був випробуваний сурфактин – ліпопептид, що є потужним біосурфактантом (рис.1). Він має такі властивості як: інгібування хвороб рослин, антибактеріальна, протигрибкова, противірусна, протипухлинна дія тощо. Сурфактин може бути однією з перспективних альтернатив антибіотикам.

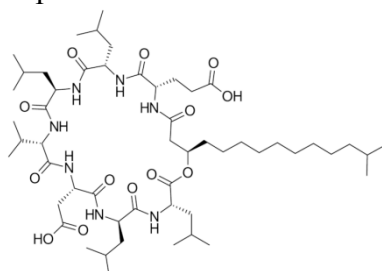


Рис. 1. Молекула сурфактину

Як вихідну сполуку ренію, що містить біядерний центр Re_2^{6+} , використали тетра-н-бутиламоній октахлоридиренат(III) $(NBu_4)_2Re_2Cl_8$. Реакцію між речовинами проводили у суміші CH_3CN та CH_3OH при мольному співвідношенні 1:2 (у надлишку сурфактин) за кімнатної температури протягом 60 хв. Реакційний розчин випарювали, отриманий осад перекристалізували в ізопропіловому спирті для очищення від вихідних сполук. Підтвердження взаємодії кластеру(III) з сурфактином проводили за допомогою UV-Vis спектроскопії.

У Vis спектральній картині (рис. 2) наявний єдиний максимум поглинання при 615 нм, що може свідчити про утворення дикарбоксилату диренію(III) з цис-розташуванням екваторіальних лігандів. Молекули CH_3CN займають аксіальні положення у комплексній сполуці. Отриманий продукт розчинний в полярних органічних розчинниках (CH_3CN , спиртах, ДМСО тощо).

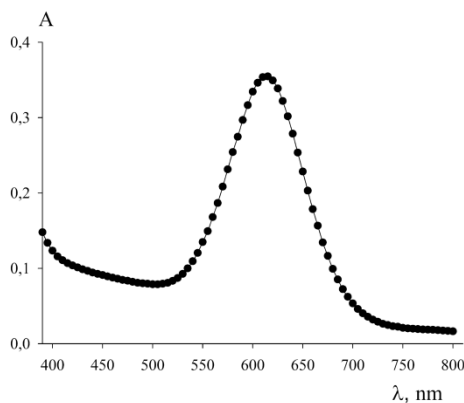
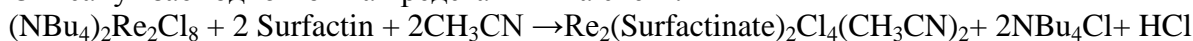


Рис. 2. Vis спектр продукту взаємодії $(NBu_4)_2Re_2Cl_8$ та Surfactin в CH_3CN (1,624 г\л)

Описану взаємодію можна представити на схемі:



Секція 3.
АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ТЕРМООБРОБКИ КРОХМАЛЮ

Дмитро Гречка, Вікторія Миргородська-Терентьєва, Микола Ніколенко

Український державний університет науки і технологій

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

e-mail: kshisyal11@gmail.com

Крохмаль є важливою сировиною для різних галузей промисловості, зокрема хімічної та харчової промисловості, для виготовлення клеючих засобів в целюлозно-паперовій та текстильній промисловостях, будіндустрії, фармації тощо. Аналіз сучасних науково-технічних публікацій, що присвячені дослідженню крохмалів та процесів їх модифікації і виробництва, показав, що серед різноманітних методів модифікації крохмалів особливо привабливим є методи фізичної модифікації, а саме метод їх термічної обробки. Очевидною перевагою процесу термообробки є те, що простою зміною його умов можна одержувати декстрини з різними функціональними властивостями, тобто розширювати асортимент модифікованих крохмалів на ринку, підлаштовуючись під конкретні потреби користувачів. Однак, до тепер рівень прогнозування зміни властивостей крохмалів внаслідок їх термообробки залишається невисоким, що обумовлено недостатньою вивченістю механізмів процесів декстринізації, а саме, їх кінетичних параметрів та залежності швидкості процесів де- і реполімеризації полісахаридів від ступеню їх гідратації та присутності хімічних модифікаторів процесу. Тому дослідження процесів термічної модифікації крохмалів досі зостаються актуальними і перспективними для розширення асортименту модифікованих крохмалів [1].

Як відомо, варіювання умов процесу декстринізації крохмалів (а саме температури, тривалості термообробки, застосування каталізаторів, ступеню початкової вологості тощо) в той чи іншій мірі впливає на хімічний склад декстринів, що зрештою визначає властивості їх клейстерних розчинів. Механізм процесу клейстеризації, по-суті, визначається хімічним складом природних полімерів амілози та амілопектину. Насамперед йдеться про наявність гідроксо-груп, які беруть участь в утворенні водневих зв'язків як між молекулами полімерів, так із водою. Очевидно, що варіюванням кількості гідроксо-груп біополімерів шляхом зв'язування їх в ефірні зв'язки С-О-С можливо цілеспрямовано впливати на властивості крохмалю і на процеси його клейстеризації. В нашій роботі методом моделювання хіміко-технологічного процесу, а саме застосовуючи спосіб планування повнофакторного експерименту визначено математичну модель процесу декстринізації крохмалю. Як фактори, що впливають на процес термічної модифікації було обрано концентрації фосфорної та соляної кислот і час замочування. Як функцію відгуку обрано розчинність одержаних зразків декстрину. Статистичний аналіз рівняння регресії показав, що отримане рівняння моделі адекватне. Встановлено, що оптимальними умовами для одержання декстрину є фосфорна кислота з часом замочування 10 годин. Одержана математична модель показала, що визначальним фактором є не тільки час кислотної обробки, але і концентрація кислоти. При чому залежність між концентраціями кислот і розчинністю є немонотонною. Експериментально доведено, що з ростом кислотності розчинів клейстерів знижується енергія активації процесу вилугування амілози, що обумовлено впливом іонів гідрогену на міцність водневих зв'язків. Вперше запропоновано інтенсифікувати процес гідротермічного вилугування амілози з крохмалю за рахунок використання кислих середовищ без додаткового нагрівання крохмальних суспензій [2].

- [1] Hydrothermal leaching of amylose from native, oxidized and heat-treated starch / M.V. Nikolenko, V.D. Myrhorodska-Terentieva, Yu. Sakhno, D.P. Jaisi, B. Likozar, A. Kostyniuk // *Processes*. – 2023. – Vol. 11(5). – 1464.
- [2] Pseudocatalytic acceleration of hydrothermal leaching of amylose from starch in acidic media / V.D. Myrhorodska-Terentieva, M.V. Nikolenko, I.V. Sknar, Ye.S. Osokin, O.V. Prylovskiy, O.V. Volnyanska, M.O. Mironyak // *Voprosy khimii i khimicheskoi tekhnologii*. – 2023. – Vol. 5. – С.89-97.

4-ГІДРОКСИСТИРИЛОВІ БАРВНИКИ ЯК МУЛЬТИФУНКЦІОНАЛЬНІ ХЕМОСЕНСОРИ

Юлія Жукова, Ярослав Студеняк

ДВНЗ “Ужгородський національний університет”, Ужгород, Україна

e-mail: yuliia.zhukova@uzhnu.edu.ua

4-гідроксистирилові барвники (4-ГСБ), представляють собою важливу категорію органічних сполук, які мають широке застосування в хімії, фізиці, біології, матеріалознавстві та нанотехнологіях. Унікальні оптичні характеристики та цікаві хімічні властивості барвників дозволяють застосовувати їх як мультифункціональні хемосенсиори, а у поєднанні з високою чутливістю та селективністю, відкривають нові перспективи для їх застосування у різних сферах. Вивчення і подальше вдосконалення цих барвників може привести до значних досягнень у технології сенсорів і моніторингу навколишнього середовища. Крім того, їх здатність до швидкого реагування та простота у використанні роблять їх ідеальними для застосування в реальних умовах.

Синтезовано ряд сполук похідних 1,3,3-триметил-3Н-індолю, 1,5,6-триметилбензтіазолію, 4-(N-алкіл)піридинію, 4-(N-алкіл)хінолінію. Встановлено, що досліджені барвники демонструють додаткові механізми кольориметричної відповіді на зовнішні подразники, окрім світла, такі як термохромія (реакція на зміну температури), сольватохромія (реакція на зміну розчинника) і галохромія (реакція на зміну рН). З'ясовано, що 4-ГСБ мають значний потенціал для одночасного виявлення кількох параметрів і функціонального використання в різних областях як розумні матеріали і можуть надавати візуальну інформацію.

Спектрофотометричним методом досліджено світлопоглинання 4-ГСБ в інтервалі 20-70°C. Спектри світлопоглинання реєстрували на спектрофотометрі SHIMADZU-2600 з температурною приставкою ТСС-100. З'ясовано, що більшість досліджених ГСБ, залежно від кислотності середовища, можуть знаходитись не менш як у трьох формах, причому дві з яких є лабільними (катіонна та мероціанінова), а в сильно лужних середовищах (рН>12) утворюється безбарвна гідроксильована форма, зворотній перехід якої у забарвлену форму не відбувається, що свідчить про руйнування системи спряження барвника. Перетворення від протонованої до мероціанінової форми супроводжується батохромним зсувом більше 100 нм, що дає можливість застосовувати 4-гідроксистирилові барвники як індикаторні системи для визначення низки параметрів харчових, промислових та об'єктів навколишнього середовища. Спектрофотометричним методом встановлені значення констант кислотності (рКа) синтезованих барвників, які знаходяться в інтервалі від 6 до 10.

Мероціанінові форми метилхінолінових та октилпіридинієвих 4-гідроксистирилових барвників у воді та деяких органічних розчинниках (етанол, пропанол-2, бутанол) проявляють термохромні властивості. 4-ГСБ мають особливу спектральну поведінку при кислотно-основній взаємодії у різних за складом середовищах, змінюючи як положення смуги світлопоглинання, так і її загальний вигляд при переході від водних до органічних середовищ та депротонуванні. Дослідження спектрів світлопоглинання 4-ГСБ у різних розчинниках засвідчило, що для всіх барвників спостерігаються, як певні зміни форми спектру, так і батохромне зміщення максимуму поглинання порівняно із водними розчинами. На значення максимальних сольватохромних зміщень вирішальний вплив справляє природа гетероциклічного фрагменту.

З вищевказаного можна зробити висновок, що один із механізмів дії цих барвників як хемосенсорів базується на їхній здатності до взаємодії з різними хімічними агентами або іонами, що призводить до змін у їх оптичних характеристиках. У майбутньому очікується подальший розвиток технологій на основі 4-гідроксистирилових барвників, що включатиме створення нових чутливих сенсорних систем та розширення їх застосування в різних галузях науки та промисловості.

**МІЦЕЛЯРНО-ЕКСТРАКЦІЙНЕ КОНЦЕНТРУВАННЯ ТА
СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ГЕРМАНІЮ(IV)
З ПОХІДНИМИ 6,7-ДИГІДРОКСИБЕНЗОПІРИЛІО**

Олена Жуковецька¹, Олена Гузенко¹, Денис Снігур¹, Тетяна Щербакова¹
¹Одеський національний університет імені І. І. Мечникова, Одеса, Україна
e-mail: snigur@onu.edu.ua

Застосування міцелярної екстракції (СРЕ) для попереднього концентрування та подальшого визначення різноманітних аналітів в останні роки привертає особливу увагу. Здатність розширюватися на дві фази мають водні розчини поверхнево-активних речовин (ПАР) усіх типів, проте найбільш часто застосовується СРЕ фазами неіоногенних ПАР. Відповідна хімічна система існує як псевдооднорідний міцелярний розчин при низьких температурах, але при нагріванні вище певної критичної температури («точки помутніння») стає каламутним і розширюється на дві фази: одна з них, збагачена ПАР, - (міцелярна фаза), а інша – водна фаза.

Метою даної роботи є вивчення умов утворення міцелярної фази, екстракції комплексу бромиду 6,7-дигідрокси-4-метил-2-фенілбензопірилію (МФДОХ) з Германієм(IV) та встановленні аналітичних характеристик комбінованої екстракційно-спектрофотометричної методики його визначення.

У даній роботі вивчено та оптимізовано умови міцелярно-екстракційного концентрування Ge(IV) у вигляді комплексу з бромідом 6,7-дигідрокси-2-феніл-4-метилбензопірилію у міцелярну фазу неіоногенного ПАР тритону X-100. Показано, що введення в систему бензоату амонію при рН 1.0 та концентрації тритону X-100 0.5 об.% призводить до ініціювання утворення міцелярної фази за кімнатної температури. Розроблено методику спектрофотометричного визначення Ge(IV) після його міцелярно-екстракційного концентрування. Градувальний графік лінійний в інтервалі концентрацій 4,36–472 мкг/л, а межі виявлення та визначення відповідно дорівнюють 1,31 та 4,36 мкг/л. Запропонована методика апробована при аналізі модельних розчинів та біологічно-активної добавки, а відносно стандартне відхилення не перевищує 5,1% (таблиця 1).

Таблиця 1. Результати визначення Ge(IV) у модельному розчині та дієтичній добавці
(n = 3; P = 0,95)

Об'єкт аналізу	Знайдено пропонованим методом	RSD, %	Знайдено ICP-OES	RSD, %
Модельний розчин*	198±10,6 мкг/л	5,1	195±12,1 мкг/л	5,9
Дієтична добавка**	19,8±0,98 мкг/мл	4,7	19,6±1,01 мкг/мл	4,9

*модельний розчин містить 200 мкг/л Ge(IV); ** містить 20 мкг/мл Ge(IV) у формі цитрату.

Як видно з таблиці 1, результати визначення Ge(IV) з МФДОХ після міцелярно-екстракційного концентрування узгоджуються із результатами, одержаними методом ICP-OES, що свідчить про їх правильність, а відносна похибка визначення за розробленою методикою не перевищує 5,1%.

Таким чином, в даній роботі вивчено умови ініціювання міцелярної фази Тритону X-100, яка придатна для аналітичного концентрування Ge(IV) у формі його комплексу із реагентом МФДОХ. Показано, що градувальний графік для спектрофотометричного визначення Ge(IV) після його міцелярно-екстракційного концентрування лінійний в інтервалі концентрацій 4,36–472 мкг/л. Запропоновану методику апробовано при аналізі модельних розчинів та біологічно-активної добавки.

COMPOSITION OF THE MEMBRANE OF A POTENTIOMETRIC SENSOR WITH OPTIMUM ELECTROACTIVE CHARACTERISTICS

Oksana Ivanenko, Olena Volnyanska, Maria Mironyak, Oksana Labyak, Mykola Nikolenko

Ukrainian State University of Chemical Technology of the
Ukrainian State University of Science and Technologies, Dnipro, Ukraine

e-mail: kyxa20032504@gmail.com

Currently, environmental pollutants, namely dyes, are widely used in various industries. After initial use, they enter water bodies directly or through drains, which negatively affects the ecosystem. Therefore, the determination of organic pollutants of water resources is an urgent issue that prompts the development of membrane potentiometric sensors for the express determination of the content of such substances in environmental objects.

The azo dye - quinoline yellow - was chosen as the object of research. It is used to color food products (beverages, cereals, confectionery), cosmetics (lipsticks, soaps, hair care products), pharmaceuticals (Coldrex, Flukold, Alochol, Espumizan) and others.

It is known that polyvinyl chloride membranes based on supramolecular compounds with organic substances are promising membranes for the further development of potentiometric sensors based on them for the determination of organic substances in various objects of research.

The results of the study of a polyvinyl chloride membrane based on supramolecular compounds with quinoline yellow, which can be used as a chemical sensor in the potentiometric determination of quinoline yellow in environmental objects and industrial products, are presented.

The composition of the membrane of the potentiometric sensor contains polyvinyl chloride (matrix base), dibutyl phthalate (solvent-plasticizer), supramolecular electrode-active substance based on Mg-Al with quinoline yellow (Mg-Al-Hin).

The effect of various factors on the electroactive characteristics of the polyvinyl chloride membrane of the potentiometric sensor was studied experimentally: the nature of the membrane solvent - plasticizer, the content of supramolecular electrode active substance in the membrane, the pH value of the investigated solution. The polyvinyl chloride membrane electrode works in the range of pH=5-9, the optimal pH value is 6.0, since the best results are achieved with the content of the supramolecular electrode active substance Mg-Al-Hin at the level of 10 mg when used as a solvent-plasticizer - dibutyl phthalate. At the same time, the slope of the electrode function of the polyvinyl chloride membrane of the potentiometric sensor maintains a constant value of ~ 30 mV/pC, which is close to the theoretical value for doubly charged ions. The electrode function of the polyvinyl chloride membrane of the potentiometric sensor is linear in the concentration range of 10^{-2} - 10^{-4} mol/l, the internal solution of the membrane potentiometric sensor is $1 \cdot 10^{-2}$ mol/l quinoline yellow solution, the minimum detectable concentration of quinoline yellow is $1 \cdot 10^{-4}$ mol/l.

The proposed composition of the membrane makes it possible to use a polyvinyl chloride membrane as a chemical sensor for the quantitative determination of quinoline yellow, to make simple, quick and reliable potentiometric sensors with optimal electroactive characteristics using it.

Therefore, the polyvinyl chloride membrane of the potentiometric sensor can be used in analytical chemistry and various laboratories, as well as applied in the potentiometric determination of quinoline yellow in industrial products and environmental objects.

SYNTHESIS OF SiO₂ WITH COVALENTLY IMMOBILIZED 1,10-PHENANTHROLINE DERIVATIVES: USEFUL INDICATOR SYSTEM FOR *IN SITU* PRECONCENTRATION AND DETERMINATION OF METAL IONS IN AQUEOUS SOLUTION

Natalia Kobylinska¹, Victor Demchenko¹, Victor Chernii²

¹A.V. Dumansky Institute of Colloids Chemistry and Chemistry of Water, NASU Kyiv, Ukraine

e-mail: kobilinskaya@univ.kiev.ua

²V.I. Vernadskii Institute of General and Inorganic Chemistry, NASU, Kyiv, Ukraine

e-mail: v.chernii@gmail.com

In analytical practice, various instrumental analytical methods like flame atomic absorption spectrometry (FAAS), electrothermal atomic absorption spectrometry, inductively coupled plasma-optical emission spectrometry, inductively coupled plasma-mass spectrometry are widely and continuously applied for determination of trace amounts of metal ions in aqueous solution. The visual test method appears to be a good alternative for the determination of trace metal ions in environmental samples due to its low detection limits, high sensitivity and low cost. In this research, the possibility of simple and highly effective preparation of silica chemically modified via 1,10-phenanthroline was studied. The synthesis of silica (SiO₂) with covalently immobilized 1,10-Phenanthroline groups (SiO₂-Phen) was carried out through a two-step approach “chemical assembly method” (Fig. 1).

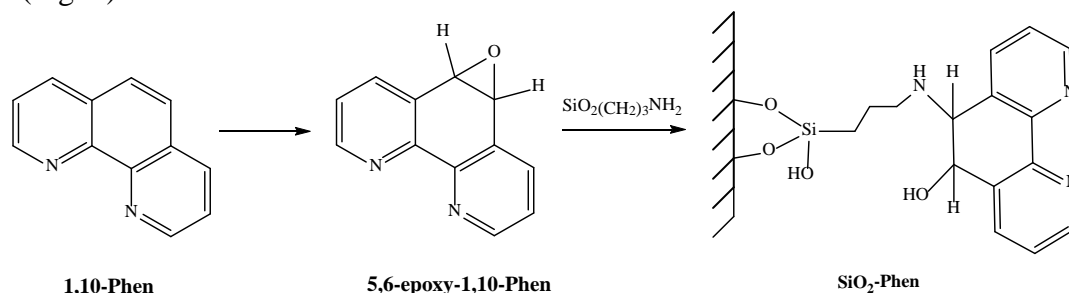


Figure 1. Synthesis of silica with covalently immobilized 1,10 phenanthroline derivative

The crucial part of the preparation procedure lies in immobilization of the organic reagent – 5,6-epoxy-5,6-dihydro-[1,10]-phenanthroline. The cluster-type distribution of immobilized aminopropyl groups on SiO₂-NH₂ has to be taken into account, otherwise undesirable arch-type structure can reduce the yield of SiO₂-Phen. In order to maximize the yield of target groups, synthesis was performed at low (room) temperatures, whereas 5,6-epoxy-5,6-dihydro-[1,10]-phenanthroline was slowly added to SiO₂-NH₂ solution to ensure an excess of the functionalizing agent. The SiO₂-NH₂ and SiO₂-Phen samples are characterized by scanning electron microscopy (SEM), Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR) measurements, acid-base pH-metric titration, elemental and thermogravimetric analysis (TGA), etc.

The SiO₂-Phen sample was applied in dispersive solid phase extraction of traces metals ions (Cd²⁺, Co²⁺, Cu²⁺, Ni²⁺, Pb²⁺, Fe²⁺, Fe³⁺, etc.). The recovery of the metal ions ranges from 59% to 98% at the static conditions. The obtained adsorbent showed high affinity for several metal ions according to sequence Fe (II, III) > Ni (II) ≈ Cu (II) > Pb (II). Thus, the developed material characterized by highest selectivity toward Fe (II, III) ions. High affinity of the SiO₂-Phen to iron ions and bright color of the reaction products make this adsorbent prospective to develop solid-phase analytical indicator system for Diffuse reflectance spectroscopy determination of these analytes. Thus, the proposed SiO₂-Phen sample can be effectively applied to the visual test detection of traces and ultratrace Fe(II, III) ions as 1,10-phenanthroline chelates and to application of the presented preconcentration procedure prior to their FAAS determination in the aqueous solution.

The proposed silica-based adsorbent has great application prospects in on site detection of Fe²⁺/Fe³⁺ ions in other types of real samples.

ВИЗНАЧЕННЯ ВМІСТУ ІОНІВ ВАЖКИХ МЕТАЛІВ (Cu, Pb, Cd, Zn) і КИСНЮ В РІДИНАХ ІНВЕРСІЙНИМИ ФОТО- ТА ЕЛЕКТРОХІМІЧНИМ МЕТОДАМИ

Геннадій Колбасов, Віра Воробець, Ірина Медик, Сергій Фоманюк

Інститут загальної та неорганічної хімії імені В. І. Вернадського НАН України,
Київ, Україна

e-mail: gennadii.kolbasov@gmail.com

Іони важких металів (НМІ) є найбільш складними забруднювачами, що потрапляють в природне та антропогенне середовище. Вони становлять серйозну небезпеку для здоров'я людини через свою токсичність, стійкість до біологічного розкладання та здатність накопичуватися в тканинах, викликаючи низку захворювань. Тому екологічний моніторинг важких металів має вирішальне значення для екологічних оцінок і збереження здоров'я населення. Крім визначення вмісту токсичних елементів, у багатьох випадках необхідно також визначати концентрацію кисню, який відіграє важливу роль в окислювально-відновних процесах і може служити індикатором стану біологічних об'єктів та живих організмів. Тому розробка чутливих методів визначення залишкової кількості важких металів у водах є актуальним завданням. В даній роботі представлено результати застосування електрохімічних методів (інверсійної вольтамперометрії (ІВАМ) та інверсійного фотоелектрохімічного методу (ІФЕМ)) для визначення концентрацій іонів Pb(II), Cd(II), Cu(II), Zn(II) та кисню у водному середовищі. В якості сенсорних електродів були використані тонкі плівки нанокристалічного діоксиду титану, модифікованого Y, Se, La, які отримували на Ti-підкладці золь-гель методом із тетраізопропоксиду титану з подальшим відпалом при 500°C [1]. Метод ІВАМ полягав в попередньому електроконцентруванні іонів металів в катодному діапазоні потенціалів та подальшому електророзчиненні продуктів електроосадження при скануванні анодного потенціалу. При цьому концентрація кисню визначалась при катодному скануванні потенціалу.

Використання модифікованих рідкоземельними елементами (РЗЕ) TiO₂ електродів в якості сенсорних електродів із застосуванням методу ІВАМ дозволяє селективно визначати концентрацію окремих важких металів у їх суміші в рідинах без видалення кисню (на відміну від ртутних, амальгамних, вуглецевих та інших електродів, які зазвичай використовуються для аналізу цим методом). Показано, що на поляризаційних кривих модифікованих TiO₂ електродів у розчині ацетатного буферу з вмістом іонів Pb(II), Cd(II), Cu(II), Zn(II) після попереднього електроконцентрування спостерігались хвилі струму, висота яких була пропорційна концентрації іонів цих металів та O₂. Піки струму розділені за потенціалом, що надає можливість визначати концентрації досліджених металів і кисню при їх спільній присутності у рідинах. Визначено оптимальні умови для аналізу Pb(II), Cd(II), Cu(II), Zn(II) та O₂ у рідинах методом ІВАМ. Встановлено, що чутливість методу ІВАМ до Pb(II) становила 0,05 мг·л⁻¹, до Cu(II), Zn(II) та Cd(II) – 0,1 мг·л⁻¹.

Для підвищення чутливості модифікованих TiO₂ електродів нами було використано новий перспективний інверсійний фотоелектрохімічний метод (ІФЕМ), суть якого полягала в електроконцентруванні іонів металів на електродах у вигляді металів, оксидів або нерозчинних солей металів з наступним вимірюванням їх фотоелектрохімічних або оптичних сигналів, в даній роботі – фотоелектрохімічного струму, та порівнянні його величини до і після концентрування. При визначенні іонів свинцю показано, що при потенціалі концентрування -1,4 В в ацетатному буфері (pH = 5) з вмістом іонів свинцю на Y-TiO₂ електродах відбувається осаження металевого свинцю з буферного розчину, який створює активні рекомбінаційні центри на поверхні електроду, що призводить до значного зниження значення фотоструму в спектральному діапазоні 250-350 нм навіть при низьких концентраціях свинцю. Аналогічні попередні результати отримані для іонів Cu та Cd. Встановлено, що чутливість методу ІФЕМ до Pb (II) та Cd(II) – 0,01 мг/л, до Cu(II) – 0,1 мг·л⁻¹.

[1] Vorobets V.S. G.Ya.Kolbasov, I.A.Medyk, et al. Surf. Eng. and Appl. Electrochemistry, 2021, 57(5), 535.

ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНИЙ СЕНСОР ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ НАФАЗОЛІНУ

*Жолт Кормош^{1,2}, Наталія Кормош³, Наталія Горбатюк¹,
Юлія Бохан⁴, Володимир Ткач⁵*

¹Уманський державний педагогічний університет імені Павла Тичини, Умань, Україна;

²Волинський національний університет імені Лесі Українки, Луцьк, Україна;

³Волинський базовий медичний коледж, Луцьк, Україна;

⁴Центральноукраїнський державний педагогічний університет імені Володимира Винниченка, Кропивницький, Україна;

⁵Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, Чернівці, Україна

e-mail: zholt-1971@ukr.net

Нафазолін (Наф) - це лікарський засіб, який використовується як протинабряковий засіб і судинозвужувальний засіб, що додається до очних крапель для зняття червоних очей. Він швидко знімає набряк при нанесенні на слизові оболонки. Це симпатоміметичний засіб із вираженою альфа-адренергічною активністю, який діє на альфа-рецептори в артеріолах кон'юнктиви, викликаючи звуження, що призводить до зменшення застійних явищ. Він був запатентований у 1934 році, а в медичному застосуванні увійшов у 1942 році.

Очні краплі, які звужують набряклі кровоносні судини (офтальмологічні артерії та офтальмологічні вени), щоб зменшити червоні очі. Нафазолін є змішаним агоністом α_1 - та α_2 -адренергічних рецепторів. У зв'язку з широким застосуванням Наф є необхідність його аналітичного контролю.

Метою даної роботи було вивчення можливості застосування виділеного іонного асоціату (ІА) нафазоліну з метиловим оранжевим, як електродоактивної речовини пластифікованих ІСЕ та створення на цій основі нового потенціометричного сенсора для визначення нафазоліну.

Розвиток прикладної іонометрії на даному етапі вимагає як теоретичних досліджень, вкладених у з'ясування природи селективності електродних мембран, і пошуку нових способів синтезу мембран та його модифікації з метою отримання досконаліших структурних одиниць із ширшим діапазоном функціональних властивостей цих матеріалів. Для вирішення цієї проблеми важливу роль відіграє встановлення зв'язку між структурними характеристиками мембран та їх впливом на електроаналітичні властивості. Взаємодія органічного катіону нафазоліну (НАФ^+) з етиловим оранжевим (ЕО^-) було досліджено. Методом математичного моделювання обґрунтовано енергоефективність формування ІА. Молекулярне моделювання систем $\text{ЕО}^- + \text{НАФ}^+$ та пов'язані з ним розрахунки проводили з використанням пакета «HyperChem 8.0» для різноманітних початкових варіантів розташування протіонів відносно один одного (процедура «single point»). Геометричну оптимізацію іонів проводили методом молекулярної механіки ММ+. Розроблено нафазолін-селективний сенсор із пластифікованою полівінілхлоридною мембраною. Електрод містить іонний асоціат нафазоліну з етиловим оранжевим. Для моделювання складу мембрани як матрицю використовували ПВХ; досліджено мембрани, пластифіковані дибутилфталатом (ДФФ), діетилфталатом (ДЕФ), діоктилфталатом (ДОФ), дінонілфталатом (ДНФ), дибутилсебацінатом (ДС), трикрезилфосфат (ТКФ). Встановлено, що природа пластифікатора дещо впливає на крутизну і до певної міри на межу виявлення сенсорів. Відгук лінійний у межах зміни концентрації НАФ-іонів $1 \cdot 10^{-5} - 1 \cdot 10^{-1}$ моль/л із крутизною електродної функції $53,1 \pm 1,0$ мВ/рС. Сенсор має швидкий час відгуку 10 с і може використовуватися не менше 8 тижнів без будь-яких відхилень у довгостроковій перспективі. Сенсори з більшим вмістом пластифікатора працюють довше, ніж з меншим вмістом. Електрод можна використовувати у діапазоні рН 4,0-10,0. Були досліджені коефіцієнти селективності для нафазоліну по відношенню до іонів, що потенційно можуть заважати. Для оцінки розроблених сенсорів було проведено їх апробацію щодо нафазоліну в модельних розчинах і лікарських формах. Даний сенсор використовували як індикаторний електрод при потенціометричному визначенні нафазоліну у лікарських формах.

ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНИЙ СЕНСОР ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ФЕНОПРОФЕНУ

*Жолт Кормош^{1,2}, Наталія Кормош³, Наталія Горбатюк¹,
Юлія Бохан⁴, Володимир Ткач⁵*

¹Уманський державний педагогічний університет імені Павла Тичини, Умань, Україна;

²Волинський національний університет імені Лесі Українки, Луцьк, Україна;

³Волинський базовий медичний коледж, Луцьк, Україна;

⁴Центральноукраїнський державний педагогічний університет імені Володимира Винниченка, Кропивницький, Україна;

⁵Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, Чернівці, Україна

e-mail: zholt-1971@ukr.net

Фенопрофен (Фен) сильно зв'язується з білками плазми. Фенопрофен є інгібітором циклооксигенази (ЦОГ). Протизапальний анальгетик і жарознижувальний засіб з високим зв'язуванням до білків плазми. Фармакологічно подібний до аспірину, але викликає менше шлунково-кишкових кровотеч. Фенопрофен є нестероїдним протизапальним препаратом, який використовується для лікування запалення та болю, пов'язаних з товстою кишкою. Частий прийом Фенопрофену призводить до виразки шлунка, кровотечі та інших шлункових ускладнень. Таким чином, розробка доставки фенопрофену в товсту кишку доречна для зменшення його побічних ефектів і досягнення високих локальних концентрацій препарату в товстій кишці.

У зв'язку з широким застосуванням фенопрофену є необхідність розробки надійних методів його визначення. Відомі аналітичні методи разом із можливостями їх застосування мають і ряд обмежень. Спектрофотометричне визначення основане на утворенні комплексів переносу заряду. Недоліком є необхідність проведення реакцій у присутності полярних органічних розчинників. Похідна нелінійна синхронна флуоресцентна спектрометрія зі змінним кутом сканування потребує складну апаратуру та математичну обробку аналітичного сигналу. Також запропоновані методи оберненофазової вискоефективної рідинної хроматографії і нормальнофазової вискоефективної рідинної хроматографії, які також вимагають складну апаратуру та пробопідготовку.

Розвиток прикладної потенціометрії вимагає як теоретичних досліджень, вкладених у з'ясування природи селективності електродних мембран, і пошуку нових способів синтезу мембран та його модифікації з метою отримання досконаліших структурних одиниць із ширшим діапазоном функціональні властивості цих матеріалів. Взаємодія органічного аніону фенопрофену (Фен⁻) з толуїдиновим синім (ТС⁺) було досліджено методом математичного моделювання обґрунтовано енергоефективність формування ІА. Молекулярне моделювання систем Фен⁻ + ТС⁺ та пов'язані з ним розрахунки проводили з використанням пакета «HyperChem 8.0» для різноманітних початкових варіантів розташування протионів відносно один одного (процедура «single point»). Геометричну оптимізацію іонів проводили методом молекулярної механіки ММ+.

Розроблено фенопрофен-селективний сенсор із пластифікованою полівінілхлоридною мембраною. Електрод містить іонний асоціат фенопрофену з толуїдиновим синім. Для моделювання складу мембрани як матрицю використовували ПВХ; досліджено мембрани, пластифіковані дибутілфталатом (ДФБ), діетилфталатом (ДФЕ), діоктилфталатом (ДФО), динонілфталатом (ДФН), дибутилсебацінатом (ДФС), трикрезилфосфат (ТКФ). Встановлено, що природа пластифікатора дещо впливає на крутизну і до певної міри на межу виявлення сенсорів. Відгук лінійний у межах зміни концентрації іонів фенопрофену $8 \cdot 10^{-5}$ – $1 \cdot 10^{-1}$ моль/л із крутизною електродної функції $40,0 \pm 1,0$ мВ/рС. Сенсор має короткий час відклику 5-10 с і може використовуватися не менше 10 тижнів. Сенсори з більшим вмістом пластифікатора працюють довше, ніж з меншим вмістом. Електрод можна використовувати у діапазоні рН 6,5-12,0. Були досліджені коефіцієнти селективності для фенопрофену по відношенню до іонів, що потенційно можуть заважати. Для оцінки розроблених сенсорів було проведено їх апробацію щодо визначення фенопрофену в різних об'єктах методом потенціометрії.

ВЛАСТИВОСТІ ПОПЕРЕЧНОЗШИТИХ МОДИФІКОВАНИХ КРОХМАЛІВ

Кіра Миргородська¹, Микола Ніколенко², Валентина Вечерова¹

¹ КНЗ «Хіміко-екологічний ліцей» ДМР, Дніпро, Україна

² ННІ «Український державний хіміко-технологічний університет», Дніпро, Україна

e-mail: mirgorodskaya.kiraa@gmail.com

Крохмаль – суміш полісахаридів амілози і амілопектину, мономером яких є α -глюкоза. Він буває не тільки з картоплі, але і з кукурудзи, рису, пшениці, плодів маніоки і сої. Існує нативний та модифікований крохмаль.

Мета модифікації крохмалів – запобігання ретроградації і за рахунок цього збільшення терміну придатності завдяки стійкості до змін температури: циклам заморожування – відтавання. Розрізняють біологічні, фізичні і хімічні способи обробки крохмалів, які дозволяють змінити їх будову і властивості, зокрема гідрофільність, у тому числі можливість розчинятись у холодній воді, здатність до кристалізації і гелеутворення, стійкість до нагрівання, впливу кислот. За змінами, які мають місце у природних видах крохмалю, виділяють наступні основні види модифікації: набухання, деполімеризацію, стабілізацію, утворення поперечнозшитих полімерних ланцюгів. У багатьох випадках модифіковані види крохмалю можуть бути одночасно стабілізованими і поперечнозшитими.

Гідротермічна клейстеризація крохмалю – це ендотермічний процес руйнування крохмальних гранул у водному розчині з утворенням гідрогелю внаслідок підвищення температури. Слід зазначити, що в залежності від вмісту води гідротермічну обробку крохмалю сьогодні визначають двома термінами: клейстеризація (вміст води понад 60% за масою) та плавлення (вміст води менше 60%). Відмінною ознакою для цих процесів є те, що температура клейстеризації не залежить від вмісту води, а температура плавлення, навпаки, сильно залежить від вмісту води: чим менше води, тим вище температура плавлення. Таким чином, розуміння особливостей цих процесів може суттєво вплинути на вибір крохмалю для певного застосування.

Вибір необхідного типу крохмалю може бути спрощений, якщо враховувати властивості харчового продукту, на які крохмаль може впливати, або процес виробництва, який крохмаль може регулювати. До них відносяться сенсорні властивості, спосіб виробництва, супутні інгредієнти, очікуваний термін зберігання. Наприклад, використання модифікованого крохмалю може значно поліпшити текстуру продукту, забезпечити його стабільність і продовжити термін придатності. Тому правильний вибір та застосування крохмалю є ключовим фактором для досягнення бажаних характеристик кінцевого продукту та забезпечення його високої якості. Так, для оптимізації виробничих процесів важливо враховувати не лише тип крохмалю, але й його поведінку в різних умовах. Наприклад, у виробництві кондитерських виробів або соусів, де потрібна стійкість до термічної обробки і кислот, можуть бути доречними спеціалізовані модифіковані крохмалі з покращеними властивостями. В той же час, у випадках, де необхідна легкість і швидка гелеутворювальність, може бути доцільно використовувати крохмалі з певними фізичними або хімічними модифікаціями.

Наприклад, поперечнозшиті крохмалі мають унікальні властивості завдяки створенню поперечних зв'язків між полімерними ланцюгами. Ці зв'язки роблять крохмаль менш чутливим до змін температури, кислотності та механічного стресу. Як результат, поперечнозшиті крохмалі демонструють підвищену стійкість до розщеплення та забезпечують стабільність текстури продукту навіть за «екстремальних» умов обробки та зберігання. Це робить їх ідеальними для використання в продуктах, які піддаються інтенсивній термічній обробці або потребують тривалого зберігання.

Аналіз літературних джерел показав актуальність досліджень у напрямку вивчення фізико-хімічних закономірностей для зшитих крохмалів, зокрема методом вакуумної та термічної дегідратації.

ОСОБЛИВОСТІ УТВОРЕННЯ ТА ЕКСТРАКЦІЇ Pd(II) У ФОРМІ ІОННОГО АСОЦІАТУ З КАТІОННИМ РОЖЕВИМ 2С

Вячеслав Міллер¹, Олена Гузенко¹, Денис Снігур¹

¹Одеський національний університет імені І. І. Мечникова, Одеса, Україна

e-mail: snigur@onu.edu.ua

Знаходження нових методичних рішень в екстракції шляхом механічного перебору численних органічних сполук і перебору екстрагентів давно не дає суттєвих результатів. Для спрямованого вибору екстрагента та умов екстракції необхідно розуміння загальних закономірностей та природи процесів, які лежать в основі утворення аналітичної форми та її міжфазного переходу. Для екстракційно-спектрофотометричного визначення слідових кількостей паладію(II) широко застосовуються реакції утворення іонних асоціатів його ацидокомплексів із трифенілметановими барвниками. Основними недоліками використання трифенілметанових барвників є їх здатність до протолітичних перетворень у водних розчинах, які зокрема призводять до утворення легкоокиснюваних форм.

Метою даної роботи є дослідження взаємодії бромідних комплексів паладію(II) з ціаніновим барвником Катіонним рожевим 2С, вивчення оптимальних умов його екстракційного визначення та встановлення основних аналітичних характеристик відповідного іонного асоціату.

Досліджувані хімічні системи вивчали спектрофотометричним методом. В спектрах світлопоглинання досліджуваних систем спостерігаються одна інтенсивна смуга поглинання КР2С при 550-555 нм. Відповідний іонний асоціат із бромідними комплексами паладію характеризується максимумом поглинання при 570 нм (рисунок). Подальші спектрофотометричні вимірювання проводили при 570 нм.

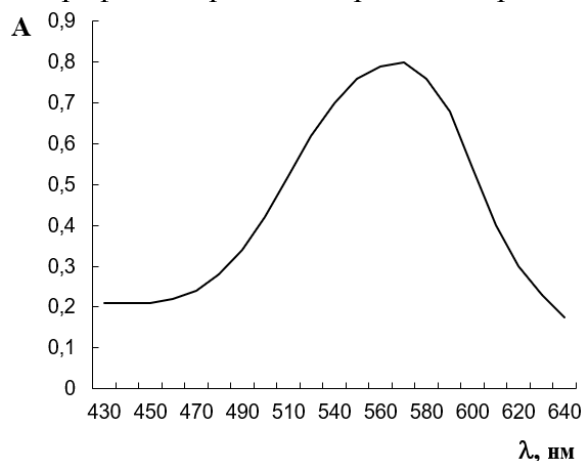


Рисунок. Спектр поглинання іонного асоціату КР2С з тетрабромопаладатом(II) у водному розчині: $C_{Pd(II)} = 4 \cdot 10^{-6}$ моль/л, $C_{КР2С} = 4 \cdot 10^{-5}$ моль/л, $C_{КВr} = 4 \cdot 10^{-3}$ моль/л, $\lambda = 570$ нм, $l = 5$ см.

У даній роботі оптимізовані умови взаємодії бромідних комплексів Pd(II) з ціаніновим барвником Катіонним рожевим 2С та показано, що максимальний вихід іонного асоціату спостерігається при рН 3. Встановлено, що найбільш ефективно іонний асоціат вилучається хлороформом.

Методами молярних відношень та зсуву рівноваги встановлено, що в досліджуваній системі утворюється іонний асоціат із стехіометричним співвідношенням Pd(II):КР2С = 1:2, що можливо у випадку коли паладій знаходиться у вигляді тетрабромопаладату(II), а формулу сполуки можна розглядати як $(КР2С)_2[PdBr_4]$.

Встановлені аналітичні характеристики іонного асоціату, який утворюється в досліджуваній системі.

Градувальний графік є лінійним в діапазоні 0,04-2,12 мг/л паладію(II). Відзначено, що межа визначення становить 0,04 мг/л Pd(II), а межа виявлення – 0,012 мг/л.

Таким чином, в даній роботі вивчено особливості взаємодії бромідних комплексів паладію(II) з ціаніновим барвником Катіонним рожевим 2С, вивченню оптимальні умови його екстракційного визначення та встановлені основні аналітичних характеристики відповідного іонного асоціату. В подальшому викладені результати будуть покладені в основу екстракційно-спектрофотометричної методики визначення паладію(II) в електротехнічному брухті та технологічних розчинах.

МІЦЕЛЯРНО-ЕКСТРАКЦІЙНЕ ВИЛУЧЕННЯ ТА СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ХАРЧОВОГО БАРВНИКА ЖОВТИЙ «ЗАХІД СОНЦЯ»

Кирило Снігур¹, Олена Гузенко¹, Денис Снігур¹, Олена Рахлицька¹

¹Одеський національний університет імені І. І. Мечникова, Одеса, Україна

e-mail: snigur@onu.edu.ua

Барвники відіграють значну роль в харчовій промисловості, оскільки привабливість харчових продуктів тісно пов'язана з органолептичними показниками. Індустріалізація продовольчих систем в харчовій промисловості збільшилася з використанням різних добавок, таких як харчові барвники, консерванти, стабілізатори та підсолоджувачі. Водорозчинні барвники використовуються в напоях, кондитерських, хлібобулочних, молочних товарах і іншій продукції. Нерозчинні у воді барвники застосовуються для фарбування харчових, фармацевтичних, косметичних продуктів, що містять жири і масла (таблетки, льодяники, помади, мила, шампуні тощо). Натуральні (природні) барвники нестійкі і легко піддаються деструкції, а синтетичні дають інтенсивний колір продуктів харчування і стійкі при зберіганні. Проте, синтетичні харчові барвники можуть викликати серйозні порушення і захворювання: нудоту, головний біль, виразки, рак легенів, гіперактивність, анемію, а також впливають на зір, шкіру, слизові оболонки тощо.

Виходячи з вище викладеного, виникає необхідність контролювати вміст цих барвників в харчових продуктах. Для цієї мети використовують різні фізико-хімічні методи: спектрофотометрію, хроматографію, капілярний електрофорез та інші методи, зокрема електроаналітичні.

Метою даної роботи є оптимізація умов міцелярно-екстракційного вилучення у фазу неіоногенної ПАР йонних асоціатів деяких азобарвників з кПАР.

Встановлено оптимальні умови вилучення, а саме: рН 3,5-4,5; 2 об.% Тритону Х-100. Для формування електронейтральних йонних асоціатів в якості протийону доцільно використовувати хлорид цетилпіридинію з концентрацією $1 \cdot 10^{-3}$ моль/л, а для стабілізації міцелярної фази необхідно вводити $2,5 \cdot 10^{-3}$ моль/л саліцилової кислоти. Розшарування фаз відбувається при нагріванні системи до 90°C впродовж 30 хв. Обчислені основні хіміко-аналітичні характеристики йонних асоціатів жовтого «Захід Сонця» в міцелярній фазі. Довжина хвилі максимального світлопоглинання становить 482 нм, а уявний молірний коефіцієнт світлопоглинання складає 27300. Градувальний графік лінійний в інтервалі концентрацій 0,1-1,1 мкг/мл. Обчислено межі виявлення та визначення які складають 0,04 та 0,1 мкг/мл відповідно. Пропонований спосіб концентрування азобарвника для його спектрофотометричного визначення апробовано при аналізі безалкогольного напою (Таблиця).

Таблиця. Результати визначення Жовтого «Захід сонця» в безалкогольному напої (n=3, P=0,95)

Об'єкт аналізу	Жовтий «Захід сонця», мкг/мл		RSD,%
	Введено	Знайдено	
Солодкий безалкогольний напій	-	9,5±0,43	4,3
	10.0	19,8±0,94	4,5

Правильність методики було перевірено методом «введено-знайдено», а відносне стандартне відхилення визначення не перевищує 4,5 %. Пропонована методика є простою, чутливою та екологічно безпечною.

МОДИФІКАЦІЯ КРОХМАЛІВ МЕТОДОМ ЕКСТРУЗІЙНОЇ ОБРОБКИ

Вячеслав Терентьев, Микола Ніколенко, Вікторія Миргородська-Терентьева

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

e-mail: vyacheslav.terentiev@gmail.com

Нативний крохмаль являє собою полімери α -D-глюкози, які з хімічної точки зору можна розділити на два типи: амілозу (полісахарид, що складається з лінійних або малорозгалужених ланцюгів, залишків молекул глюкози, а саме α -D-глюкопіронози) і амілопектин (полісахарид, що складається з розгалужених ланцюгів, залишків молекул глюкози, а саме α -D-глюкопіранози). У зернах крохмалю молекули амілози та амілопектину утворюють прошарки із кристалічною та аморфною будовою. Крохмаль знаходить своє застосування у різних промисловостях, але властивості нативного крохмалю не завжди відповідають потребам промисловості. Тому є необхідність в проведенні модифікації крохмалів. Модифіковані крохмалі одержують із заданими властивостями: розчинність у холодній воді, в'язкість клейстеру, прозорість водного розчину, здатність до кристалізації та ін.. Модифікація крохмалів відбувається за допомогою фізичних, хімічних, фізико-хімічних, біологічних факторів. Оскільки, для промисловостей є потреба в зміні одразу декількох властивостей крохмалів, в більшості випадків поєднуються вплив декількох факторів (хімічного реагенту, температури, тиску, тощо).

Одним із можливих методів модифікації крохмалів є екструзійна обробка, яка поєднує комплексну дію вологи, тепла і механічних зусиль. Цей вид модифікації надає крохмалю підвищеної здатності до гідратації та набухання у холодній воді.

В контексті екструзії важливо розглянути етап перетворення крохмальних зерен, який відбувається під час нагрівання в присутності вологи. Цей процес включає перетворення крохмальних зерен на крохмальний клейстер і має дві ключові стадії: набухання та клейстеризацію. На першій стадії крохмальні зерна збільшують свій об'єм; на другій — руйнуються (шарова будова зникає і порушується просторова орієнтація) та перетворюються в однорідну рідину гелеподібної консистенції. За термічної й механічної обробки крохмалю в екструдері не тільки руйнується структура його зерен, а й відбувається деструкція великих молекул полісахаридів.

З літературних джерел відомо, що при екструзійній обробці крохмалевмісної сировини загальний вміст крохмалю зменшується через розщеплення молекул амілози і амілопектину, поряд з тим збільшується кількість олігосахаридів і декстринів. Це обумовлює підвищення вмісту водорозчинних речовин тим самим підвищуючи його харчову цінність.

Модифікація крохмалів шляхом екструзійної обробки дозволяє одержати крохмалі, які за своїми властивостями, а саме за високою водопоглинальною здатністю і розчинністю у холодній та теплій воді, можна віднести до крохмалів, що набухають і використовуються як загущувачі, стабілізатори тощо. Крім того, екструзійна обробка дає можливість виробляти набухаючі крохмалепродукти без відходів, що забруднюють навколишнє середовище, з більш низькими теплоенергетичними витратами у порівнянні зі способом виробництва модифікованих крохмалів на валкових сушарках. Слід зазначити, що екструдовані продукти практично не містять мікрофлори, тому екструдовані крохмалі можна використовувати як сировину для продуктів дитячого харчування, для фармацевтичної промисловості, яка має бути підвищеної чистоти.

Отже, екструзійна модифікація крохмалів кількісно і якісно змінює структуру, склад і харчову цінність використаної сировини, а тому продукція, отримана за допомогою екструзійної обробки сировини, займає все важливіше місце в асортименті харчових продуктів завдяки своїй універсальності та різноманітності готових виробів. Це робить необхідним дослідження параметрів (температури, тиску, напруги зсуву), які впливають на властивості одержаних крохмалів.

ТЕОРЕТИЧНИЙ ОПИС ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ АНТИГЕЛЬМІНТНОГО ПРЕПАРАТУ АЛЬБЕНДАЗОЛ НА ЕЛЕКТРОДІ, МОДИФІКОВАНОМУ ПОЛІ(АКРИДИНОВИМ ПОМАРАНЧЕВИМ)

Володимир Ткач^{1,2}, Жозе Інасіу Ф. Мартіні², Тетяна Морозова³,

Мехмет Тюркменоглу⁴, Яна Іванушко⁵

¹Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, Україна

²Факультет інженерії університету Порту, Португалія

³Національний Транспортний Університет, Київ, Україна

⁴Університет м. Ван, Туреччина

⁵Буковинський державний медичний університет, Україна

e-mail: nightwatcher2401@gmail.com

Альбендазол (Рис. 1) – широко застосовуваний антигельмінтний препарат. Він є основоположником родини бензімідазолів, до якої також входять його похідні – серед них мебендазол, тіабендазол. Він був вперше запатентований у 1975 році британським фармацевтом грецького походження Васілісом Теодорідісом. З огляду на токсичність його надлишкових концентрацій, а також на схожість його хімічної структури зі структурою пестицидів – таких, як карбендазим, розробка методів електрохімічного визначення альбендазолу – дійсно актуальна задача і електрохімічні методи є ефективним методом її вирішення.

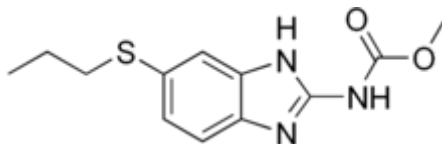


Рис. 1. Альбендазол

У даній роботі розглядається теоретично процес, у якому електрод із карбонового матеріалу модифікується полімером барвника акридинової помаранчевої і, надалі, використовується як катод для визначення альбендазолу у кислому середовищі. Полімерне покриття в такому випадку діє не тільки як активна речовина, що взаємодіє з аналітом, а й як медіатор передачі електронів та протонів від катоду до аналіту.

Електрохімічне відновлення відбудеться за ацетамідною групою. За нижчих значень рН – також і за піридиновим атомом Нітрогену.

Аналіз механізму реакції, а також математичної моделі, що йому відповідає, і що описується системою трьох диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{da}{dt} = \frac{2}{\delta} \left(\frac{A}{\delta} (a_0 - a) - r_{11} - r_{12} \right) \\ \frac{dh}{dt} = \frac{2}{\delta} \left(\frac{H}{\delta} (h_0 - h) - r_r \right) \\ \frac{dp}{dt} = \frac{1}{P} (r_{11} + r_{12} - r_r) \end{cases} \quad (1)$$

підтверджує ефективність полі(акридинового помаранчевого) для електрохімічного визначення альбендазолу на катоді. Анодний процес також можливий, однак вимагає специфічних модифікаторів електроду та високих потенціалів.

ТЕОРЕТИЧНИЙ ОПИС КАТОДНОГО ВІДНОВЛЕННЯ БУНОДОЗИНУ-391 – ТОКСИНУ ГІДРИ

*Володимир Ткач^{1,8}, Марта Кушнір¹, Сілвіо С. де Олівейра², Марія Жуау Монтейру³,
Яна Іванушко⁴, Адріано О. да Сілва⁵, Петро Ягодинець¹, Жолт Кормош⁶,
Ольга Луганська⁷, Жозе Інасіу Феррау да Пайва Мартініш⁸*

¹Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, Україна

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

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

⁴Буковинський державний медичний університет, Україна

⁵Федеральний університет Заходу штату Пара, Бразилія

⁶Волинський національний університет ім. Лесі Українки, Україна

⁷Запорізький національний університет, Україна

⁸Факультет Інженерії Університету Порту, Португалія

Другим подвигом Геракла є приборкання та вбивство Лернейської Гідри, на честь якої стали називати вид кишковопорожнинних, здатних до регенерації і до отруйних укусів. Токсин гідр складається як із отруйних білків з різною дією, так і із небілкових речовин і з похідних окремих амінокислот. Однією із таких є бунодозин-391 (Рис. 1), розробка експрес-методів електрохімічного визначення якого – актуальне завдання для токсикологічних досліджень:

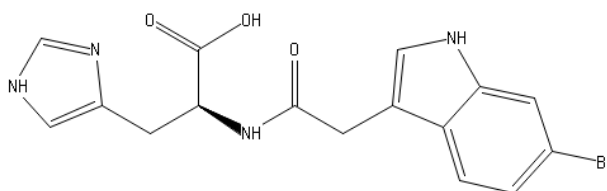


Рис. 1. Бунодозин-391

З огляду на хімічний склад бунодозину-391, як катодний, так і анодний спосіб визначення можуть бути прийнятними, оскільки він містить як донорні, так і акцепторні групи. Анодний процес є цікавішим, з огляду на можливість використання бунодозину-391 як мономеру для провідного полімеру.

У даній роботі розглядається теоретично електрохімічна поведінка бунодозину-391 на карбоновому немодифікованому. З огляду на наявність адсорбційної стадії, а також на те, що відновлення відбувається за декількома паралельними сценаріями, поведінка системи буде набагато більш динамічно, ніж у звичайному електроаналітичному чи електрополімеризаційному процесі, а сам синтез та аналіз описується математично системою із трьох балансових диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{dh}{dt} = \frac{2}{\delta} \left(\frac{D}{\delta} (h_0 - h) + r_d - r_a \right) \\ \frac{dm}{dt} = \frac{1}{M} (r_a - r_d - r_N - r_p) \\ \frac{dp}{dt} = \frac{1}{P} (r_p - r_{N2} - r_o) \end{cases} \quad (1)$$

Модель включає відновну полімеризацію та пряме відновлення полімеру, і її аналіз показує збільшену імовірність осциляторної та монотонної нестійкості. Однак, утворений полімерний матеріал може мати широкий спектр застосування для суперконденсаторів, електроаналітики та перетворення енергії. З аналітичної точки зору цей процес може бути легко використаним для визначення концентрації бунодозину-391 у біологічних рідинах.

ЕКСТРАКЦІЙНІ ВЛАСТИВОСТІ (ГЛИБОКО)ЕВТЕКТИЧНИХ РОЗЧИННИКІВ НА ОСНОВІ МЕНТОЛУ ВІДНОСНО КАТІОНІВ МЕТАЛІВ

Маргарита Чернякова¹, Костянтин Беліков¹

¹Інститут хімії функціональних матеріалів, Науково-технологічний комплекс «Інститут монокристалів» НАН України, Харків, Україна
e-mail: chernyakova@isc.kh.ua

Аналіз елементних домішок є критично важливим для контролю якості фармацевтичних об'єктів (лікарські препарати та сировина для їх виробництва), де їх вміст регламентується настановою ІСН Q3D. Дуже малий допустимий вміст елементних домішок та вплив матриці зразка становлять перешкоди для їх прямого визначення інструментальними методами. Однак, такі аналіти можна виділити та концентрувати за допомогою методу екстракції. Глибокоевтектичні розчинники (deep eutectic solvents, DESs) набрали популярність в аналітичній практиці, оскільки вважаються «зеленими» екстракційними системами. Вони представляють собою суміші речовин, які самоасоційовані через водневі зв'язки та мають понижену точку евтектики, що вказує на негативні відхилення від ідеальності рідкої фази для компонентів. Оскільки не всі суміші можуть демонструвати такі відхилення, DESs є підкласом евтектичних розчинників (ESs). Для екстракції іонів металів з водних розчинів перспективними є гідрофобні ESs, в які часто включають ментол, завдяки його природному походженню та властивостям.

Було отримано бінарні суміші ментолу з саліцилальдоксимом (M : S), 8-гідроксихіноліном (M : Ox), ібупрофеном (M : I), олеїною кислотою (M : OA), ваніліном (M : V), *n*-диметиламінобензальдегідом (M : DMAB) та антипірином (M : A). Їх екстракційні властивості були протестовані щодо ряду металів (Cd, Co, Cu, Hg, Mn, Ni, Pb, Zn) та отримані коефіцієнти розподілу (K_p) (рис. 1). Для цього екстракцію проводили з 10 мл розчину, який містив ~1 мг/л кожного досліджуваного металу, при pH~3 та використовуючи 500 мкл ES. Високі K_p для всіх металів спостерігались для системи M : Ox з мольним співвідношенням компонентів 6:1, а система M : S з мольним співвідношенням компонентів 1:1 виявилась селективною до Cu(II).

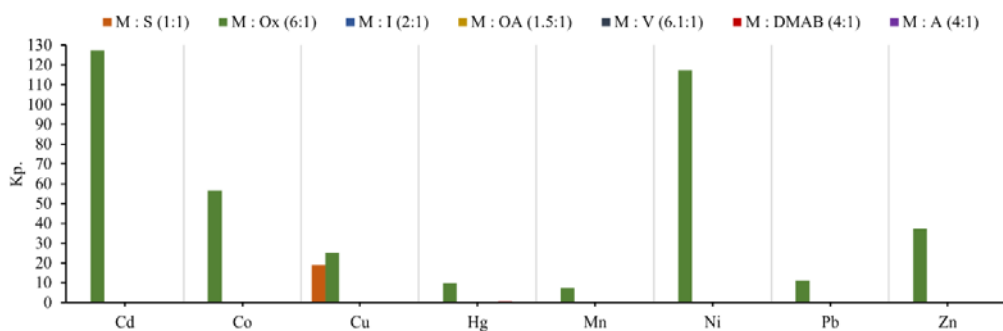


Рис. 1. Коефіцієнти розподілу металів.

Досліджено вплив pH середовища на ступінь вилучення (R) металів. ES M : Ox (6:1) здатний кількісно вилучати ($R > 95\%$) всі метали в широкому діапазоні pH (від 4 до 9), а M : S (1:1) – Cu (при pH 2-3) та Pb, Co, Ni (при pH < 5.5). Встановлено, що екстракція Cu(II) в систему M : S відбувається за двома механізмами залежно від кислотності середовища. Досліджено залежність R від кількості екстрагенту та встановлено, що 500 мкл M : Ox (6:1) достатньо для екстракції. Можна відзначити, що здатність екстрагувати іони металів залежить від природи компонентів ES більше, ніж від наявності негативних відхилень від ідеальності. Використання хелатуючих реагентів в якості компонентів ES дозволяє створити дизайнерські розчинники.

Роботу виконано в рамках проєкту НАН України «Новітні підходи для вирішення хіміко-аналітичних задач дослідження складу функціональних матеріалів та контролю якості фармацевтичної продукції» (№ 0122U002561).

ОСОБЛИВОСТІ УТВОРЕННЯ ТА ХІМІКО-АНАЛІТИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ІОННОГО АСОЦІАТУ ТЕТРАЙОДОКАДМІАТУ(II) З ХІНАЛЬДІНОВИМ ЧЕРВОНИМ

Єлизавета Шевченко¹, Іван Кіртока¹, Денис Снігур¹

¹Одеський національний університет імені І. І. Мечникова, Одеса, Україна
e-mail: snigur@onu.edu.ua

Природне середовище великих міст та індустріальних центрів, що характеризуються високою щільністю населення та концентрацією промислових, транспортних та комунальних об'єктів, зазнає потужного техногенного впливу. Отже, важливим завданням у сфері охорони навколишнього середовища є контроль за вмістом важких металів у матрицях різного складу, які найчастіше зазнають забруднення. У зв'язку з цим розробка простих, економічно доступних та чутливих спектрофотометричних методик визначення низки р- та d-елементів з використанням органічних реагентів є актуальним та перспективним напрямком, що дозволяє збільшити ступінь вилучення, враховуючи підвищення ризику забруднення важкими металами. Серед них кадмій є одним з найбільш токсичних елементів, що потрапляють в екосистему в результаті промислової діяльності, такої як металургійне виробництво, виробництво акумуляторів, добрив та різноманітних фарб. Негативний вплив на здоров'я людини спостерігається вже при невеликому вмісті кадмію, який здатний до накопичення у печінці та нирках.

На сьогоднішній день, існує значна кількість підходів до виявлення та кількісного визначення кадмію, серед них важливе місце посідають спектрофотометричні методи у різноманітних модифікаціях, а для підвищення чутливості та селективності застосовують методами розділення та концентрування. Особливістю, яку використовують для розробки екстракційно-спектрофотометричних методик визначення кадмію є його здатність до утворення комплексних аніонів із галогенід-іонами складу $[\text{CdHal}]^{3-}$, $[\text{CdHal}_4]^{2-}$, котрі можуть утворювати іонні асоціати із катіонними барвниками.

Виходячи з вище викладеного, метою даної роботи є дослідження та оптимізація умов утворення іонного асоціату йодидного комплексу кадмію(II) з катіонним барвником хінальдіновим червоним.

Особливості взаємодії в хімічній системі «Кадмій(II) : йодид-іон : катіон хінальдінового червоного» вивчали спектрофотометричним методом. Визначені оптимальні умови утворення йонного асоціату в хімічній системі «Кадмій(II) : йодид-іон : катіон хінальдінового червоного»: рН 4,5; оптимальна концентрація йодид-іону - $1 \cdot 10^{-3}$ моль/л, а для стабілізації продукту взаємодії необхідно вводити нейногенну ПАВ, наприклад, 1 мл 10 об.% розчину Тритону Х-100. Визначено стехіометричний склад йонного асоціату методом молярних співвідношень: на 1 моль кадмію припадає 2 моль хінальдінового червоного (QR), що дає підстави записати ймовірну формулу іонного асоціату у наступному вигляді $(\text{QR})_2[\text{CdI}_4]$. Розраховані хіміко-аналітичні характеристики аналітичної форми та встановлено, що градувальний графік лінійний в інтервалі концентрацій $4 \div 20 \cdot 10^{-6}$ моль/л кадмію(II). А межі виявлення та визначення складають 44,8 мг/л та 224 мг/л відповідно.

Секція 4.
ОРГАНІЧНА ТА ФАРМАЦЕВТИЧНА ХІМІЯ

SYNTHESIS AND BIOLOGICAL ACTIVITY OF QUINOID COMPOUNDS

*Avdeenko Anatoly¹, Konovalova Svetlana¹, Komarovska-Porokhnyavets Olena²,
Baranovych Diana², Lubenets Vira²*

¹Donbass State Engineering Academy, Kramatorsk, Ukraine, chimist@dgma.donetsk.ua

²Lviv National Polytechnic University, Lviv, Ukraine

vira.i.lubenets@lpnu.ua

The development of antimicrobial drugs has been an actual task in recent years. A healthy person contains about 1000 types of bacteria. Most bacteria live in the intestines. They enhance intestinal immunity and synthesize some vitamins. But pathogenic bacteria are also present in the human body. They feed, multiply rapidly, and poison the body with their waste products.

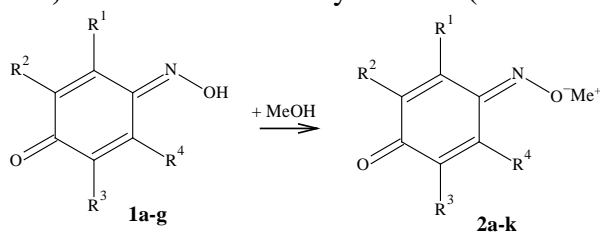
Bioactive compounds were previously synthesized to fight the bacteria and fungi. However, bacteria and fungi eventually developed resistance to these antimicrobial drugs, particularly by forming biofilm consortia providing microorganisms with additional resistance to known drugs. A prominent place among new biologically active substances is taken by quinoid compounds, which exhibit a wide spectrum of biological activity

A promising direction is the synthesis of new biologically active derivatives of quinone oximes and their salts. Various quinone mono- and dioximes salts were synthesized earlier. Some exhibit high biological, pesticide, and insecticidal activities. However, the biological activity of salts of quinone mono- and dioximes, naphthoquinone oximes were studied insufficiently.

Thus, this work aims to obtain new alkali metal salts of quinone mono- and dioximes, naphthoquinone oximes, which have biological activity and can be used in the compositions of antifungal and bactericidal preparations.

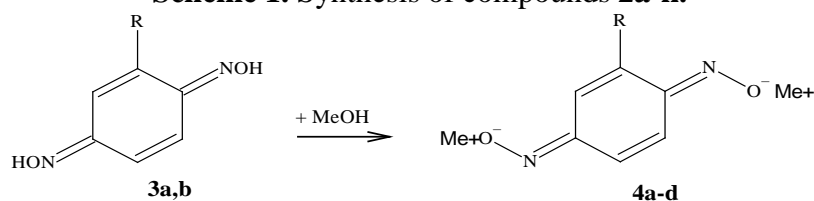
Alkali metal salts of quinone monooximes **2a-k** were obtained according to the Scheme 1. To prove the structure of compounds **2a-k**, elemental analysis was carried out, and the IR and ¹H NMR spectra were studied. In the IR spectra of compounds **2a-k**, the absorption was observed in the range of 1620–1645cm⁻¹ (C=O) and 1549–1575cm⁻¹ (C=N).

Alkali metal salts **4a-d** were obtained by the reaction of reacting N,N'-cyclohex-2,5-diene-1,4-diylidene dihydroxylamine **3a, b** with alkali metal hydroxides (Scheme 2).



1: R¹=R²=R³=R⁴=H (**a**), R¹=CH₃, R²=R³=R⁴=H (**b**), R¹=R⁴=CH₃, R²=R³=H (**c**), R¹=R²=H, R²=R³=CH₃ (**d**), R¹=CH₃, R²=R⁴=H, R³=*i*-Pr (**e**), R¹=R⁴=H, R²=R³=Br (**f**), R¹=R²=R⁴=H, R³=COOH (**g**); **2:** R¹=R²=R³=R⁴=H, Me=Li (**a**), R¹=R²=R³=R⁴=H, Me=Na (**b**), R¹=R²=R³=R⁴=H, Me=K (**c**), R¹=CH₃, R²=R³=R⁴=H, Me=Li (**d**), R¹=CH₃, R²=R³=R⁴=H, Me=Na (**e**), R¹=CH₃, R²=R³=R⁴=H, Me=K (**f**), R¹=R⁴=CH₃, R²=R³=H, Me=Na (**g**), R¹=R⁴=H, R²=R³=CH₃, Me=Na (**h**), R¹=CH₃, R²=R⁴=H, R³=*i*-Pr, Me=K (**i**), R¹=R⁴=H, R²=R³=Br, Me=K (**j**), R¹=R²=R⁴=H, R³=COONa, Me=Na (**k**).

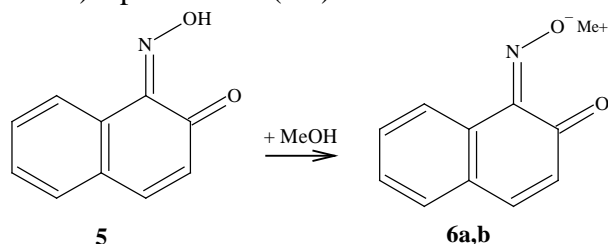
Scheme 1. Synthesis of compounds **2a-k**.



3: R=H (**a**), R=CH₃ (**b**); **4:** R=H, Me=Li (**a**), R=H, Me=Na (**b**), R=H, Me=K (**c**), R=CH₃, Me=Na (**d**).

Scheme 2. Synthesis of compounds **4a-d**.

Alkali metal salts of [(2-oxonaphthalene-1(2*H*)-ylidene)amino]oxidanides **6a, b** were obtained by the reaction of 1-(hydroxyimino)naphthalene-2(1*H*)-one **5** with alkali metal hydroxides (Scheme 3).



6: Me=Li (**a**), Me=K (**b**).

Scheme 3. Synthesis of compounds **6a, b**.

The experiment showed that salt **6b** at a concentration of 0.5% has the greatest fungi bactericidal effect on *Staphylococcus aureus*, *Mycobacterium luteum*, *Candida tenuis*, and *Aspergillus niger*. At a concentration of 0.1%, this compound is active only against *Staphylococcus aureus* and *Mycobacterium luteum*.

The salts **2i, 4a, b** at a concentration of 0.5% also showed high bactericidal activity against *Mycobacterium luteum*. At a concentration of 0.1%, only salt **4b** was active. The compound **2b** was the most active in the study of minimum inhibitory concentrations (MIC). Compounds **2b, 6a, b**, and **2j** also showed good results against *Staphylococcus aureus*.

The salts **2b, 6a, b** has shown the best minimum bactericidal concentration (MBC) 31.2 µg/ml against *Staphylococcus aureus*. The best MBC against *Mycobacterium luteum* was in the case of compounds **2a, h, 4a, 6a**, and **6b**. In the case of fungi, the good minimum inhibitory concentration (MIC) against *Candida tenuis* was for compounds **2b, e, 4b, 6b**. But the salts **6a** and **4a** showed the highest activities 3.9 µg/ml and 0.9 µg/ml, respectively. The salts **6a, b** showed good MIC against *Aspergillus niger* (7.8 µg/ml) and good minimum fungicidal concentration (MFC) against *Candida tenuis* (7.8 µg/ml and 3.9 µg/ml) and *Aspergillus niger* (15.6 µg/ml).

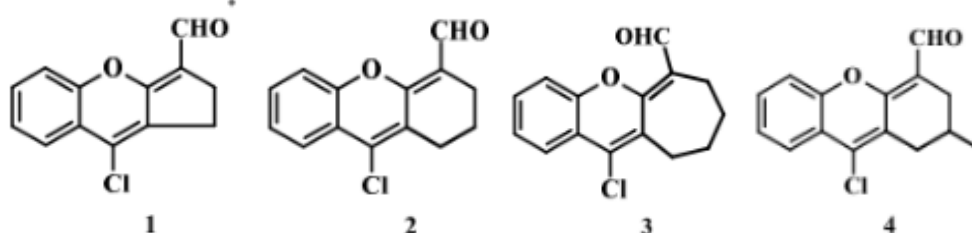
PREDICTION OF PHARMACOKINETIC PARAMETERS OF XANTHENE DERIVATIVES

Svitlana Varenychenko, Karolina Yanova, Oleg Farat

Ukrainian State University of Science and Technology, Dnipro, Ukraine

e-mail: svitlana_varenychenko@udhtu.edu.ua

Xanthenes are a special class of tricyclic compounds. Structurally related to xanthenes, the presence of various substituents at position 9 strongly affects their physical and chemical properties, as well as their biological applications. Using the web resource ADMETlab 3.0, we checked the pharmacological parameters of the studied compounds 1-4.



As a benchmark for comparing the results of the prediction of compounds 1-4, active medicinal products were chosen: 6,8-dihydroxy-9-isobutyl-2,2,4,4-tetramethyl-7-(3-phenylpropanoyl)-4,9-dihydro-1H-xanthene-1,3(2H)-dione (5) and 4-(methoxymethyl)-2,7-dimethyl-9H-xanthene (6). Compound 5 and 6 are successfully used as antimicrobial agents. The next step of the study was to determine the indicators of intestinal absorption (HIA), penetration through the blood-brain barrier (BBB), compound clearance (CL) and half-life ($T_{1/2}$). The predicted indicators of compounds 1-4 correspond to the indicators of active drugs 5 and 6. The clearance indicator is normal only for compound 4. Good indicators of intestinal absorption and penetration through the blood-brain barrier should be noted for the studied substances, which allows you to recommend them for researching drugs for the central nervous system. Cytotoxicity and safety indicators are important for any drug, so the next step was to predict three important indicators, namely liver injury (DILI), mutagenicity (AMES) and carcinogenicity (CARC).

Table. Pharmacokinetic parameters of compounds 1-6

Compound	HIA	BBB	CL	$T_{1/2}$	DILI	AMES	CARC
	0-0.3 excellent 0.3-0.7 mild 0.7-1.0 poor		>5		0-0.3 excellent 0.3-0.7 mild 0.7-1.0 poor		
1	0.003	0.05	2.646	0.281	0.165	0.777	0.627
2	0.003	0.049	2.356	0.244	0.177	0.762	0.592
3	0.003	0.041	2.421	0.207	0.223	0.733	0.514
4	0.004	0.04	5.695	0.191	0.294	0.658	0.743
5	0.023	0.056	2.793	0.07	0.966	0.105	0.177
6	0.009	0.653	9.192	0.267	0.436	0.285	0.693

It should be noted that the indicators of liver damage in compounds 1-4 are lower than active medicinal products 5 and 6. Whereas, in terms of mutagenicity indicators, compounds 1-4 are, on the contrary, inferior to active drugs 5 and 6. Among compounds 1-4, compound 4 is the most promising. According to the indicator carcinogenicity, only compound 4 shows overestimated prediction data. According to the results of a complex prediction analysis, compound 4 (9-chloro-2-methyl-2,3-dihydro-1H-xanthene-4-carbaldehyde) is the most promising.

ДОСЛІДЖЕННЯ АНТИОКСИДАНТНОЇ ТА АНТИГІПОКСИЧНОЇ АКТИВНОСТІ В РЯДУ 4-((7-ЕТИЛ-3,7-ДИГІДРО-3-МЕТИЛ-1*H*-ПУРИН-2,6-ДІОН-8-ІЛ)АМІНО)КАРБОНОВИХ КИСЛОТ

Ірина Галиця, Тетяна Дюжикова

Мелітопольський державний педагогічний університет імені Богдана Хмельницького
e-mail: halytsyairyna@gmail.com

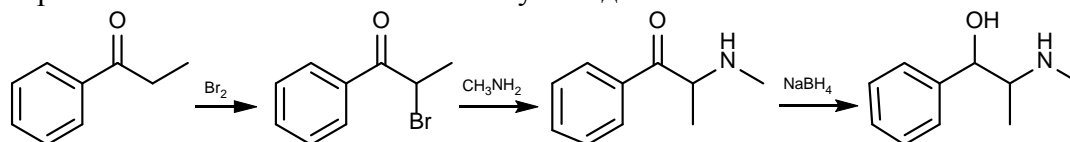
Дослідженнями останніх десятиліть встановлено, що функціональною ланкою в розвитку ряду захворювань, таких як атеросклероз, цукровий діабет, ішемічний інсульт та передчасне старіння, є гіперпродукція активних форм Оксигену, що призводить до окисної модифікації білкових молекул, необоротних змін структури нуклеїнових кислот, виникненню пошкоджень білково-ліпідних бішарів мембран клітин, дисфункції їхніх рецепторних, енергетичних та метаболічних систем. Вищенаведене є обґрунтуванням цілеспрямованого пошуку серед гетероциклічних систем природного та синтетичного походження антиоксидантів та антигіпоксиків нових поколінь. У результаті дослідження АОА при не ферментативному ініціюванні ВРО серед 4-((7-етил-3,7-дигідро-3-метил-1*H*-пури-2,6-діон-8-іл)аміно)карбоніових кислот найбільша активність за зниженням маркеру пероксидації – маліонового діальдегіду виявлена у 4-((7-етил-3,7-дигідро-3-метил-1*H*-пури-2,6-діон-8-іл)аміно)бутанові кислоти, яка складала 84,6%, збільшення вуглецевого скелету в амінокислотному фрагменті молекули викликало пригнічення здатності досліджуваних сполук виступати в ролі пасток вільних радикалів, що наочно демонструється у випадку 4-((7-етил-3,7-дигідро-3-метил-1*H*-пури-2,6-діон-8-іл)аміно)гексанові кислоти, АОА якої становила 35,8%, не перевищуючи останню в емоксипіну (56,6%). Дослідження АОА при інгібуванні супероксид-аніон-радикалу в системі аутоокиснення адреналіну в адренохром показали наявність вираженого ефекту, який за силою перевищує АОА референс-препарату. Найбільш виражений ефект проявляли 4-((7-етил-3,7-дигідро-3-метил-1*H*-пури-2,6-діон-8-іл)аміно)пропанова та бутанова кислоти, 66% й 70% відповідно. Подальше збільшення або зменшення довжини вуглецевого ланцюга в амінокислотному фрагменті молекули призводило до падіння АОА. Дослідження АОА за гальмуванням окисної модифікації білка, викликані реакгентом Фентона, показало, що 4-((7-етил-3,7-дигідро-3-метил-1*H*-пури-2,6-діон-8-іл)аміно)бутанова кислота проявляє виражену активність за зниженням такого показника, як АФГ, перевищуючи емоксипін. За ступенем зниження іншого маркеру – КФГ виражену активність мали сполуки з числом атомів Карбону в амінокислотному фрагменті молекули від 3 до 5. У результаті досліджень АОА на різних моделях виявлено, що найбільш перспективною сполукою, яка проявляє високу антиоксидантну активність, причому у деяких випадках перевищує останню у референс-препаратів, є 4-((7-етил-3,7-дигідро-3-метил-1*H*-пури-2,6-діон-8-іл)аміно)бутанова кислота. При аналізі взаємозв'язку «структура – дія» зроблено висновок, що висока біологічна активність зумовлена наявністю у фрагменті молекули залишку γ -аміномасляної кислоти. Порушення кисневого режиму, наприклад, у судинній сітці головного мозку, що виникає при гіпоксії, призводить до порушень тканинного дихання та активації процесів ВРО. Механізм антигіпоксичної дії є одним із основних компонентів прояву антиоксидантної активності багатьох потенційних лікарських засобів та ноотропів. При використанні моделі гіпоксії замкненого простору (шляхом розміщення тварин в ізольованих гермооб'ємах 10 дм³, які переверталися до верху дном та містилися в ємність з водою), визначено, що серед досліджуваних сполук 4-((7-етил-3,7-дигідро-3-метил-1*H*-пури-2,6-діон-8-іл)аміно)карбоніових кислот найбільш виражений антигіпоксичний ефект в інтервалі доз 1,00-100,00 мг/кг проявляла 4-((7-етил-3,7-дигідро-3-метил-1*H*-пури-2,6-діон-8-іл)аміно)бутанова кислота, перевищуючи референс-препарат пірацетам, збільшуючи тривалість життя тварин у 2,5 рази. Зменшення числа атомів Карбону в амінокислотному залишку до 2 викликало повну втрату антигіпоксичної активності, достовірно не перевищуючи останню у пірацетаму.

ОСОБЛИВОСТІ СИНТЕЗУ D-ІЗОМЕРУ (2-МЕТИЛАМІНО)-1-ФЕНІЛПРОПАН-1-ОЛУ ЗА ПРИНЦИПОМ «ONE-POT SYNTHESIS»

Володимир Донець, Вадим Галиця

Мелітопольський державний педагогічний університет імені Богдана Хмельницького
e-mail: halytsyavadyam@gmail.com

На сьогодні використання алкалоїдів ефедринового ряду, навіть незважаючи на їхні побічні ефекти, такі як токсичність, безсоння, підвищення артеріального тиску, не втрачає своєї актуальності й вони активно застосовуються у спортивній медицині (комбінація ЕСА), у терапевтичній практиці при лікуванні бронхіальної астми (легкої та середньої форм), у якості системних деконгестантів (наприклад, комбінація декстрометорфан, парацетамол та псевдоефедрин). Ураховуючи те, що дані про ефедрин та його похідні відомі ще з часів династії Хань, були розроблені методи виділення цих алкалоїдів як з рослинної сировини, так і синтетичні шляхи їхнього одержання (синтези Нагайосі, Шпета, Коллера). Але у більшості випадків одержання саме конкретного енантіомеру викликало певні труднощі у зв'язку з утворенням рацемічної суміші. Останню можна розділити, наприклад, обробкою щавлевою кислотою. Але виділення іншого енеантіомеру не завжди є доцільним, наприклад, L-ефедрин має двояку спрямованість – сприяє вивільненню норадреналіну та чинить більш слабку дію на адренорецептори. Тобто за основними ефектами він є подібним до адреналіну. Особливої уваги заслуговує одержання D-ізомеру (псевдоефедрину). Нами було запропоновано синтез останнього у три стадії без виділення продукту реакції (тобто за принципом «one-pot synthesis»). У якості вихідної речовини використовували пропіофенон. Усі стадії перебігали переважно за стандартної температури, але займали тривалий час. На першій стадії відбувалося бромовання 0,23 моль пропіофенону у 120 мл бензену 0,23 моль бром. Екзотермічна реакція потребувала охолодження (до 40°C), постійного перемішування та по закінченню нейтралізації 20% розчином натрій карбонату. На даному етапі вихід α -бромкетону становив близько 95%. На наступній стадії до бензенового розчину α -бромпропіофенону додавали 50 мл води та 0,4 моль 40% метиламіну (порціями протягом 24 годин при постійному перемішуванні). Витік метиламіну з реакційної системи не допускався. Через добу до реакційної суміші додавали 12 г натрій гідроксиду та одноразово нагрівали за наявності зворотного холодильника до температури 70°C (для витіснення надлишку метиламіну). Відокремлювали органічний шар та промивали 1% розчином натрій хлориду. Вихід продукту реакції на даному етапі становив 75%. На третьому етапі до бензенового розчину (2-метиламіно)-1-фенілпропан-1-ону при інтенсивному перемішуванні додавали 0,48 моль натрій борогідриду (при охолодженні) та залишали при безперервному перемішуванні протягом 36 годин. По закінченню до суміші додавали концентрований розчин лугу невеликими порціями з подальшою фільтрацією та промиванням 20 мл дистильованої води та 30-40 мл крижаної оцтової кислоти. Вихід продукту реакції на даному етапі також становив 75%. Доводили 5-8% розчином хлоридної кислоти реагуючу систему до рН 5,5 (при постійному перемішуванні), позбавлялися від бензенової фракції та одноразово промивали 25 мл бензену та 25 мл дихлорометану. Розчинники відкидали, а до водної фракції при постійному охолодженні додавали луг (до рН > 11). Екстрагування олійної фракції здійснювали дихлорометаном, а кристалізацію проводили з ізопропілового спирту, попередньо перевівши одержаний алкалоїд у сіль (додаванням 36% розчину HCl). Промивання здійснювали безводним ацетоном. Вихід D-ізомеру, індивідуальність якого була підтверджена хроматографічними методами, будова – елементним аналізом, УФ, ПМР та мас-спектрами становила 80%. Схема синтезу наведена нижче:



ПОШУК БЛОКАТОРІВ КАЛЬЦІЄВИХ КАНАЛІВ L-ТИПУ В РЯДУ НЕСИМЕТРИЧНИХ АНАЛОГІВ НІФЕДІПІНУ

Ірина Журавель¹, Анна Гелеверя², Сергій Коваленко², Ігор Білов¹, Олександр Кириченко²

¹Національний фармацевтичний університет МОЗ України, Харків, Україна

² Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, Україна

e-mail: genchem@nuph.edu.ua

Увага до блокаторів кальцієвих каналів групи 1,4-дигідропіридину (DHP) пов'язана з багаторічним ефективним досвідом їх застосування та високою селективністю до клітин судин. Попит на препарати даної групи, на жаль, не зменшується, оскільки існує стійка тенденція до поширення патологічних станів, що потребують фармакологічної корекції артеріального тиску.

Метою роботи є синтез та проведення молекулярного докінгу нових несиметричних аналогів ніфедипіну з ядром 1,2,3-триазолу в положенні 4 1,4-дигідропіридинового циклу. Модифікацію структури проведено з метою покращення афінітету кінцевих молекул.

Розробка препаративного способу одержання 1*H*-1,2,3-триазол-4-карбальдегідів (**1**) за реакцією ароматичних і аліфатичних азидів з пропаргіловим спиртом або пропаргіловим естером з виходами кінцевих продуктів понад 90% стала ресурсною базою створення цільової бібліотеки несиметричних 1,4-дигідропіридин-3,5-дикарбоксилатів з фрагментом 1,2,3-триазолу в положенні 4. Методику проведення реакції Ганча також було вдосконалено, що дозволило отримати кінцеві продукти з виходами 95-99% і чистотою понад 95%. Схема синтезу полягала у взаємодії 1*H*-1,2,3-триазол-4-карбальдегідів з ацетооцтовими естерами з подальшою конденсацією продукту з 3-амінокротонатами (Рис. 1).

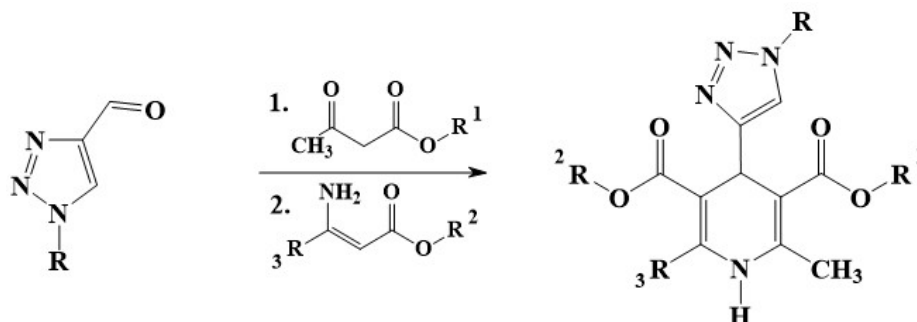


Рис. 1. Схема синтезу діалкіл 1,4-дигідропіридин- 2,6-діметил-4-(1-алкіл/арил)-1*H*-1,2,3-триазол-4-іл)-1,4-дигідропіридин-3,5-дикарбоксилатів

Будова синтезованих речовин підтверджена даними ¹H ЯМР-, ¹³C ЯМР-спектроскопії та мас-спектрометрії.

Оцінку потенційної антигіпертензивної активності проводили з використанням напівгнучкої розрахункової моделі. Як цільовий рецептор для *in silico* скринінгу синтезованих сполук та розрахунку молекулярного докінгу було використано структуру α 1-субодиниці рецептора кальцієвих каналів L-типу rCav1.1. За результатами докінгу ідентифіковано ряд сполук з близькою або вищою спорідненістю зв'язування з рецепторами rCav1.1 порівняно зі схваленими похідними ніфедипіну. Отримані результати є підґрунтям для визначення шляхів подальшої хімічної модифікації та оптимізації синтезу аналогів ніфедипіну з метою пошуку нових молекул гіпертензивної дії, привабливих для фармацевтичної розробки.

Дослідження проводяться за кошти державного бюджету МОЗ України за темою «Гібрид-фармакофорний підхід до створення інноваційних фармакологічно активних речовин гіпотензивної дії – молекулярний дизайн, синтез та скринінг гібридних молекул, що містять остови 1,4-дигідропіридину і 1,2,3-триазолу» (номер державної реєстрації: 0123U101752).

ПЛАНАРНІ ГЕТЕРОЦИКЛІЧНІ СПОЛУКИ ЯК ІНТЕРКАЛЯТОРИ ДНК ТА ПОТЕНЦІЙНІ ТЕРАПЕВТИЧНІ АГЕНТИ

Олександр Карпенко

Фізико-хімічний інститут ім. О.В. Богатського НАН України, Одеса, Україна
e-mail: alex_chem_2@ukr.net

Захворювання вірусного походження приносять велику шкоду сучасному суспільству. Сучасна протівірусна терапія частіше за все спрямована на знаходження лікарського засобу – інгібітора специфічного ферменту збудника. Перевага такого підходу – висока селективність ліків (що має одночасно означати низьку токсичність). Але висока селективність до якогось білкової мішені збудника може стати перешкодою у випадку мутації – абсолютно нормального явища для вірусів. Таким чином високоефективний препарат для одного штаму вірусу може стати неефективним – на іншому, що спричинить зріст захворюваності та чергові втрати. Ще один недолік таких препаратів – доволі довгий процес розробки, а при високопатогенних захворюваннях, в умовах пандемії – час – дуже дорогий ресурс.

Альтернативним підходом до вирішення проблеми протівірусного захисту першої ланки ми вважаємо використання неспецифічних інтеркаляторів ДНК. На відміну від вірусних ферментів – вірусний нуклеїновий матеріал (НК у тому чи іншому вигляді) є обов'язковим та більш доступним елементом вірусної інвазії.

Інтеркаляція у нуклеїнові кислоти – це процес вбудовування плоских ароматичних молекул між двома сусідніми парами основ НК (Рис 1). Її рушійною силою є електростатичні, гідрофільно-гідрофобні та стекінг взаємодії.

Серед інтеркаляторів ДНК є вже відомі протівірусні, протимікробні, протигрибкові та протипухлинні препарати. Водночас, розроблення нових – один із провідних напрямків наукової роботи Фізико-хімічного інституту ім. О.В. Богатського НАН України.

Серед сполук із доведеною нами інтеркаляційною та протівірусною дією є похідні флуорену (1), антрацену (2 X= CH, CO), акридину (2 X= N), нафталіміду (3), імідазохіназоліну (4), ізатину (5), нафтофурану (6), індолю (7) та інденохіноксаліну (8), індолюхіназоліну (9) (Рис. 2).

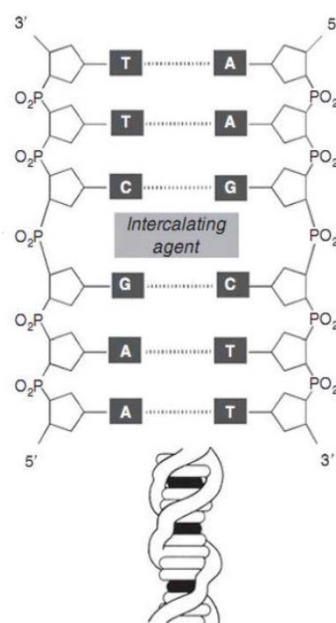


Рис. 1. Схематична ілюстрація інтеркаляційного комплексу за DOI: 10.5772/intechopen.85794

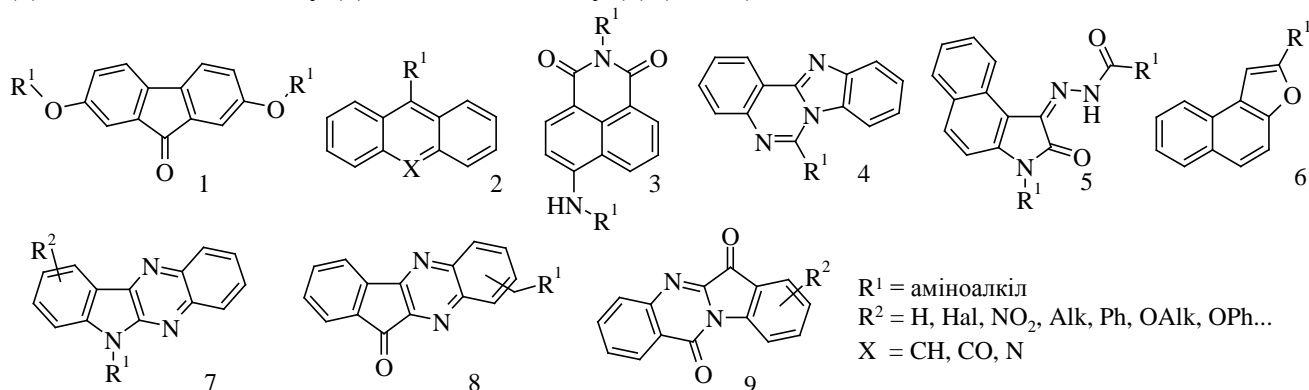


Рис. 2. Гетероциклічні сполуки із ДНК-інтеркалятивними властивостями.

Виходячи з отриманих результатів, можна зробити висновок про високий потенціал широкого спектру планарних поліциклічних сполук як інтеркаляторів ДНК та й мовірних протівірусних засобів.

STANDARDIZATION TINCTURE OF RHIZOME WITH THE ROOTS OF SANGUISORBA OFFICINALIS

Tetiana Oproshanska, Olga Khvorost, Kateryna Skrebtsova

National University of Pharmacy, Kharkiv, Ukraine

e-mail: arctium55@ukr.net

Actuality. Today dictates new approaches to providing the population of Ukraine with available and effective medicines. Considering the processes taking place in society, affordable budget drugs are now coming to the fore. These include simple and complex tinctures (Tincturae), which have a fairly high compliance compared to infusions and decoctions of medicinal plant raw materials and a budget format acceptable to the population. Generics from phytoremedies are Valerian tincture, Calendula tincture, Recutan, Rotokan etc. Therefore, the creation of new herbal remedies in the form of tinctures is an urgent problem of domestic pharmacy. One of the urgent problems of health care is the treatment of pathologies of the musculoskeletal system in particular gout, arthritis, arthrosis and osteochondrosis. We have developed a number of tinctures from available types of medicinal plant raw materials: the roots of *Rosa majalis* and *Rosa canina*, rhizome with the roots of *Sanguisorba officinalis*, the roots of the most common representatives of the *Arctium* genus, which are preventive and affect the course of a number of pathologies of the musculoskeletal system. There was a problem of standardization of the created medicinal forms. In this work we standardized the tincture of rhizome with the roots of *Sanguisorba officinalis*.

The aim of the work is to establish the parameters of standardization of tincture of rhizomes with roots of *Sanguisorba officinalis*.

Materials and methods. It was used a series of tinctures for the research which were obtained by maceration at room temperature for 48 hours, extractant 50% ethyl alcohol, ratio plant raw material-finished product 1:5. Identification of C (for the presence of gallic acid) was carried out with using thin-layer chromatography. Ethanol content and dry residue were determined by the SPhU 2.0 method. The quantitative content of the total polyphenols in terms of pyrogallol and the amount of hydroxycinnamic acids in terms of chlorogenic acid was determined by spectrophotometry on an Optizen POP spectrophotometer (Korea) according to the methods given in the monographs of SPhU 2.0 «Yarrow grass^N» and «Nettle leaves».

The results. Tincture of rhizomes with the roots of *Sanguisorba officinalis* is a dark brown liquid with a slight specific smell. A small sediment may form during storage. The marker substance gallic acid was used for identifying C because in monograph «*Sanguisorba root*» which is available in SPhU 2.0. this marker used.

Ethanol content from 45% (v/v) to 49% (v/v), dry residue - not less than 1.0 %. In the preliminary determination of the quantitative content of the main groups of biologically active substances in the tincture, the highest content was inherent in total polyphenols and amount of hydroxycinnamic acids, so the tincture was standardized according to the quantitative content of these groups of substances. Since the determination was carried out according to unified methods for new plant raw materials, according to the requirements of SPhU 2.0, these methods were validated according to such validation characteristics as precision, linearity and specificity.

In the tincture, the quantitative content of total polyphenols in terms of pyrogallol should be at least 0.09 mg/ml and the amount of hydroxycinnamic acids (in terms of chlorogenic acid) should be at least 0.005 mg/ml.

Conclusions. The tincture of rhizomes with roots of *Sanguisorba officinalis* was standardized according to the following parameters: description, identification of C (gallic acid marker substance), testing (ethanol content from 45% (v/v) to 49% (v/v), dry residue - not less 1.0 %), qualitative determination (at least 0.09 mg/ml of total polyphenols and 0.005 mg/ml of the amount of hydroxycinnamic acids).

The obtained results formed the basis of the project of quality control methods «Tincture of rhizome with roots of *Sanguisorba officinalis*».

NOVEL LIGANDS FOR OREXIN 2 RECEPTOR: A MODEL STUDY

Mykyta Prud¹, Vira Morozova¹

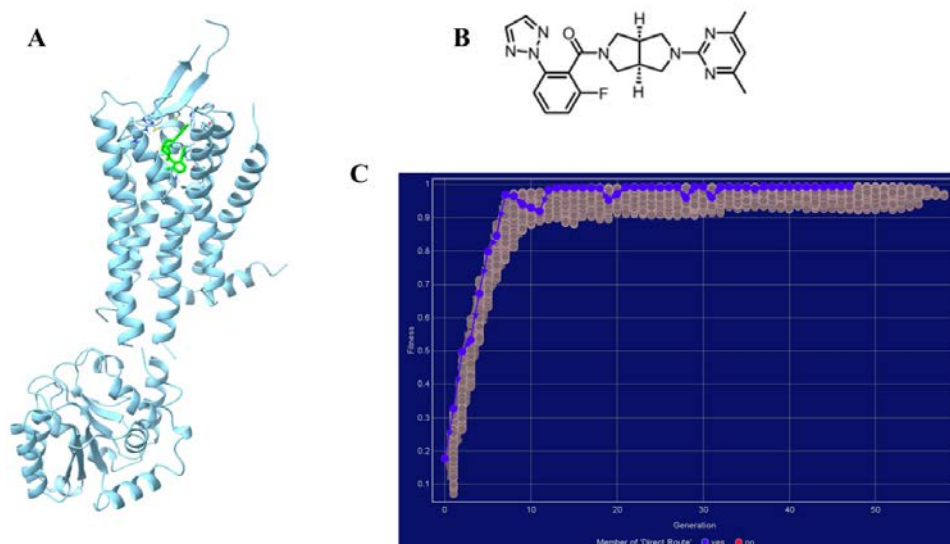
¹V.N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine

e-mail: mykyta.prud@gmail.com

From the moment a biologically active compound is discovered to its entry into the pharmaceutical market as a drug, it can take more than 10 years, as this process involves many stages. These stages include the discovery and development process, preclinical studies, clinical trials, approval, and much more. The first, and very important, stage is the identification of a compound with the required biological activity. Classical hit identification methods, such as high-throughput screening, have recently fallen by the wayside due to their cost and complexity. Computer-based methods have become an alternative, replacing (to a greater extent) the need for a 'live' experiment, thereby reducing the cost of research and speeding up the entire process. A striking example is the compound SGR-1505 from Schrödinger, a leading developer of drug discovery software, which passed the first stage in just 10 months¹. Although the implementation of computational methods in this process is becoming increasingly important, conducting a 'live' experiment is still key.

In this paper, we use the example of the Orexin 2 Receptor (OX2R) and its recently demonstrated antagonist Seltorexant to illustrate the accessibility of modern computational drug design methods to a wide range of researchers.

We have taken the crystal structure of OX2R from the publicly available PDB repository (ID: 4s0v) containing the ligand (Suvorexant) in the active site of the protein. By replacing the native ligand with Seltorexant, we docked the new structure (AutoDock Vina). By analyzing the docking results in PyMol, Chimera, and LigandScout software packages, we identified the main pharmacophore points, which were further used to construct an evolutionary library based on Seltorexant using the DataWarrior (Open Molecules) software package.



Pic. 1. (A) Structure of OX2R-Seltorexant complex (OX2R structure from PDB: 4s0v), protein is blue, the ligand is green (B) the molecular structure of Seltorexant (C) Fitness evolution of Evolutionary library

Thus, using freely available software (all of the above programs can be obtained free of charge), we obtained an evolutionary library of compounds that can serve as a starting point for further research.

1. Schrödinger SGR-1505. <https://www.schrodinger.com/pipeline/malt1/> (accessed 28.08.2024).

НОВІ БІОЛОГІЧНО АКТИВНІ АМІДИ ІНДЕНОХІНОКСАЛІН-6-КАРБОНОВОЇ КИСЛОТИ: СИНТЕЗ, ВЛАСТИВОСТІ ТА АФІНІТЕТ ДО ДНК

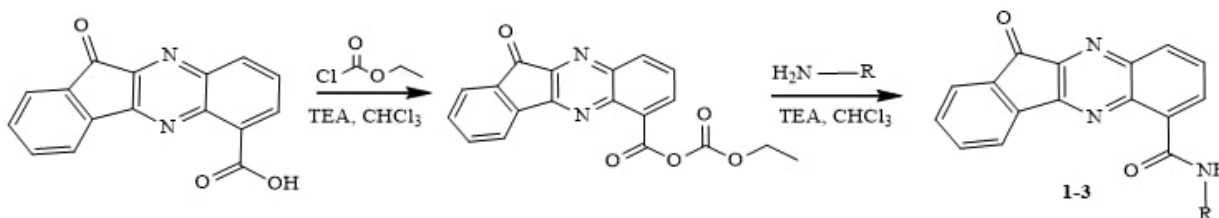
Кирило Сазонов, Юрій Ішков, Ольга Шевченко

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

e-mail: kiril5121997@gmail.com

Інденохіноксаліни є важливим класом біологічно активних гетероциклічних сполук, які добре себе зарекомендували як противірусні, протизапальні, протиракові, протитуберкульозні засоби. Вони здатні вбудовуватися між азотистими основами подвійної спіралі ДНК, що призводить до уповільнення або повного пригнічення процесів транскрипції та реплікації нуклеїнових кислот, і разом з тим уповільнення репродукції інфекційних агентів та розвитку злоякісних пухлин. Метою дослідження є синтез нових похідних інденохіноксалін-6-карбонової кислоти – потенційних інтеркаляторів ДНК, визначення їх констант іонізації та можливості афінитету до ДНК.

11-Оксоіндено[1,2-*b*]хіноксалін-6-карбонова кислота після активації етиловим естером монохлорвугільної кислоти реагує з амінами (N,N-диметилпропан-1,3-діамін, новокаїн, 2,6-диметилпіримідин-4-амін), утворюючи аміді 1-3 за схемою:



R: **1** - (CH₂)₃-N(CH₃)₂ (79%); **2** - 4-C₆H₄COO-(CH₂)₂-N(C₂H₅)₂ (75%); **3** - 4(2,6-(CH₃)₂)Pyr (70%)

Контроль за реакцією та чистоту сполук контролювали ТСХ, структуру підтверджували методами мас-спектрометрії, ПМР-спектроскопії та елементним аналізом.

Константа іонізації третинних аміногруп (сполуки 1,2) та піримідинового циклу (сполука 3) є важливим параметром, що може впливати на інтеркаляцію до ДНК. Тому на підставі електронних спектрів поглинання були розраховані значення констант іонізації (рК_a) для сполук 1-3, які становили, відповідно: 7.07 ± 0.03, 5.52 ± 0.01, 1.46 ± 0.01.

Перевірка здатності сполук до інтеркаляції у ДНК здійснювалась методами спектрофотометрії та флуориметрії. У першому методі реєстрували спектри поглинання сполук 1-3 у присутності різних концентрацій ДНК. Для сполуки 1 при збільшенні концентрації ДНК спостерігається зменшення максимуму поглинання смуги в області 230 – 270 нм водночас із його зсувом на 2-5 нм. Такі зміни в спектрах поглинання свідчать про наявність стекінг-взаємодії інтеркалятора з ДНК. Сполука 2 при додаванні до розчину ДНК з будь-якою концентрацією утворювала з нею осад, а для сполуки 3 при збільшенні концентрації ДНК спостерігався лише батахромний зсув без зменшення оптичної густини. Такі результати підтверджують взаємодію сполук 2 та 3 з ДНК, проте ця взаємодія відбувається не лише стекінг-інтеркаляцією, а й додатковим іншим способом.

Кількісне визначення афінитету проводилось методом конкуренції з етидієм бромідом (ЕБ), який утворює міцні флуоресцентні комплекси з ДНК. Досліджувані сполуки при зв'язуванні з ДНК, витискують ЕБ, тим самим пригнічують флуоресценцію. Із залежності ступеню пригнічення флуоресценції від логарифму концентрації сполук були отримані криві «Доза – ефект», із середніх значень яких були розраховані константи асоціації сполук 1-3 із ДНК, K_x · 10⁶, M⁻¹: 3,31; 3,47; 9,77. Велике значення константи асоціації із ДНК сполуки 3 та відсутність гіпохромізму в спектрі поглинання вказує на те, що сполука може зв'язуватись із ДНК декількома способами одразу. Лише вона в концентраціях, близьких до концентрації ЕБ, виявилась здатною знижувати флуоресценцію інтеркальованого ЕБ, але в удесятеро більших концентраціях всі сполуки значно зменшували інтенсивність флуоресценції.

SOIL CONDITIONERS BASED ON MIXED GELS OF CALCIUM ALGinate WITH PECTIN AND GELLAN

*Kateryna Samchenko*¹, *Olena Goncharuk*^{2,3}, *Liudmyla Kernosenko*², *Yuriy Samchenko*²

¹National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute", Kyiv, Ukraine

²F.D. Ovcharenko Institute of Biocolloidal Chemistry of NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

³Institute of Agrophysics, Polish Academy of Sciences, Lublin, Poland

e-mail: samchenko.kateryna@iil.kpi.ua

Over the past few years, the attention of researchers has been increasingly drawn to natural polymers, which compare favorably with synthetic polymers primarily due to the absence of toxic effects on humans and the environment. In particular, polysaccharides are among the most widely used natural polymers. The range of properties, especially, mechanical and diffusion, inherent to ionic crosslinked polysaccharide gels can be significantly extended by obtaining their mixed polymers. This work is devoted to the synthesis and study of mixed polymers based on alginate, pectin and gellan, which are very promising as soil conditioners with prolonged release of agrochemicals and maintenance of optimum moisture content. Methods for the synthesis of mixed gels based on alginate and pectin/gellan were developed and the influence of the ratio of components and the concentration of crosslinking agent (CaCl_2) on their physicochemical properties were analyzed. Uniform beads based on alginate-pectin and alginate-gellan mixtures (with pectin and gellan content varied from 0 to 2 %) were synthesized by the way of extruding of polymers mixture into the 0.5 % CaCl_2 solution. It was shown that the swelling degree of such mixed gels in water growth with increasing of pectin and gellan content, exceeding the swelling of alginate gel by about 48 and 3.5 times, respectively. At the same time, increasing of CaCl_2 content resulted in a predicted decrease in the swelling of all gels studied. Kinetics of swelling of mixed gels was studied and inherent to them Fick type of diffusion was determined using the Peppas-Ritter equation. It was shown that with the increase in the pectin content, the transition from anomalous non-Fickian diffusion to Super Case II transport occurs, and with an increase in the gellan concentration – from pseudo – Fickian diffusion to anomalous non-Fickian. Structure of the synthesized mixed gels were characterized using FTIR spectroscopy. The microphotographs (SEM) of mixed gel based on alginate, gellan and pectin are presented on Fig. 1.

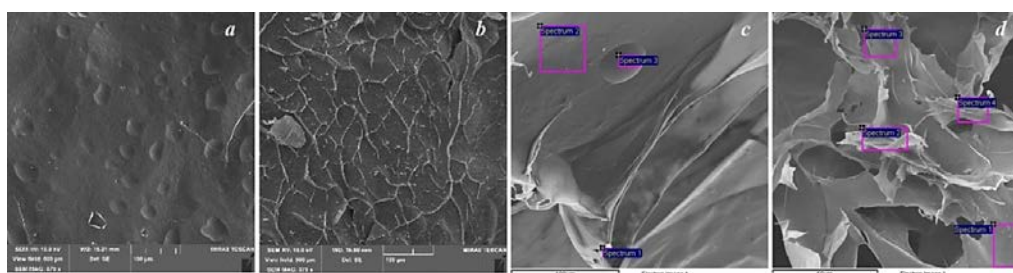


Fig. 1. Electron micrographs of mixed polysaccharides *a* – $C_{\text{gel}} = 2\%$, surface; *b* – $C_{\text{alg}} = 0,4\%$, $C_{\text{pec}} = 1,6\%$, surface; *c* – $C_{\text{gel}} = 2\%$, fracture; *d* – $C_{\text{alg}} = 0,4\%$, $C_{\text{pec}} = 1,6\%$, fracture

Gellan-based gel has a homogeneous rather smooth puffy surface (Fig. 1*a*). The pectin-based gel is characterized by a much more wrinkled surface with numerous furrows, probably formed during lyophilization (Figure 1*b*). Based on the EDX analysis (Figure 1*c,d*) it was found that, that the calcium content in pectin-based gels is 3–4 times higher than in the case of mixed gelatin-based gels, which indicates a higher efficiency of ionotropic crosslinking of pectin-alginate mixtures.

Acknowledgements. The authors O.G. and Y.S. are grateful for the financial support from Polish Academy of Sciences, and the National Academy of Sciences of the USA within a Long-term program for Ukrainian scientists (project "Biocompatible hybrid hydrogels with functional inorganic fillers for strengthening plant vegetation").

FLAVONOIDS OF *OXYTROPIS MACROCARPA*

*Sulaymonov Sheali Abdupattayevich*¹, *Abdullaev Shavkat Vaxidovich*¹

¹Namangan State University, Namangan, Uzbekistan

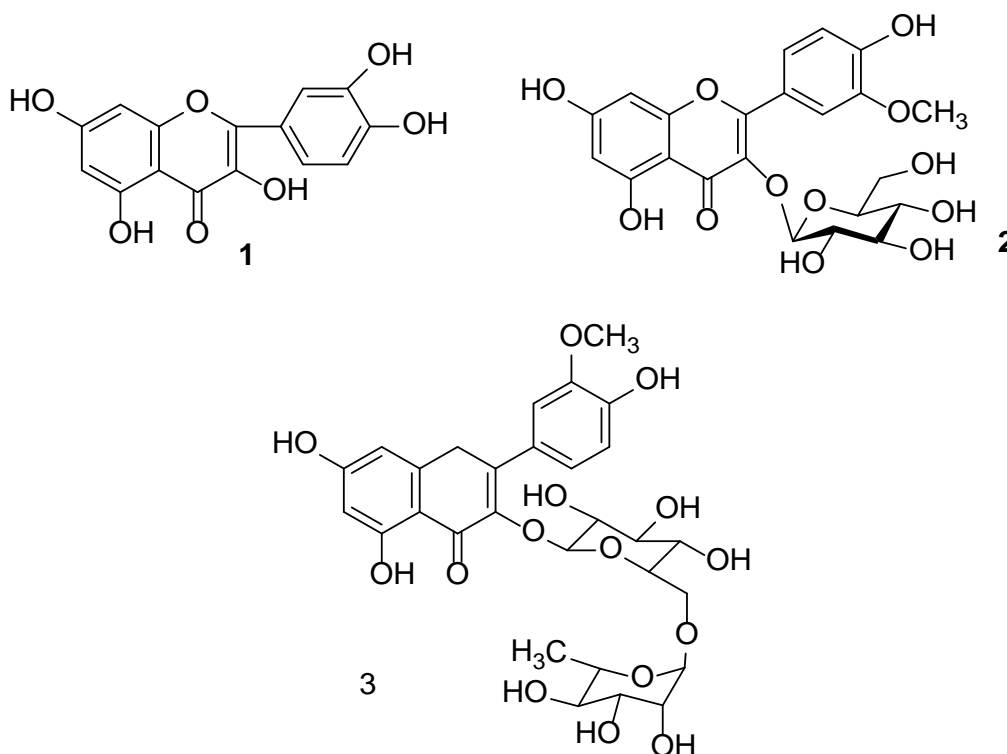
sherali.87.s@mail.ru

The genus *Oxytropis*, also known as Locoweed, belongs to the family Leguminosae and the subfamily Papilionoideae. Approximately 350 species of this genus are distributed across many regions of the world. About 150 species are found in China, with more than 80 species mainly distributed in the northwestern and northeastern parts of the country.

Oxytropis macrocarpa plants were collected from the mountain and foothill slopes of the Yangikurgan district in the Namangan region. This species was identified and named by D. Turdiyev, a researcher at the Institute of Botany of the Academy of Sciences of Uzbekistan, through comparison with herbarium samples from the institute.

Crushed and air-dried raw material (5000 g) was exhaustively extracted with 96% alcohol at room temperature. The combined extracts were distilled in vacuo, and the thickened residue was diluted with water (1:1) and successively partitioned with extraction solvents: gasoline, chloroform, ethyl acetate, and n-butanol.

The ethyl acetate extract was chromatographed on a silica gel column using a chloroform-methanol (25:1-6:1) gradient system. As a result of chromatographic separation, three compounds were isolated from the chloroform fraction: Quercetin (1), Isorhamnetin 3-O-glucoside (2), and Isorhamnetin 3-O-robinobioside (3).



Compounds 1-3 from *O. macrocarpa* were isolated for the first time. Quercetin, like most flavonoid aglycones and their glycosides, has antioxidant properties and is believed to have neuroprotective effects.

Isorhamnetin 3-O-glucoside and Isorhamnetin 3-O-robinobioside have anti-carcinogenic and anti-inflammatory properties.

ANTIMICROBIAL ACTIVITY OF THIENOPYRIMIDINE DERIVATIVES

Yulia Tkachenko, Svitlana Varenychenko, Karolina Yanova, Oleg Farat

Ukrainian State University of Science and Technology, Dnipro, Ukraine

e-mail: svitlana_varenychenko@udhtu.edu.ua

The trends of the last decades of thienopyrimidine chemistry were focused on the development and synthesis of new medicinal substances based on them. The aim of our study was the synthesis of new derivatives of thieno[2,3-d]pyrimidines and testing of their antibacterial activity. With the help of screening, 13 compounds were selected and a study of their antimicrobial activity against five bacteria and two fungi was carried out using whole cell growth inhibition assays.

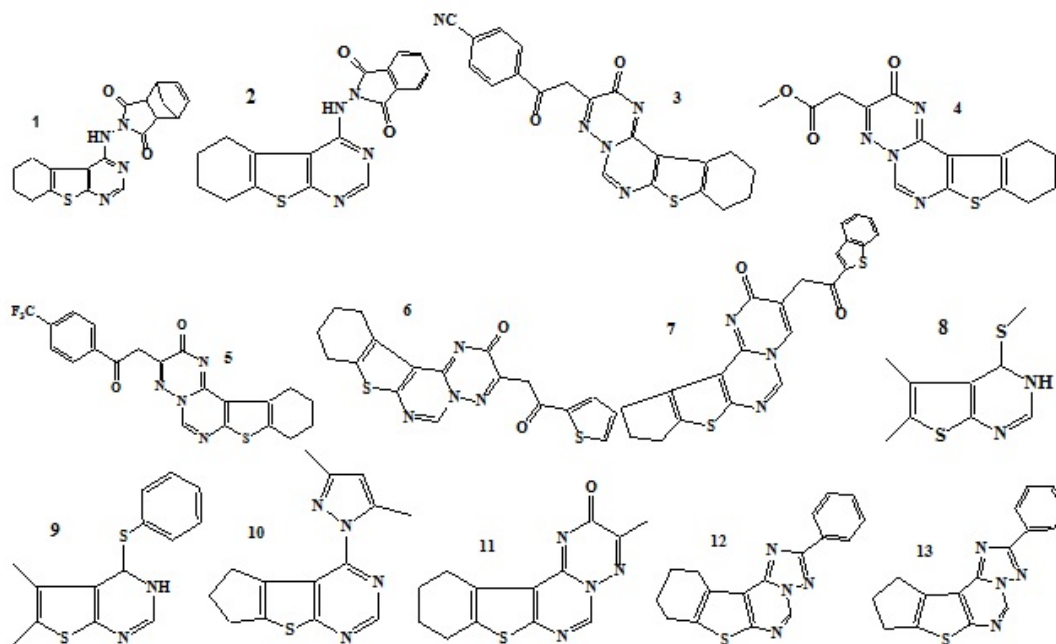


Table. The percentage growth inhibition of whole cells by synthesized compounds

	Strain						
	(Sa)	(Ec)	(Kp)	(Pa)	(Ab)	(Ca)	(Cn)
Compound 1	-16,0	6,4	13,6	16,7	8,4	13,9	32,3
Compound 2	16,8	9,1	5,0	5,3	6,2	9,1	-8,9
Compound 3	2,5	-3,6	11,3	1,0	-3,8	7,3	-3,7
Compound 4	18,7	3,2	16,3	4,5	6,9	9,4	2,5
Compound 5	22,5	4,9	20,1	6,3	12,7	7,7	-5,3
Compound 6	19,8	4,3	6,2	4,4	17,2	11,5	-14,6
Compound 7	22,3	4,4	5,6	8,2	8,5	8,3	-8,7
Compound 8	12,6	-4,5	1,4	6,9	3,1	14,1	-13,5
Compound 9	-21,9	2,6	3,4	4,0	17,9	4,7	19,9
Compound 10	-10,4	-5,6	10,1	8,1	2,4	12,6	-2,0
Compound 11	20,7	1,8	20,4	11,4	7,2	5,0	-2,7
Compound 12	9,3	2,1	22,0	5,1	6,0	9,6	-20,2
Compound 13	0,2	-4,4	14,3	-9,6	-9,1	3,5	0,1

Derivatives of thieno[2,3-d]pyrimidines showed moderate antimicrobial activity. During the analysis of the obtained results, it was established that the compound 1 showed the greatest activity among the synthesized compounds in relation to *Candida albicans* - 2-(5,6,7,8-tetrahydro[1]benzothieno[2,3-d]pyrimidin-4-ylamino)-3a,4,7,7a-tetrahydro-1H-4,7-methanoisindole-1,3-dione, 32.3% at a concentration of 32 $\mu\text{g/ml}$.

СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ ПРОДУКТІВ КОНДЕНСАЦІЇ ЗАМІЩЕНИХ НАФТАЛЕВИХ АНГІДРИДІВ З АЛІФАТИЧНИМИ ТА АРОМАТИЧНИМИ ДІАМІНАМИ

Надія Федько, Віра Ведута, Валерій Ластеженко

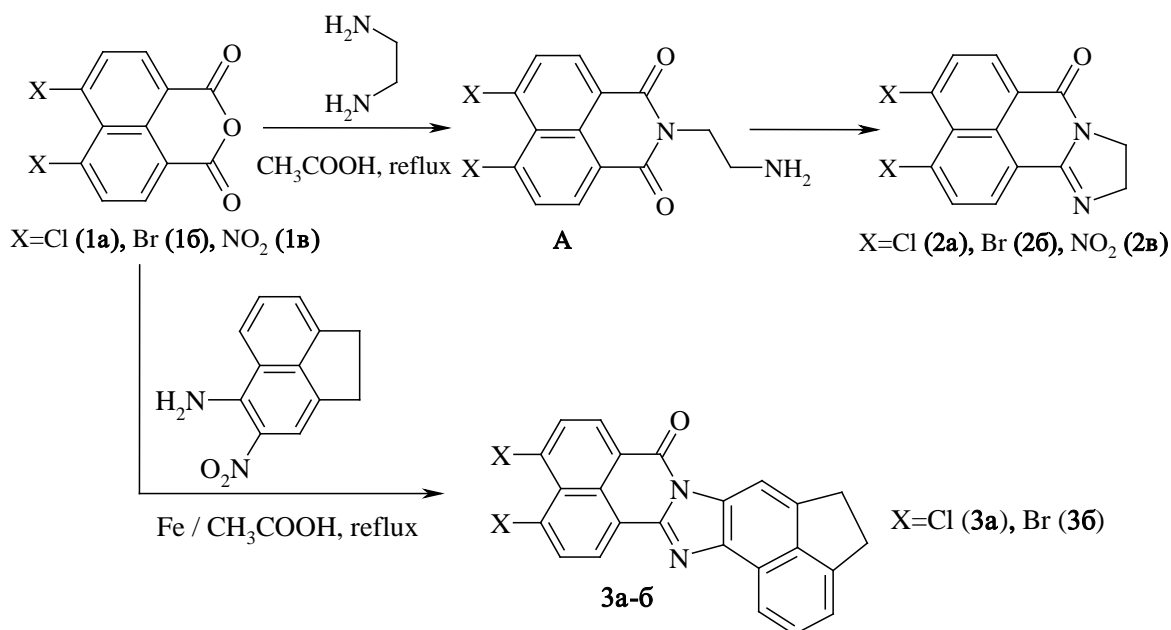
Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, Одеса, Україна
e-mail: fedko@onu.edu.ua

1,8-Нафтоїлен-1',2'-бензімідазоли – продукти конденсації нафталевих ангідридів з *орто*-фенілендіаміном, є флуорофорами, колір свічення яких залежить від природи та положення замісників в нафталеновому та бензеновому фрагментах.

Метою даного дослідження є синтез не описаних в літературі продуктів взаємодії 4,5-дизаміщених нафталевих ангідридів з етилендіаміном та аценафтен-4,5-діаміном.

Конденсацією 4,5-дигалогено- та 4,5-динітронафталевих ангідридів **1a-в** з етилендіаміном в безводній оцтовій кислоті були отримані 4,5-дигалогено- та 4,5-динітрозаміщені 1,8-нафтоїлен-1',2'-дигідроімідазоли **2a-в**. Реакція перебігає через стадію утворення проміжного 2-аміноетилнафталіміду **A**.

Дизаміщені 1,8-нафтоїлен-аценафто[4,5-d]імідазоли **3a-б** були синтезовані одночасним відновленням нітрогрупи в 4-нітроаценафтен-5-аміні та конденсацією отриманого аценафтен-4,5-діаміну з 4,5-дихлоро- та 4,5-дибромонафталевими ангідридами **1a-б**, з використанням відновлювальної системи металічного заліза в безводній оцтовій кислоті:



Отримані сполуки люмінесцюють в жовто-зеленій (**2a-б**) чи червоній (**3a-б**) області спектру, динітрозаміщена речовина **2в** не люмінесцює.

IN SILICO ACTIVITY PREDICTION OF PERSPECTIVE THIOSULFONATE COMPOUND

Liubov Fizer, Sofiya Vasylyk, Nataliya Monka, Vira Lubenets
Lviv Polytechnic National University, Lviv, Ukraine
liubov.v.fizer@lpnu.ua

Taking into account the wide range of biological activities, including antimicrobial, antioxidant, anticancer, and insecticidal effects, substances with thiosulfone fragments undoubtedly require thorough study.

In our opinion, it is advisable to carry out an in-depth analysis of S-ethyl 4-acetamidobenzenesulfonothioate (S-4AAST), which has already demonstrated *in vitro* high efficacy against *E. coli*, *S. aureus*, *M. luteum*, *C. albicans* and *A. niger*. *In silico* study will help to identify priority areas of biological action for further research.

To accomplish this task, we used *SuperPred*, a web-service that is used to predict ATCcode and targets for chemical compounds and uses machine learning-based on logistic regression and Morgan fingerprints to provide scientists with information on how these compounds can be used in medicine. It helps to save time and reduce the need for animal experimentation, which is in line with the ethical principles. Results with $\geq 85\%$ probability of activity and model accuracy were taken into account.

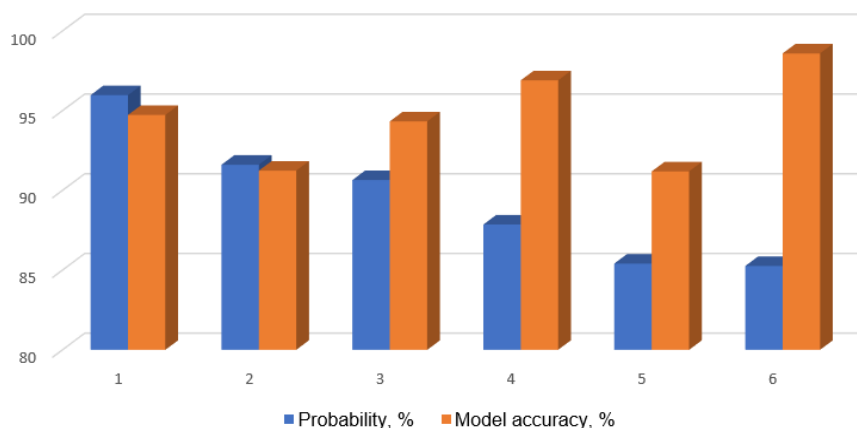


Fig. Prediction of bioactivity of 4-AAST

1 - pregnan X receptor, 2 - cyclin-dependent kinase 1/cyclin B1, 3 - PI3-kinase p110-alpha/p85-alpha, 4 - sodium channel protein type III alpha subunit, 5 - cytochrome P450 3A4, 6 - adenosine A2b receptor

The pregnan X receptor is considered to be associated with arteriosclerosis [ICD-11: BD40]. The cyclin-dependent kinase 1/cyclin B1 is associated with a wide range of oncological diseases. PI3-kinase p110-alpha/p85-alpha - with allergic inflammation [ICD-11: 4A80-4A85], graft rejection [ICD-11: NE84], pain [ICD-11: MG30-MG3Z], and various types of cancer. Sodium channel protein type III alpha subunit - with angina [ICD-11: BA40] and pain [ICD-11: MG30-MG3Z]. Cytochrome P450 3A4 - with atopic dermatitis [ICD-11: EA80] and solid tumor/cancer [ICD-11: 2A00-2F9Z]. Adenosine A2b receptor with acute and chronic heart failure [ICD-11: BD1Z], hypertension [ICD-11: BA00-BA04], paroxysmal supraventricular tachycardia [ICD-11: BC81.Z], apnea [ICD-11: MD11.0], asthma [ICD-11: CA23], infections, caused by herpes simplex virus [ICD-11: 1F00], and oncology.

According to the prognosis, the compound may have a positive effect in the treatment of cardiovascular diseases (arteriosclerosis, angina, heart failure, hypertension, tachycardia), oncology and respiratory diseases (apnea, asthma), and pain. Moreover, the analysis showed a probable effect of S-ethyl 4-AAST on the infection caused by herpes simplex virus (86.26 %), which correlates with the previously obtained data from the study of compounds with SO₂S-fragments.

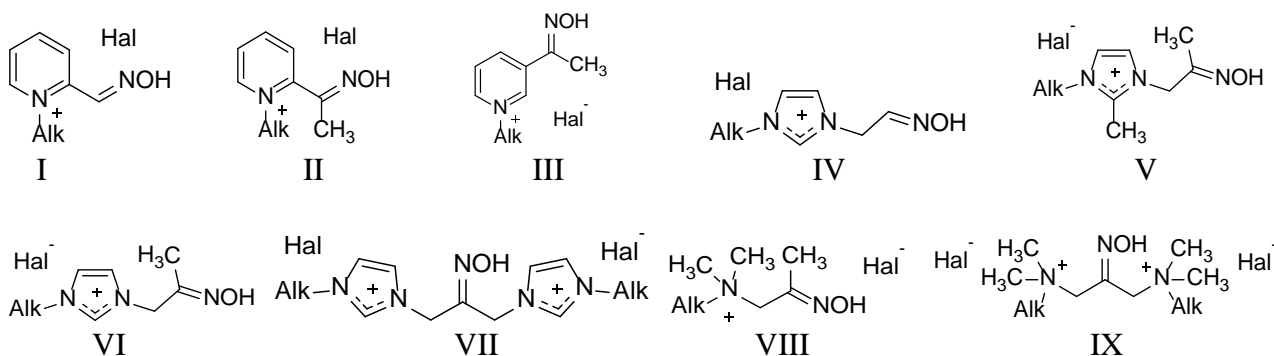
КИСЛОТНО-ОСНОВНІ ВЛАСТИВОСТІ ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНИХ ПАР У МІЦЕЛЯРНИХ СИСТЕМАХ

Олександр Шумейко^{1,2}, Микола Бураков¹

¹Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАН України, Київ, Україна

²Інститут органічної хімії НАН України, Київ, Україна
E-mail: ashumeiko@ukr.net

Основна мета представленої роботи – проаналізувати кислотно-основні властивості серії піридинієвих (I–III), імідазолієвих (IV – VII) та тетраалкіламонієвих (VIII, IX) ПАР, функціоналізованих оксимними групами, встановити закономірності їх зміни, що дозволить надалі, при створенні рН-чутливих систем, проводити спрямовану модифікацію структури та складу міцелярних розчинів.



Проаналізовано зміну кислотно-основних властивостей у серії піридинієвих, імідазолієвих та тетраалкіламонієвих функціоналізованих ПАР залежно від структури цих сполук та складу соміцелярних систем на їх основі. Встановлено закономірності, які дозволяють забезпечити спрямованість модифікації структури та складу міцелярних розчинів при створенні рН-чутливих систем на основі ПАР такого типу.

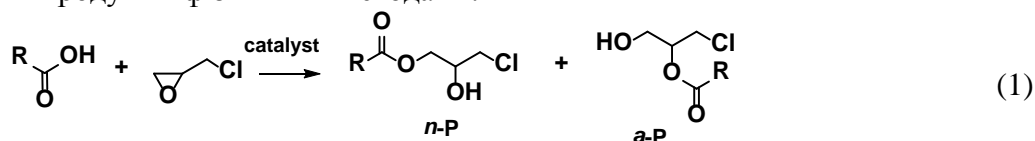
Одним із можливих областей застосування ПАР, функціоналізованих оксимними групами, є використання їх у засобах для знешкодження токсичних естерів кислот фосфору та сірки. При створенні таких систем, важливе значення мають їх кислотно-основні властивості. Визначені фізико-хімічними методами (спектрофотометрія, потенціометричне титрування) величини pK_a , у переважній більшості випадків, збігаються з величинами pK_a , отриманими з аналізу кінетичних профілів розщеплення відповідних субстратів, хоча для низки систем спостерігаються деякі невідповідності. Це вказує на те, що у разі ускладнення системи (при введенні нових компонентів, наприклад, ацилвмісних субстратів), можлива поява додаткових факторів, що впливають на положення протолітичних рівноваг.

Проведений аналіз зміни кислотно-основних властивостей функціоналізованих ПАР залежно від структури та складу соміцелярних систем на їх основі, створює базис для проведення спрямованої модифікації рН-чутливих міцелярних систем. При дизайні нових типів детергентів, які містять у молекулах оксимні групи, вибір елементів структури ПАР (алкільних замісників, катіонного центру, донорних чи акцепторних замісників та інших.) і складу соміцел, може спиратися на закономірностях, які встановлені у рамках цієї роботи. Це дозволить прогнозувати очікувану величину pK_a і, відповідно, заздалегідь визначати діапазон значень рН, при якому синтезовані ПАР депротонуються.

РЕГІОСЕЛЕКТИВНИЙ АЦЕТОЛІЗ ЕПІХЛОРИДРИНУ У ПРИСУТНОСТІ МЕТАЛОКОМПЛЕКСІВ САЛОФЕНУ

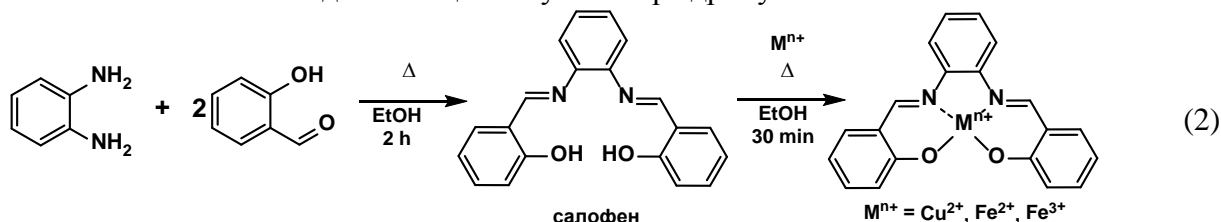
Ксенія Ютілова, Олена Швед, Денис Соколовський, Ягельський Євген
Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна
e-mail: k.iutilova@donnu.edu.ua

Продукти розкриття асиметричного оксиранового циклу є універсальними будівельними блоками та важливими поліфункціональними синтонами в синтетичній хімії завдяки їх високій реакційній здатності та керованій регіоселективності. Епіхлоргідрин (2-(хлорметил)оксиран, ЕХГ) – один з найбільш перспективних епоксидів, що широко використовується для отримання багатьох біологічно активних сполук, включаючи (S)-4-хлор-3-гідроксибутират, β -адреноблокатори, баклофен і L-карнітин. З метою отримання цільових продуктів регіоселективного розкриття епіхлоргідрину нуклеофільними протонвмісними реагентами (1) застосовують селективні реагенти або катализатори, а також розділення суміші продуктів фізичними методами.



Найбільший інтерес становить одержання естерів β -гідроксіпропанолу **n-P** – продуктів «нормального» розкриття циклу ЕХГ (1), що вступають у реакцію циклізації. Карбонові кислоти легко реагують з епіхлоргідрином з утворенням як продукту **n-P**, так і з «аномальним» розкриттям циклу **a-P**, а розділення продуктів **n-P** і **a-P** є ускладненим через близькі властивості. Водночас, використання регіоселективних катализаторів дає змогу здійснити процес (1) переважно за шляхом утворення естерів **n-P**. Перспективними є металокомплексні катализатори на основі лігандів саленового ряду, наприклад, салофену (2), що показали свою ефективність і селективність у реакціях оксиранів, таких як аміноліз і кополімеризація.

Метою даної роботи є синтез металокомплексів на основі салофену і дослідження їх каталітичної активності відносно ацетолізу епіхлоргідрину.



Салофен і металокомплекси одержували конденсацією вихідних речовин (2) у киплячому етанолі. Будова і чистота отриманих продуктів підтверджена методами ^1H ЯМР-, ІЧ- та електронної спектроскопії. Вихід салофену близький до кількісного, комплексів – не перевищує 78%. Одержані комплекси вводили у концентрації $b \cdot 10^3 = 1,25 \div 5,00$ М у реакцію ЕХГ ($s = 12,7$ М) з оцтовою кислотою ($a = 0,2$ М). Контроль за перебігом реакції здійснювали методом рН-потенціометричного кислотно-основного титрування. Продукти реакції виділяли за ступеня конверсії оцтової кислоти $>99\%$, характеризували їх будову і визначали співвідношення продуктів **n-P** і **a-P** методом ^1H ЯМР-спектроскопії.

За результатами дослідження синтезовано і охарактеризовано салофен і його комплекси з катіонами *d*-металів. Показано, що найвищу каталітичну активність проявляє комплекс салофену з Fe^{3+} . Встановлено, що порядок реакції (1) за кислотою – нульовий, за металокомплексом – перший. Константи швидкості є співставними з такими при каталізі третинними амінами і хлоридами тетраалкіламонію. Визначено, що реакція (1) в присутності металокомплексного катализатора є регіоселективною за продуктом **n-P**. Одержані дані є базовими у цілеспрямованому синтезі біологічно активних сполук та хіміко-біологічних систем доставки ліків.

Секція 5.
ФІЗИЧНА ТА КОЛОЇДНА ХІМІЯ
ХІМІЯ ВИСОКОМОЛЕКУЛЯРНИХ СПОЛУК

ДОСЛІДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОХІМІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ І СТАБІЛЬНОСТІ НОВИХ ЕЛЕКТРОДІВ НА ОСНОВІ ВУГЛЕЦЕВИХ І ПРОЗОРИХ ПРОВІДНИХ МАТЕРІАЛІВ

Бохан Ю.В.

Центральноукраїнський державний університет
імені Володимира Винниченка, м.Кропивницький, Україна,
e-mail: 1yuliya.bohan@gmail.com

Важливим аспектом, що визначає прикладний потенціал нових електродів, є вивчення їхніх електрохімічних властивостей і морфології поверхні. Від нового електродного матеріалу очікується висока електропровідність, швидкий електронний трансфер для широкого кола редокс-систем, а також структурна та електрохімічна стабільність у широкому діапазоні потенціалів. Щоб оцінити, як нові матеріали порівнюються з іншими комерційно доступними електродами, було вивчено їх характеристики. Серед дослідженої групи електродів були представлені три типи вугільних електродів (Si/CNW, Si/B-NCD, Скло/B-NCD), а також два електроди з групи прозорих провідних оксидів (FTO та ITO). Оскільки досліджувані електроди відрізнялися між собою хімічним складом і структурою поверхні, очікувалося, що їхні властивості також будуть різними.

Однією з вимірювальних технік, використаних у дослідженнях, була циклічна вольтамперометрія, яка дозволяє спостерігати взаємодію досліджуваної поверхні з електролітом і/або редокс-системою. Характеристику матеріалів для електрохімічних потреб проводять шляхом вимірювання так званого "електрохімічного вікна" та дослідження кінетики і термодинаміки електродних процесів вибраних редокс-систем. На основі вимірювань CV, зареєстрованих в основному електроліті (0,5 М Na₂SO₄), були визначені межі потенціалів, які відображають робочий діапазон кожного електрода. Різниця у положенні анодного та катодного піків, що свідчать про оборотність процесів у модельних редокс-системах, дозволяють оцінити кінетику електродних реакцій. Додатково, вимірювання кута змочування дозволило визначити гідрофільні/гідрофобні властивості досліджуваних шарів. Також аналізувався вплив типу підкладки, на яку було нанесено провідний шар, на значення електрохімічних параметрів. Вольтамперограми, зареєстровані у водному розчині 0,5 М Na₂SO₄, показали зміни в області електрохімічної стабільності електродів. Відомо, що діапазон потенціалів, у якому працюватиме електрод, залежить як від складу основного електроліту, так і від умов проведення експерименту та параметрів провідного шару. Кожен з досліджуваних електродів характеризується так званим широким «електрохімічним вікном» (Рисунок 1).

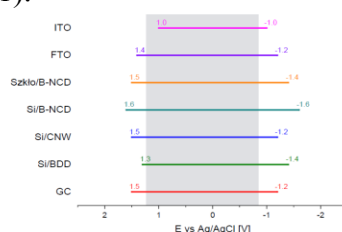


Рисунок 1. Схематичне зображення діапазону електрохімічної стабільності досліджуваної групи електродів у 0,5 М розчині Na₂SO₄ з визначеним інтервалом, в якому відбувається електроліз води (сіре поле).

Діапазон електрохімічної стабільності класичних електродів, таких як GC і Si/BDD, становить 2,7 В, що є порівняним з іншими вуглецевими матеріалами, які були предметом дослідження. Найвужчий діапазон потенціалів у 0,5 М Na₂SO₄ має електрод типу ITO. Особливу увагу заслуговує електрод Si/B-NCD, оскільки він єдиний демонструє діапазон потенціалів понад 3В. Натомість електрод FTO характеризується електрохімічною стабільністю, близькою до стабільності вуглецевих матеріалів. Широкий діапазон роботи електрода FTO разом із збереженням цінних оптоелектронних властивостей робить цей матеріал потенційно найвідповіднішим субстратом для подальших електроаналітичних досліджень.

ВПЛИВ ПРИРОДИ РОЗЧИННИКА НА МОЛЕКУЛЯРНУ МАСУ СИНТЕЗОВАНИХ ПОЛІМЕРНИХ ІОННИХ РІДИН ІОНЕНОВОГО ТИПУ

Борис Буркевич, Максим Потапчук, Ольга Сverdlikovska

Навчально-науковий інститут «Український державний хіміко-технологічний університет»
Українського державного університету науки і технологій, Дніпро, Україна
e-mail: o.sverdlikovska@gmail.com

У даній роботі досліджено вплив природи розчинника на молекулярну масу синтезованих полімерів закономірним є встановлення залежності в'язкості отриманих полімерних іонних рідин іоненового типу від складу розчинника, у якому проводили їх синтез.

Необхідно зазначити, що в суміші ацетон–органічний розчинник здійснюється синтез полііоненів з мінімальною в'язкістю та низьким виходом. Додавання води до суміші розчинників у різному співвідношенні компонентів етанол–вода приводить до отримання полімерів з високою в'язкістю та меншим виходом. Встановлено, що оптимальний склад розчинника для синтезу полімерних іонних рідин іоненового типу з більшою в'язкістю та виходом продукту поліконденсації: для полімерних іонних рідин, які містять радикали алкілароматичної будови – етанол–вода у розчиннику змінного складу при співвідношенні 60:40; для полімерних іонних рідин, які містять радикали аліфатичної будови – етанол–вода у розчиннику змінного складу при співвідношенні 50:50.

Особливість синтезу полімерних іонних рідин іоненового типу в суміші органічний розчинник–вода змінного складу: вихідні мономери розчиняють в етанолі, а під час синтезу в реакційну суміш поступово додають воду для розчинення продуктів зростання ланцюга макромолекули полімеру. Врахування даного факту відкриває можливість отримати полімер з більшою в'язкістю та виходом продукту поліконденсації.

ВІСКОЗИМЕТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ПОЛІМЕРНИХ ІОННИХ РІДИН ІОНЕНОВОГО ТИПУ

Богдан Вовчук, Максим Потапчук, Ольга Свердліковська

Навчально-науковий інститут «Український державний хіміко-технологічний університет»
Українського державного університету науки і технологій, Дніпро, Україна
e-mail: o.sverdlikovska@gmail.com

У даній роботі узагальнено результати теоретичних і практичних віскозиметричних досліджень класу полімерних іонних рідин іоненового типу, що дозволяє доповнити сучасні знання з цього напрямку новими гіпотезами і теоріями. Систематизація накопичених експериментальних результатів з вивчення віскозиметричних властивостей полімерних іонних рідин даного типу сприятиме подальшому розвитку уявлень і підходів до впровадження у виробництво.

Особливістю будови синтезованих полімерних іонних рідин іоненового типу є наявність фіксованих зарядів у полімерному ланцюзі, які визначають як конформацію макромолекули полімеру в розчині, так і характер взаємодії у макромолекулі та з протіонами. Процес розчинення досліджуваних полімерних іонних рідин іоненового типу у всьому діапазоні досліджуваних концентрацій за рахунок гідратацій відбувається зі зміною структури води. Це пояснюється гідрофобною гідратацією гідрофобних груп ланцюга макромолекули полімеру зі зміцненням структури води і гідрофільною гідратацією іоногенних груп - зі зміцненням структури води або її руйнацією (залежно від розміру замісника при четвертинному атомі Нітрогену).

Специфічною характеристикою поліелектролітів є концентраційна залежність приведеної в'язкості їх розчинів. Досліджено віскозиметричні властивості отриманих полімерних іонних рідин іоненового типу у сильно розведених водних і водно-етанольних розчинах. Проведені віскозиметричні дослідження водних розчинів полімерних іонних рідин іоненового типу показали, що синтезовані речовини є типовими представниками поліелектролітів - зі зменшенням концентрації приведена в'язкість полімеру зростає і проходить через максимум на відміну від монотонного зменшення у розчинах неіонних полімерів.

Швидке зростання приведеної в'язкості з розведенням пояснюється конформаційними змінами макромолекул полімерних іонних рідин іоненового типу, а саме: ступенем розширення полімерного клубка в розчині, який залежить від гнучкості ланцюга полімеру.

Для концентраційних залежностей приведеної в'язкості водних розчинів досліджуваних полімерних іонних рідин іоненового типу характерний максимум в області дуже малих концентрацій (менше 0,01 г/дл), тобто при переході до граничних розведень, що, порівняно з раніше відомими полімерними іонними рідинами, значно менше - менше 0,05 г/дл. Це свідчить про існування аномального явища - поліелектролітного набрякання, причиною якого, за існуючим уявленням, є зростання ефективних зарядів полімерного ланцюга при розведенні полімерів і електростатичного відштовхування одноіменно заряджених ланок ланцюга, що приводить до розгортання клубків і збільшення їх лінійних розмірів.

Встановлено ефективність прогнозування можливості застосування нових полімерних іонних рідин та іонних рідин іоненового типу залежить від їх фізико-хімічних властивостей, відмінних природою заряду їх макромолекули, типом катіону, ступенем делокалізації і розміру аніонів, рухливістю іонних центрів.

ПРОСТОРОВА БУДОВА, ТЕРМОДИНАМІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТА КОЛИВАЛЬНІ СПЕКТРИ НАНОЧАСТИНОК ГІДРОКСИДУ КАЛІЮ

Анатолій Гребенюк

Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, Київ, Україна

e-mail: grebenyuk_ag@ukr.net

Гідроксиди лужних металів утворюють шаруваті кристали, будова яких поступово ускладнюється із зростанням розмірів катіонів металів. Так, гідроксид літію утворює моношарові структури, гідроксид натрію - двошарові, гідроксиди калію, рубідію та цезію вирізняються наявністю водневих зв'язків між двошаровими пакетами. В роботі виконано систематичний квантовохімічний аналіз просторової будови та енергетичних характеристик, а також коливальних спектрів та термодинамічних параметрів молекулярних моделей гідроксиду калію, які складаються з 2 – 20 формульних одиниць.

Розглянуті нами молекулярні моделі гідроксиду калію враховують особливості будови кристалів цієї речовини. Міжшарова взаємодія розглянута у двошарових моделях. Їхня будова і властивості вивчалися методом теорії збурень Меллера-Плессета другого порядку з валентно-розщепленим базисним набором 6-31G(d,p) із використанням програмного комплексу PC GAMESS. Термодинамічні характеристики досліджуваних систем були оцінені з використанням наближень ідеального газу і жорсткого ротатора при тиску 101325 Па. Для цього були розраховані коливальні спектри моделей у гармонічному наближенні шляхом пошуку тензора других похідних повної енергії по координатах.

В молекулі гідроксиду калію міжатомні відстані становлять К-О - 2.2115 Å, О-Н - 0.9120 Å. За нашими даними, відповідні величини дорівнюють 2.2212 та 0.96263 Å. В димері відстані К-О становлять 2.538 Å, а О-Н – 0.962 Å. При утворенні тетрамера ці величини неістотно змінюються: 2.670 та 0.963 Å. Експериментальні міжатомні відстані К-О в межах одного двошарового блоку варіюють від 2.69 до 2.90 Å, а між блоками – 3.15 Å. В молекулярних моделях відповідні відстані становлять від 2.62 до 2.96 Å, а відстані О-Н в межах 0.964-0.966 Å. В кристалах гідроксиду калію двошарові блоки об'єднуються між собою зигзагоподібними водневими зв'язками завдовжки 3.35 Å, а кожен гідроксид-іон виступає одночасно і протонодонором, і протоноакцептором. Молекулярні моделі відтворюють такі зв'язки.

Молекула КОН в ІЧ-спектрі має 3 смуги, які відповідають валентним коливанням О-Н (3610 см^{-1}), К-О (408 см^{-1}) та деформаційному коливанню К-О-Н (300 см^{-1}). Розрахунок дає відповідно 3806 , 494 та 372 см^{-1} . Для димера ці смуги розщеплюються: валентні коливання О-Н - частоти 3902 і 3839 см^{-1} , деформаційні - 417 - 469 см^{-1} , а смуги 142 - 334 см^{-1} характеризують скелетні коливання. В спектрі тетрамера смуга при 693 см^{-1} відповідає колективному руху гідроксильних груп. В ІЧ-спектрах двошарових блочних моделей смуги поглинання в діапазоні 450 - 500 см^{-1} обумовлені коливаннями за участю зв'язків К-О. Розраховані ІЧ-спектри молекулярних моделей з міжблоковими водневими зв'язками свідчать про наявність смуг поглинання у різних діапазонах: близько 3800 - 3900 см^{-1} (валентні коливання ОН-груп), у діапазоні 400 - 800 см^{-1} (деформаційні коливання ОН-груп). Поглинання в діапазоні 500 - 2500 см^{-1} обумовлене деформаційними коливаннями гідроксильних груп, які утворюють міжпакетні водневі зв'язки. Коливання зв'язків К-О проявляються у діапазоні 280 - 300 см^{-1} .

Енергія когезії (різниця між величинами ентальпії утворення кристалів та молекул гідроксиду калію) становить 194.4 кДж/моль . Розрахунки цієї величини для різних за кількістю формульних одиниць та просторовою будовою кластерів дають її значення в межах 178.5 – 217.2 кДж/моль . Аналіз розрахованих геометричних та енергетичних характеристик розглянутих моделей вказує на їхню стабільність та близькість до відповідних експериментальних величин. Ці моделі можуть бути використані при вивченні різноманітних процесів, які відбуваються за участю гідроксиду калію.

СИНТЕЗ НАНОЧАСТИНОК СРІБЛА З ВИКОРИСТАННЯМ ЯК ВІДНОВНИКА СУМІШІ ОЛІГОМЕРНИХ СИЛСЕСКВІОКСАНІВ, ЩО МІСТЯТЬ В ОРГАНІЧНІЙ СКЛАДОВІЙ ТРЕТИННІ АТОМИ АЗОТУ І ГІДРОКСИЛЬНІ ГРУПИ

Мар'яна Гуменна¹, Олександр Стрюцький¹, Андрій Пулипенко^{1,2}, Едуард Лисенков³, Валерій Шевченко¹

¹Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України, м. Київ, Україна

²Донецький фізико-технічний інститут ім. О.О. Галкіна НАН України, м. Київ, Україна

³Чорноморський національний університет імені Петра Могили, м. Миколаїв, Україна
e-mail: gumenna.mariana@gmail.com

Полімерні композити, що містять наночастинки срібла (НЧС), є перспективними матеріалами для широкого спектру застосувань, зокрема для створення електронних пристроїв, каталізаторів, систем спрямованої доставки ліків, антибактеріальних покриттів. Для надання пористості та механічної міцності полімерним матрицям в таких системах останнім часом привертає увагу використання як зшиваючих агентів реакційноздатних поліедральних олігомерних силсесквіоксанів (POSS) загальної формули $(\text{RSiO}_{1.5})_n$, де $(\text{SiO}_{1.5})_n$ – нанорозмірне неорганічне силсесквіоксанове ядро переважно октаедральної ($n = 8$) будови, R – органічні замісники. Перевагами POSS є поєднання на нанорівні неорганічної та органічної складової, зіркоподібна будова, поліфункціональність та біосумісність. На даний момент відомі композити з НЧС на основі зшитих за допомогою POSS поліформальдегіду, полідопаміну та поліетиленгліколів різної молекулярної маси. НЧС до їх складу вводили відновленням іонів срібла за допомогою NaBH_4 , параформальдегіду. POSS як відновники іонів срібла у відомих на даний момент композитних системах не розглядалися. Однак функціоналізація POSS, зокрема введення до органічного обрамлення третинних аміногруп, відкриває можливість для *in-situ* формування НЧС у складі нанокompозитів без використання додаткових відновників, а також регулювання структури і властивостей отриманих сполук.

В даній роботі досліджено формування НЧС у присутності як відновника суміші олігомерних силсесквіоксанів $\text{OSS}(\text{N}+\text{OH})$, органічна складова яких містить третинні аміногрупи та гідроксильні групи, а неорганічне ядро представлене набором силсесквіоксанових структур (рис.1). Синтез здійснювали за співвідношень еквівалентів третинних аміногруп $\text{OSS}(\text{N}+\text{OH})$ до еквівалентів іонів срібла у складі AgNO_3 рівних 1:1 (1OSSN-Ag), 2:1 (2OSSN-Ag) та 3:1 (3OSSN-Ag). Отримані сполуки є смолоподібними речовинами коричневого кольору добре розчинними у воді, ДМСО і ДМФА.

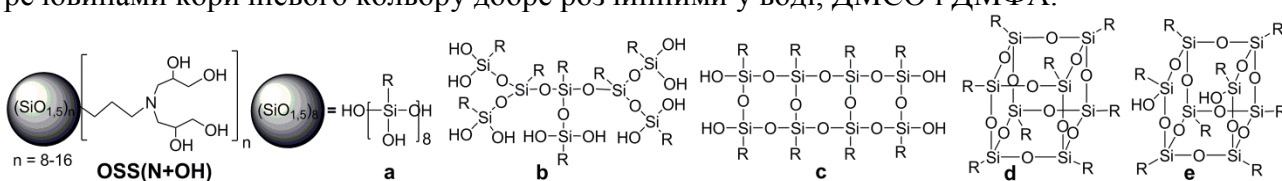


Рис. 1. Будова органічної складової та ядра (на прикладі октаедрального) $\text{OSS}(\text{N}+\text{OH})$: лінійна (а), розгалужена (б), драбинчаста (с), повністю (d) та неповністю (e) конденсована

Будову синтезованих OSSN-Ag досліджено методом ІЧ спектроскопії. Формування НЧС підтверджено даними УФ-Вид спектроскопії. Розмір НЧС на мікрофотографіях, отриманих ТЕМ, переважно становить 10-15 нм. Більш вузький розподіл частинок за розмірами характерний для 2OSSN-Ag . Згідно даних ДСК, OSSN-Ag мають аморфну структуру. Значення їх температури склування зростає при збільшенні вмісту $\text{OSS}(\text{N}+\text{OH})$ від $-30\text{ }^\circ\text{C}$ для 1OSSN-Ag до $-18\text{ }^\circ\text{C}$ для 3OSSN-Ag . Значення температури початку деструкції ($T_{d5\%}$) OSSN-Ag , встановлені методом ТГА, знаходяться в діапазоні від 150 до 170 $^\circ\text{C}$.

Таким чином, використанням $\text{OSS}(\text{N}+\text{OH})$ як відновника дозволяє отримати НЧС розміром 10-15 нм, а наявність гідроксильних груп у складі синтезованих OSSN-Ag робить їх перспективними нанопоповнювачами здатними ковалентно зв'язуватися з полімерною матрицею в процесі синтезу зшитих полімерів.

НАНОКОМПОЗИТНІ КАТАЛІЗАТОРИ НА ОСНОВІ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБОК ТА ОКСИДУ АЛЮМІНІЮ ДЛЯ БЕЗОКИСНОГО ДЕГІДРУВАННЯ МЕТАНОЛУ

Олексій Жох¹, Ігор Бичко¹, Петро Стрижак¹

¹Інститут фізичної хімії ім. Л.В. Писаржевського НАН України, Київ, Україна
e-mail: a.zhokh@gmail.com

Безокисне дегідрування метанолу є перспективним шляхом формальдегіду, котрий є цінним продуктом хімічної промисловості. У даній роботі було синтезовано ряд наноконкомпозитів на основі багатошарових вуглецевих нанотрубок (ВНТ) та оксиду алюмінію із різним масовим співвідношенням компонентів. Досліджено каталітичну активність синтезованих наноконкомпозитів у процесі перетворення метанолу.

Індивідуальні ВНТ демонструють наявність каталітичної активності у процесі перетворення метанолу до формальдегіду та молекулярного водню без участі кисню. З підвищенням температури відбувається розклад формальдегіду до монооксиду вуглецю та водню. Додавання оксиду алюмінію до ВНТ призводить до суттєвого збільшення швидкості реакції утворення формальдегіду та водню порівняно із індивідуальними ВНТ. Також швидкість розкладу формальдегіду значно зменшується у випадку використання композитів ВНТ/оксид алюмінію.

Багатошарові ВНТ характеризуються наявністю металічних властивостей. Як відомо, атомарний водень може спонтанно мігрувати з металічної поверхні на поверхню підкладки (ефект спіловеру водню). Спіловер водню характерний для металічних частинок, у тому числі нанесених на оксид алюмінію. Таким чином, дисоціативна адсорбція водню на поверхні ВНТ призводить до утворення атомарного водню, який мігрує на поверхню оксиду алюмінію через контакти між агрегатами ВНТ і масивними глобулами оксиду алюмінію. Як наслідок, каталітична активність отриманих наноконкомпозитів у реакції утворення формальдегіду значно зростає. Зниження швидкості розкладу формальдегіду може бути пояснено каталітичною реакцією зворотного гідрування монооксиду вуглецю над наноконкомпозитом ВНТ/оксид алюмінію. Реакція гідрування монооксиду вуглецю може проходити різними шляхами, наприклад, шляхом безпосереднього гідрування монооксиду вуглецю до формальдегіду в газовій фазі або шляхом реакції водяного зсуву через послідовні стадії окиснення монооксиду вуглецю до діоксиду вуглецю та гідрування діоксиду вуглецю до метанолу. Наявність води у реакційній суміші обумовлена процесом дегідратації метанолу до диметилового ефіру на оксиді алюмінію, який є складовою частиною наноконкомпозиту.

Таким чином поєднання ВНТ та оксиду алюмінію дозволяє одержати нові наноконкомпозити із покращеними каталітичними властивостями у процесі дегідрування метанолу. Такі матеріали є перспективними каталізаторами для розвитку економіки водню та метанолу.

ВНУТРІШНЬО-ДИФУЗІЙНА ДИСКРИМІНАЦІЯ КІНЕТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ДЕГІДРУВАННЯ МЕТАНОЛУ НА ЦЕОЛІТІ Н-ZSM-5

Олексій Жох¹, Андрій Трипольський¹, Петро Стрижак¹

¹Інститут фізичної хімії ім. Л.В. Писаржевського НАН України, Київ, Україна
e-mail: a.zhokh@gmail.com

Дегідратація метанолу до диметилового ефіру (ДМЕ) на твердо-кислотних каталізаторах є перспективним промисловим процесом, оскільки ДМЕ є багатотоннажним продуктом хімічної промисловості. Промислове впровадження такого процесу вимагає проведення розрахунків оптимальних параметрів каталітичного реактора, що, в свою чергу, потребує знань про кінетику відповідної гетерогенно-каталітичної реакції. Такі знання може бути встановлено на підставі кінетичного моделювання реакції. Суттєвою проблемою такого моделювання є те, що швидкість реакції може бути одночасно описана різними кінетичними схемами без можливості подальшої дискримінації певної кінетичної моделі.

Існуючі підходи до дискримінації кінетичних моделей гетерогенно-каталітичного процесу засновані на статистичному аналізі визначених кінетичних параметрів та порівнянні отриманих результатів для кожної моделі. У даній роботі запропоновано новий фізично змістовний підхід до дискримінації кінетичних моделей, заснований на порівнянні швидкостей процесу у кінетичній та внутрішньо-дифузійній областях.

Цеоліт Н-ZSM-5 є високоактивним каталізатором реакції дегідрування метанолу до ДМЕ. Для дослідження швидкості дегідратації метанолу використано промисловий зразок цеоліту Н-ZSM-5. На підставі фізико-хімічних методів аналізу встановлено такі характеристики використаного матеріалу: ступінь кристалічності – 70%, кремнієве число – 35,4, питома площа поверхні – 335 м²/г, об'єм пор – 0,17 см³/г, об'єм мікропор – 0,08 см³/г, концентрація кислотних центрів Бренстеда та Льюїса – 274 та 42 мкмоль/г.

Відомо, що застосовними до опису кінетики дегідратації метанолу є дві кінетичні схеми, засновані на формалізмі Ленгмюра-Хіншельвуда. Перша кінетична схема відповідає дисоціативному механізму перетворення метанолу, який включає дисоціацію адсорбованої молекули метанолу на інтермедіати СН₂ та воду. Друга кінетична схема відповідає асоціативному механізму, який полягає у взаємодії двох адсорбованих молекул метанолу, що призводить до утворення молекули ДМЕ. Швидкість дегідратації метанолу у кінетичній області може бути кількісно та якісно описана обома кінетичними рівняннями. Таким чином подальша дискримінація певної кінетичної схеми на підставі опису експериментальних даних швидкості процесу є неможливою.

На підставі дослідження активності цеоліту Н-ZSM-5 у процесі дегідратації метанолу у внутрішньо-дифузійній області розраховано експериментальну залежність фактора ефективності процесу від концентрації метанолу. Теоретичну концентраційну залежність фактора ефективності розраховано на підставі рішення стаціонарної форми рівняння реакції-дифузії, що враховує кінетичні рівняння для кожної схеми процесу. Шляхом порівняння теоретичних та експериментальних концентраційних залежностей фактора ефективності встановлено, що кількісна та якісна відповідність між експериментальними даними та теоретичним розрахунком спостерігається лише для кінетичної схеми, одержаної в рамках дисоціативного механізму Ленгмюра-Хіншельвуда.

Таким чином врахування транспорту реагентів у зерні каталізатора є одним з інструментів для визначення дійсних кінетичних моделей гетерогенно-каталітичних процесів. Отримані результати свідчать про те, що з використанням розробленого підходу можна виокремити конкретну кінетичну модель, яка б забезпечувала виключний опис процесу перетворення метанолу до ДМЕ у кінетичній області.

ДИЛАТАЦІЙНА В'ЯЗКОПРУЖНІСТЬ АДСОРБЦІЙНИХ ШАРІВ ПАР НА ПОВЕРХНЯХ МАСТИЛО/ВОДА

Володимир Ковальчук¹, Джузеппе Логліо², Євген Аксененко³, Франческа Равера², Ліберо Ліггієрі², Емануель Шнек⁴, Райнхард Міллер⁴

¹Інститут біологічної хімії ім. Ф.Д.Овчаренка НАН України, Київ, Україна

²CNR-Institute of Condensed Matter Chemistry and Technologies for Energy, Unit of Genoa, Genoa, Italy

³Інститут колоїдної хімії і хімії води ім. А.В.Думанського НАН України, Київ, Україна

⁴Physics Department, Technical University Darmstadt, Darmstadt, Germany

e-mail: vikovalmail@gmail.com

Поверхнево-активні речовини, що адсорбуються на межі розділу рідин, не тільки зменшують міжфазний натяг, але й роблять ці поверхні в'язкопружними. Таким чином поверхнево-активні речовини стабілізують тонкі плівки рідини, що важливо для створення стабільних пін і емульсій або для їх бажаної дестабілізації. В'язкопружна поведінка адсорбційних шарів на межі розділу мастило/вода є більш складною, ніж на межі розділу повітря/вода, перш за все тому, що в реальних системах адсорбційні шари зазвичай утворюються не однією ПАР, а сумішшю кількох сполук різного складу. Молекули ПАР в адсорбційних шарах взаємодіють не тільки між собою, але й з молекулами масляної фази. Розчинність поверхнево-активних речовин у двох рідинах відповідно до рівноваги розподілу також важлива. Крім того, кривизна поверхонь розділу крапель в емульсіях також може впливати на в'язкопружність адсорбційних шарів. Усі ці ефекти ускладнюють інтерпретацію результатів експериментальних досліджень. Ця презентація спрямована на демонстрацію останніх досягнень у моделюванні дилатаційної в'язкопружності межі розділу мастило/вода.

Автори вдячні Європейській Космічній Агенції за фінансову підтримку в рамках проектів "Soft Matter Dynamics" та "Emulsion Dynamics and Droplet Interfaces (EDDI)", а також Європейській Комісії за фінансову підтримку в рамках проекту "EAWEDRY" Рамкової Програми "Horizon 2020".

ТЕРМОДИНАМІЧНА СПОРІДНЕНІСТЬ ВИСОКО- ТА НИЗЬКОКРЕМНІЄВИХ КЛІНОПТИЛОЛІТІВ ДО КАТІОНІВ K^+

Крисенко Д. А., Демченко В. Я.

Інститут колоїдної хімії та хімії води ім. А.В. Думанського НАН У, Київ, Україна
e-mail: ditok@ukr.net

В даній роботі досліджена залежність термодинамічних параметрів реакції обміну катіонів K^+ на Na-формах кліноптилоліту від співвідношення Si/Al в кристалічному каркасі цього природного цеоліту.

Для дослідження було обрано дев'ять кліноптилолітових порід з родовищ Центральної та Південно-Східної Європи (Белі Пласт, Дзегві, Морянці, Нижній Грабовець, Сокирниця, Трас) Північної Азії (Пегаське, Хонгуруу), та Північної Америки (Гектор). Методом електронно-зондового рентгенівського мікроаналізу було встановлено хімічний склад цеолітової фази досліджуваних кліноптилолітових туфів і зразки було класифіковано за мольним співвідношенням Si/Al в кристалічному каркасі мінералів. Кліноптилоліти, що мали співвідношення Si/Al в межах 4,5-5,0 (родовища Морянці та Хонгуруу), були класифіковані як висококремнієві. До низькокремнієвого різновиду віднесли цеоліти з модулем Si/Al = 4,0-4,5 (родовища Нижній Грабовець, Сокирниця, Белі Пласт та Гектор). Зразки, що одночасно включали приблизно однакову кількість високо- та низькокремнієвої фаз, були характеризовані як змішані кліноптилоліти (родовища Дзегві та Трас). Крім того, Пегаський цеоліт, разом з фазою кліноптилоліту (Si/Al = 4,2), мав у складі до 40% ізоструктурного гейландиту (Si/Al = 3,8), а зразок з родовища Гектор містив ~15% домішкового морденіту.

Іонний обмін катіонів K^+ вивчався в статичних умовах на Na-формах мінералів. За експериментальними результатами були побудовані ізотерми іонного обміну та розраховані термодинамічні константи та стандартні енергії Гіббса (ΔG°) (рис. 1) для кожного зразку.

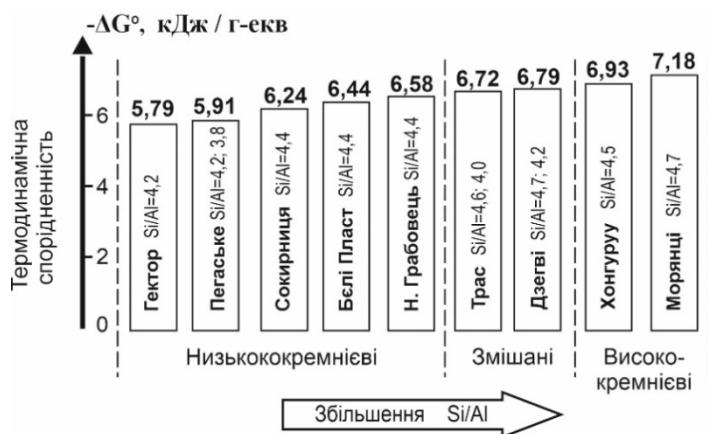


Рис. 1. Стандартні енергії Гіббса обміну катіонів K^+ на Na-формах кліноптилолітів різних родовищ.

Встановлено, що всі зразки проявляють підвищену вибірковість до катіонів K^+ , з тією різницею, що висококремнієві кліноптилоліти з Хонгуруу і Морянців відзначаються більш негативними змінами ΔG° , в порівнянні з низькокремнієвими кліноптилолітами з Нижньограбовецького, Беліпластського, Сокирницького і Пегаського родовищ (Рис. 1). Зміни стандартної вільної енергії іонного обміну у змішаних кліноптилолітів Дзегві і Трас мають, відповідно, проміжні значення.

Таким чином, термодинамічна спорідненість Na-форм кліноптилолітів до катіонів K^+ збільшується зі збільшенням співвідношення Si/Al в цеолітному каркасі мінералів. Це пояснюється зменшенням щільності негативного заряду на стінках цеолітних каналів, що сприяє знаходженню в них катіонів з більшим іонним радіусом.

**ZINC FERRO- AND FERRICYANIDES
FROM POINT OF COLLOID CHEMISTRY VIEW**

Anna Laguta¹, Petra van Koningsbruggen²

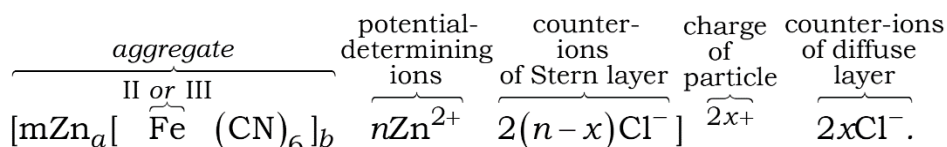
¹ V. N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine

² Aston University, Birmingham, U.K.

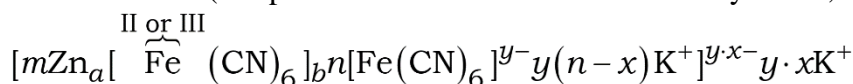
e-mail: laguta@karazin.ua

The current list of applications of the transition metal hexacyanometallates family includes areas such as heterogeneous catalysis, batteries, sensors, supercapacitors, molecular magnets, proton conduction, electrochromic devices, water splitting, hydrogen storage, smart windows, selective ion exchangers, multifunctional probes, therapeutic agents, and drug delivery. Analysis of zinc ferro- and ferricyanides for rational choice or modification of hexacyanoferrates in various applications is the focus. Thermogravimetry, FT-IR spectroscopy, XRD, Dynamic light scattering and laser Doppler electrophoresis data were used.

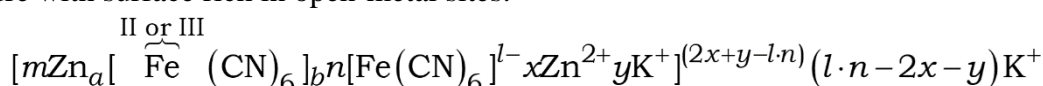
All of the above areas are united by a structure-activity relationship of the material. Nitrogen with weakly antibonding 5σ orbital of C≡N⁻ is σ-donor; such donation increases in Me-C≡N⁻ with increasing charge of the central metal. Thus, Lewis basic sites are formed. When interacting with transition metal dications, open-metal sites with an electron-deficient incomplete coordination sphere can be created, which act as Lewis acid. Double metal cyanides can be obtained as a porous framework or lack crystallinity aggregate with an amorphous part. The letter of which usually corresponds to Zn_a[Fe(CN)₆]_b×ZnCl₂×yH₂O according to elemental analysis. However, free ZnCl₂ was not detected in such samples. From the point of view of colloid chemistry, such structure in water forms a micelle:



Based on the synthesis of 14 samples, the switch from 200-300 nm particles with negative surface rich in Lewis basic sites (sample I and II for zinc ferro- and ferricyanides, respectively):



to structure with surface rich in open-metal sites:



is either stepwise or jumped (sample III and IV) successfully completed for zinc ferricyanide. This is confirmed by the data of all methods used (Table 1). The last structure is interesting because it is supposed to provide a close localization of Lewis basic sites and open metal cation sites.

Table 1. FT-IR, XRD, and laser Doppler electrophoresis data for obtained samples

Sample	ν(C≡N), cm ⁻¹		Compound matching names with match percent with XRD patterns of sample		ζ, mV
	I	II	zinc hexacyanoferrate	others	
I	2163	2090	22 %	78 % Potassium–Iron Cyanide	-39
II	2187	2093	5.6 %	0.19% Potassium, 94.2 % Iron Cyanide	-35
III	2186	2100	96.9 %	3.1 % Zinc–Iron Cyanide	-12
IV	2186	2105	100 %	–	-3

The structures of micelles allow great attention to be paid to every detail of their catalytic activity. This result should not be overlooked for the rational choice or modification of hexacyanoferrates in a range of applications.

ПОРІВНЯННЯ АДСОРБЦІЙНОЇ АКТИВНОСТІ ЕНТЕРОСОРБЕНТІВ НА ОСНОВІ АКТИВОВАНОГО ВУГІЛЛЯ І ДІОКСИДУ КРЕМНІЮ

Любомир Луканюк, Ігор Микитин, Ірина Прокіпчук

Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, м. Івано-Франківськ, Україна

e-mail: liubomyr.lukaniuk.22@pnu.edu.ua

Наразі в медицині застосовується чимало сорбентів [1], які суттєво відрізняються за ціною і позиціонуються виробниками як принципово різні препарати. Однак практично всі вони належать до одного з двох класів: активоване вугілля чи дрібнодисперсний діоксид кремнію. Для споживачів було б дуже корисно мати об'єктивну інформацію про те, наскільки реально відрізняються ці сорбенти та наскільки один з препаратів можна замінити іншим. Ми вирішили порівняти чотири випадково обрані лікарські засоби наявні на ринку: Активоване вугілля, Сорбекс Ультра (діюча речовина: високодисперсне активоване вугілля), Нео сорб актив (діюча речовина: діоксид кремнію), Атоксил (діюча речовина: високодисперсний діоксид кремнію) та два сорбенти тих самих класів, які не є лікарськими засобами – комерційні матеріали (активоване вугілля і діоксид кремнію А-300).

Основними характеристиками сорбенту є сорбційна ємність та те, наскільки він міцно зв'язує речовину. Для вивчення цих характеристик ми вирішили скористатися модельною сполукою, яка є органічним барвником і легко кількісно детектується – катіонний Конго червоний. Для вивчення ємності сорбентів їх інкубували з розчином барвника різної концентрації й вимірювали частку сорбованої речовини спектрофотометричним методом. Сорбція достатньо добре описується моделлю ізотерми Ленгмюра, яка передбачає однакові центри зв'язування ($R^2 = 0.995 - 0.999$). Застосування більш складної моделі Фрейндліха, що враховує багатопшарову адсорбцію та кооперативне зв'язування, не покращує коефіцієнт кореляції ($R^2 = 0.977 - 0.981$). Процес сорбції повністю закінчується за 1 годину.

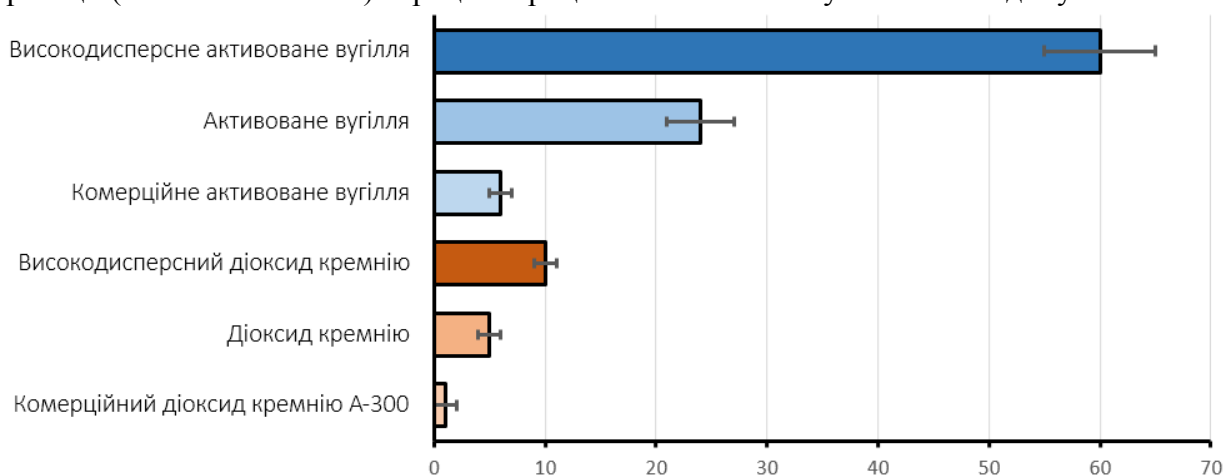


Рис. 1. Сорбційна ємність досліджуваних сорбентів, мг/г. Конго червоний, 1 год., 20 °С

Сорбційна ємність активованого вугілля виявилася в рази вищою ніж діоксиду кремнію. Згідно з результатами експерименту, адсорбційна активність високодисперсного активованого вугілля виявилася в 2,5 рази більшою ніж у простого. Дещо нижчу ємність показав високодисперсний діоксид кремнію. Найгірше себе показали комерційні матеріали, які не є лікарськими засобами, зокрема діоксид кремнію А-300 майже не сорбував барвник.

Комерційно доступні препарати показують більш ніж п'ятикратну відмінність в сорбційній ємності. Активоване вугілля сорбує краще ніж похідні діоксиду кремнію. Проте всі вони переважають сорбенти, які не є лікарськими препаратами.

1. Герашенко І. І. Ентеросорбенти: лікарські засоби і дієтичні добавки. Київ : НАН України, Ін-т хімії поверхні ім. О. О. Чуйка, 2014. 248 с.

ULTRAFILTRATION MEMBRANES PRODUCED BY 3D PRINTING FROM POLYLACTIC ACID

*L.C.A. Molina¹, L.G. de Souza Bairros¹, G.A.V. Magalhães-Ghiotto¹, A. Diorio¹
C. Moser Paraíso¹, Yu.S. Dzyazko², A.M.S. Vieira¹, R. Bergamasco¹*

¹ State University of Maringá, Brasil

² V.I. Vernadskii Institute of General and Inorganic Chemistry of the NAS of Ukraine
e-mail: dzyazko@gmail.com

Eco-friendly 3D printing allows one to produce membranes of needed shape and size. Among known materials for 3d printing, polylactic acid (PLA) is desirable, since the polymer is obtained from renewable and cheap feedstock. Moreover, "green" methods of the PLA synthesis are developed nowadays. Thus, a chain of transformations of lactic acid → polymerization → 3d printing will be related to completely eco-friendly processes. Earlier two-stage procedure was applied to the manufacture of printed ultrafiltration membranes: (i) macroporous support was printed, polymer active layer was applied onto it by means of conventional methods, (ii) the active layer was applied onto macroporous support, which was manufactured preliminarily using traditional techniques. As opposite to known work, we used one-stage procedure to obtain PLA membranes by means of a fused deposition modeling technique. The slicing was carried out using a special software. The outer perimeter of the membrane consisting of 3 sheets was printed with one contour, the inner part was printed as straight stripes with zero distance between each other. Pores, which determine separation ability, should be located in the fields of stripe connections. In each sheet, the direction of the stripes was perpendicular to the line of previous sheet. The membranes were investigated with FTIR spectroscopy, atomic force and scanning electron microscopy, wetting angle was also determined. Water test and calibration with a solution of Ag nanoparticles (10 nm) were also performed. As found, the active layer ($\approx 10 \mu\text{m}$) is located on the top and bottom of each sheet. The pore size was estimated from Hagen-Poiseuille and Ferry equations, this value reaches 10-21 nm. A solution of methylene blue (MB) and orange peel extract were filtered under diffusion regime, the influence of pH, pressure, ionic strength and MB concentration was studied. The membranes show the enhancement of selectivity, when the dye concentration increases from 0.32 to 32 mg dm^{-3} . This is caused by the deposition of poorly soluble dye on the membrane surface due to concentration polarization. An effect of electric exclusion also causes the MB rejection. Membranes performs a function of adsorption barrier, when intraporous electric double layers are not overlapped. However, the membranes shows selectivity towards polyphenols (about 35 %) evidently due to a large variety of their pK_a (3.45 – gallic acid, 7.05 and 8.84 – naringenin, 10 – hesperidin etc.) and different solubility in water (they can form both true and colloidal solutions). Thus, the membrane can reject charged low-molecular weight species and colloidal particles. Good reproducibility of operation characteristics is attributed to the membranes (Table 1), the PLA materials are stable in acidic and alkaline solutions. In order to prevent fouling, additions of hydrophilic agents to PLA can be recommended.

Table 1. Properties of membranes

Parameter	Magnitude	
Membrane thickness, mm	0.45±0.06	
Porosity	0.41±0.1	
Water contact angle, degree	55.2±0.3°	
Permeability of water, $\text{L m}^{-2} \text{h}^{-1} \text{bar}^{-1}$	115±0.4	
Rejection of Ag nanoparticles, %	33.7±5.2	
MB filtration (pH 6, 3 bar)	Permeability $\text{L m}^{-2} \text{h}^{-1} \text{bar}^{-1}$,	1.2±0.4
	Rejection, %	91±3.5
	Water flux recovery, %	38±4

СТРУКТУРНО-МЕХАНІЧНІ ТА ЛІКУВАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ ЛІКУВАЛЬНОЇ КОМПОЗИЦІЇ МОДИФІКОВАНОЇ НАНОРОЗМІРНИМИ МАТЕРІАЛАМИ

Андрій Панько, Ігор Ковзун, Ігор Затовський, Віталій Прокопенко, Олена Циганович

Інститут біологічної хімії імені Ф.Д.Овчаренка НАНУ, Київ, Україна

e-mail: phd.wiz@gmail.com

Класично при лікуванні поверхневих ран використовують різні засоби, які сприяють зупинці та згортанню крові у рані, але тривалість гемостазу при цьому загалом недостатня, що зумовлено ензимною активністю наявної патологічної мікрофлори та зростанням концентрації токсичних речовин у рані. При чому на ефективність гемостазу також можуть впливати загальний стан здоров'я, прийом лікарських препаратів та інші фактори. Таким чином, це справедливо як для здорових людей, в т.ч. забруднених ран в умовах війни, так і хворих з проблемами гемостазу. Актуальним також є залишається питання інфікування антибіотикорезистентними формами мікроорганізмів, що не є, на жаль, рідкістю. Тож, недоліки класичного місцевого лікування визначають необхідність пошуку нових лікарських засобів, які можна було б використовувати поряд із загальною терапією при наданні комплексної лікарської допомоги хворим та пораненим.

У роботі показано, що глинисті мінерали, особливо за наявності нанорозмірної фази мають ряд особливостей, які можна використовувати при місцевому лікуванні поверхневих інфікованих ран, опіків тощо. Механізми цих процесів пов'язані з активацією факторів згортання крові та фібриноутворення, а також, завдяки високій сорбційній активності – сприяють виведенню токсичних речовин [1]. Тож, глинисті композиції модифіковані нанорозмірними матеріалами спричиняє комплексний вплив на систему гемостазу, який полягає у активації прокоагулянтних реакцій при контакті з кров'ю, впливу на фібриноутворення в рані. Сорбційні характеристики таких композицій обумовлюються глинистою складовою та згущувачем кремнеземом. Терапевтичний, антимікробний та протизапальний ефект обумовлюється рослинним екстрактом (екстракт волоського горіха) та наночастинками золота і срібла, при чому останні сприяють й подоланню антибіотикорезистентності патогенної мікрофлори.

Також було виміряно (Рис.1) структурно-механічні властивості такої композиції та модельних систем. Показано, що величини модулю зсуву (G), напруги зсуву (P_{kl}) та в'язкості (η) різко зростають при заміні води у 10% суспензії кремнезему на екстракт горіха і також зростають при додаванні 3% підготовленого каоліну з наночастинками золота і срібла.

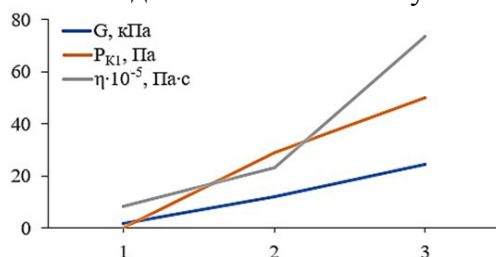


Рис. 1. Структурно-механічні властивості такої композиції та модельних систем
1 – 10% кремнезем у воді; 2 – 10% кремнезем у екстракті; 3 – композиція

Таким чином композиція, що розроблюється має конкурентні терапевтичні властивості та оптимальні характеристики, які забезпечують стабільність системи, здатність рівномірно розподілятися і утримуватися після аплікації на рані, а після завершення додаткових досліджень і реєстрації може стати перспективним доповненням загальної терапії.

Автори вдячні за фінансову підтримку Національному Фонду Досліджень України, проект № 2023.04/0041 «Розробка інноваційного лікарського засобу «Коагулокс_N» з антимікробними, кровоспинними та ранозагоювальними властивостями» за договором 163/0041.

1. Ковзун І. Г. та ін. Застосування нанорозмірних систем глинистих мінералів у комплексному лікуванні хворих на гемофілію «А». Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології. – 2008. – 6 (2). – С. 613-623

СОРБЦІЙНА ФЛОТАЦІЯ – ПЕРСПЕКТИВНИЙ МЕТОД ОЧИЩЕННЯ ТЕХНОГЕННИХ ТА СТИЧНИХ ВОД ВІД УРАНУ (VI) І ТОРІЮ (IV)

Перлова О. В.

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

e-mail: olga_perlova@onu.edu.ua

Україна володіє значними запасами уранових руд і монациту. Незначні кількості урану і торію містяться у великих об'ємах техногенних та стічних вод, які утворюються при комплексній гідрометалургійній переробці традиційної та нетрадиційної уранорудної сировини, відпрацьованого ядерного палива, при виробництві деяких видів будівельних матеріалів і фосфорних добрив. Перед скиданням у відкриті водойми ці води мають бути ретельно очищені, оскільки містять залишкові концентрації урану і торію, що перевищують відповідні значення ГДК. Отже, розробка простих та ефективних методів очищення великих об'ємів стічних вод, які забезпечуватимуть вилучення забруднень і цінних компонентів, є надзвичайно актуальною проблемою. Для цих цілей розробляються флотаційні методи та їх комбінації з іншими фізико-хімічними методами очистки води, зокрема, адсорбцією. Для інтенсифікації процесу шляхом реалізації методу сорбційної флотації в якості флотаційних збирачів запропоновано використовувати тонкодисперговані тверді розчини поверхнево-активних речовин (ПАР) у парафіні, які уявляють собою кульки парафіну, поверхня якого модифікована ПАР. Парафін, модифікований ПАР, уявляє собою реагент, який поєднує гідрофобність парафіну (тому ефективно закріплюється на поверхні бульбашок повітря при флотації) і здатність ПАР взаємодіяти з йонами металів, зокрема, урану і торію. Введення збирачів у вигляді тонкодиспергованих твердих розчинів ПАР у парафін дозволяє знизити вартість процесу очистки за рахунок зменшення витрати ПАР і можливості його легкої регенерації, а також попередити вторинне забруднення розчинів, які очищують.

Мета роботи – з'ясування доцільності очищення модельних розчинів від урану і торію методом сорбційної флотації.

Об'єктами дослідження слугували модельні розчини, що містили 0,02 моль H_2SO_4 та 0,0002 моль ураніл або торій (IV) нітрату у літрі. В якості флотаційних збирачів використовували 0,5% водні суспензії 0,5 моляльних твердих розчинів трибутилфосфату ТБФ ($(C_4H_9O)_3PO$), фосфіноксиду різнорадикального ФОР ($(C_nH_{2n+1})_3PO$, $n = 5 - 6$) або триалкіламіну ТАА (суміш $(C_nH_{2n+1})_3N$, $(C_nH_{2n+1})_2NH$ і $C_nH_{2n+1}NH_2$, $n = 7 - 9$) у парафіні.

Проведені дослідження показали, що усі використані реагенти можуть бути використані для ефективноної очистки модельних розчинів на 90-99,5% від урану і торію при оптимальних умовах здійснення процесу сорбційної флотації, встановлених експериментально. Наприклад, при оптимальних умовах проведення процесу очистки модельних розчинів від урану за допомогою тонкодиспергованого твердого розчину ТАА у парафіні (рН 5-10, витрата реагенту 0,8 моль ТАА/моль урану, температура 20⁰С, час флотації 10 хв) уран може бути вилучений з розчинів на 99,5%, що відповідає його залишковій концентрації в розчині 0,25 мг/дм³ при вихідній концентрації урану 50 мг/дм³ і 0,01 мг/дм³ при вихідній концентрації урану 2 мг/дм³, тобто не перевищує гранично припустимих норм. Модельні розчини, що містять торій, найкраще можуть бути очищені за допомогою парафіну, модифікованого ТБФ. В даному випадку можна досягти вилучення торію на 100% протягом 7 хвилин в інтервалі рН розчинів 6-10 при витраті реагенту 1 моль/моль торію. Встановлено, що навіть після п'ятикратної регенерації тверді розчини ТБФ, ФОР і ТАА в парафіні можуть бути використані як достатньо ефективні флотаційні реагенти для вилучення урану і торію з водних розчинів.

Таким чином, метод сорбційної флотації з використанням тонкодиспергованих твердих розчинів ТБФ, ФОР і ТАА в парафіні значно розширює можливості застосування йонної флотації у практиці очистки техногенних та стічних вод до залишкових концентрацій урану і торію 0,01-0,25 мг/дм³, які не перевищують гранично-допустимих норм з можливістю регенерації та багаторазового повторного використання реагентів.

КІНЕТИКА, РІВНОВАГА ТА МЕХАНІЗМ АДСОРБЦІЇ МЕТАЛІВ ІІІ В ГРУПИ ЦИРКОНІЙ-КРЕМНЕЗЕМНИМ НАНОСОРБЕНТОМ

Перлова О. В.

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

e-mail: olga_perlova@onu.edu.ua

Робота присвячена дослідженню адсорбції елементів ІІІ В групи (скандію, ітрію та лантану) з водних розчинів з використанням цирконій-кремнеземного наносорбенту у часі та у рівноважних умовах, а також встановленню механізму взаємодії адсорбатів з адсорбентом.

Об'єктами дослідження слугували розчини скандій(ІІІ), ітрію(ІІІ) та лантан(ІІІ) хлоридів, які містили у своєму складі від 0,01 до 0,25 ммоль металів у дм^3 і мали рН 2,5. Різноманітні йонні форми цих металів, які були присутні у досліджуваних розчинах після встановлення потрібних значень рН, виконували роль адсорбатів у досліджуваному процесі. В якості адсорбенту було обрано зразок нанокompозиту на основі високодисперсного кремнезему, що містив 29 % ZrO_2 . Цей зразок був наданий для досліджень співробітниками Інституту фізичної хімії ім. Л. В. Пісаржевського НАН України. Адсорбент складається з частинок розміром 8,5 – 10 мкм, має пори радіусом від 3,5 до 7,6 нм, його питома поверхня дорівнює 900–1000 $\text{м}^2/\text{г}$, ізоелектричний стан поверхні має місце в при рН 3,5.

Адсорбційні дослідження здійснювали методом обмеженого обсягу за температури 20°C, дозі адсорбенту 0,4 $\text{г}/\text{дм}^3$, об'ємі розчину солі металу 50 см^3 . Час контакту фаз варіювався від 5 до 270 хв. Фази розділяли фільтруванням через паперовий фільтр «синя стрічка». У фільтраті визначали вміст певного металу фотоколориметричним методом (фотоколориметр КФК-2М, реагент Арсеназо ІІІ, товщина кювет 20 мм, $\lambda = 670$ нм).

Проведені дослідження показали, що даний адсорбент ефективно вилучає скандій, ітрію (> 99%) та лантан (98%) за оптимальних умов проведення процесу: рН 8 – 10 (Sc), 9 – 10,5 (Y) 11,0 (La); витрата сорбенту 0,4 $\text{г}/\text{дм}^3$; час контакту фаз 4 год (Sc), 3,5 год (Y), 3 год (La). Детально досліджено кінетику адсорбції. Аналіз інтегральних кінетичних кривих дозволив визначити час встановлення адсорбційної рівноваги та час напівсорбції, які дорівнюють 240 і 37 (скандій), 210 і 21 (ітрію), 180 і 45 (лантан) хв. Отже, найповільніше поглинаються скандій і лантан, а найшвидше – ітрію. Здійснено моделювання кінетики сорбції з використанням рівнянь формальної кінетики, а також дифузійних (зовнішньої дифузії та внутрішньої дифузії Бойда) та кінетичних моделей (псевдопершого та псевдодругого порядків). Встановлено, що режим сорбції є змішано-дифузійним; кінетика сорбції підпорядковується моделі псевдодругого порядку. Розраховано значення констант швидкості сорбції за усіма використаними моделями, найвищі значення знайдені для ітрію.

Вивчення адсорбції металів ІІІ В групи цирконій-кремнеземним наносорбентом у рівноважних умовах при оптимальних для кожного металу рН розчинів дозволило одержати та проаналізувати експериментальні ізотерми адсорбції. Ізотерма адсорбції скандію відноситься до S-типу, а ізотерми адсорбції ітрію та лантану – до L-типу і є ступінчастими, що в більшому ступені виражено для ізотерми сорбції ітрію. Проведено моделювання ізотерм адсорбції рівняннями Ленгмюра, Фрейндліха, Фрумкіна-Фаулера-Гутгенгейма та Дубініна-Радушкевича. Розраховано константи моделей ізотерм, які вказують на значну спорідненість адсорбатів до даного адсорбенту; значення зміни вільної енергії адсорбції (кДж/моль) -32,82 (Sc), -30,77 (Y), -35,56 (La), які свідчать про самочинний характер процесу та змішаний характер адсорбції з переважанням хемосорбції; значення характеристичної енергії сорбції в моделі Дубініна-Радушкевича (кДж/моль) 10,79 (Sc), 9,58 (Y), 16,01 (La), які говорять про значний внесок іонного обміну в механізм сорбції. Від'ємні значення коефіцієнта α в моделі Фрумкіна-Фаулера-Гутгенгейма свідчать про відштовхування йонів сорбату у сорбційному шарі.

Комплекс проведених досліджень дозволив запропонувати механізм взаємодії адсорбатів з адсорбентом для різних значень рН розчинів, який включає електростатичну та дисперсійну взаємодію, катіонний обмін, сополімеризацію, утворення водневих зв'язків.

СИНТЕЗ ІОННИХ РІДИН ІОНЕНОВОГО ТИПУ НА ОСНОВІ ПОХІДНИХ ТЕТРАГІДРО-1,4-ОКСАЗИНУ

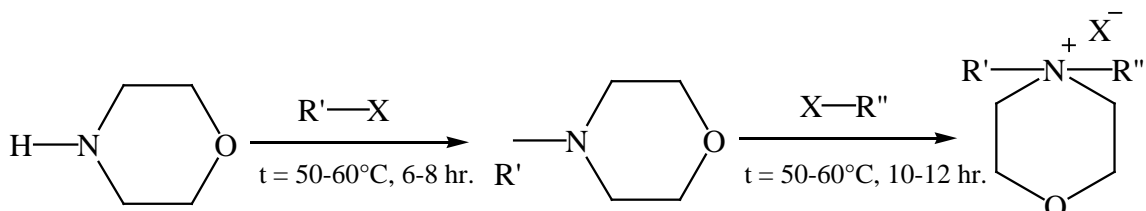
Максим Потапчук, Ольга Свердліковська

Навчально-науковий інститут «Український державний хіміко-технологічний університет»
Українського державного університету науки і технологій, Дніпро, Україна
e-mail: o.sverdlikovska@gmail.com

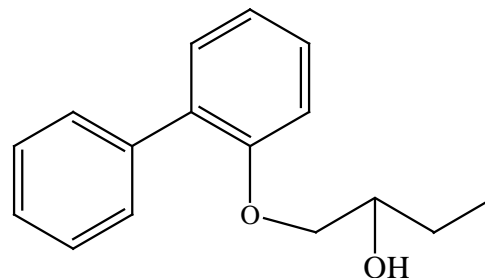
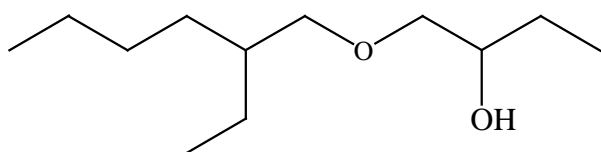
Робота присвячена вирішенню актуальних науково-технічних, техніко-економічних, екологічних проблем, вивченню особливостей створення та шляхів удосконалення методів синтезу полімерних, олігомерних і низькомолекулярних іонних рідин.

З метою прогнозування впливу природи радикалів біля атома Нітрогену макромолекули полімерних іонних рідин іоненового типу інтерес становило отримання іонних мономерів з різними органічними катіонними частинами. Найбільш достовірні дані дає вивчення такої залежності на об'єктах з відомою молекулярною масою.

Синтез іонних рідин іоненового типу здійснювали взаємодією третинних амінів на основі тетрагідро-1,4-оксазину з галогенопохідними. Загальні схеми синтезу наведені на рис. 1.

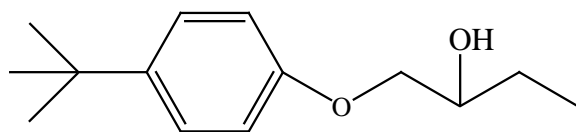


where $R' = R'' =$



HD-1
TA-1

HD-2
TA-2



HD-3
TA-2

$X = Cl$

Рис. 1. Схема синтезу іонних рідин іоненового типу

Встановлено, що створені синтетичні підходи функціоналізації полімерних іонних рідин та іонних рідин іоненового типу на основі полімерних четвертинних амонієвих солей та їх аналогів дозволяє отримати рідкі сполуки з прогнозованими властивостями у широкому діапазоні температур. Це дає можливість розширити області практичного використання іоненів.

ФОРМУВАННЯ НАНОЧАСТИНОК СЕЛЕНУ ТА ЇХ ВИКОРИСТАННЯ В МЕДИЦИНІ

В.А. Прокопенко, О.А. Циганович

Інститут біологічної хімії імені Ф.Д. Овчаренка НАНУ,
бульвар Академіка Вернадського, 42, Київ, 03142, Україна;
e-mail: prokop_va@ukr.net

У зв'язку з високою зацікавленістю проблемами отримання і застосування в медицині нанорозмірних частинок ряду елементів, як металевої, так і неметалевої природи, в тому числі селену, світова наукова література останніх років містить значний об'єм інформації, яка відображає поєднання двох «топових» наукових тенденцій. З одного боку – це розвиток методології і технологій отримання нанорозмірних систем селену, а з іншого – використання їх унікальних терапевтичних властивостей у медицині.

В роботі проаналізовано ці тенденції для виявлення найбільш ефективних шляхів реалізації цільових задач в області формування наночастинок селену та їх застосування в медицині, а також як основи для отримання у цій області нових наукових і практичних результатів.

Показано нові широкі можливості використання селену у складі лікарських препаратів, у створенні нових типів біодобавок, в системах доставки ліків, аплікаційних перев'язочних матеріалів і т.д., які відкрились при появі можливостей формування його у вигляді наночастинок. Доводиться, що наночастинок мають переваги, по відношенню до інших використовуваних форм селену, зокрема, по дифузійним властивостям, розчинності, імуногенності та є менш токсичними, що дозволяє суттєво оптимізувати селенотерапію і зробити її більш ефективною за рахунок, в основному, входження селену у склад селенопротеїнів і впливу на ряд розглянутих біохімічних процесів організму. Наночастинок селену можуть також використовуватися у нових діагностичних методах і техніках для ранньої діагностики захворювань.

Наведено аналіз методів синтезу: хімічного (шляхом відновлення), біологічного, мікрохвильового, сольвотермального/гідротермального, «зеленого» синтезу, електроосадження і синтезу у випромінюванні пульсуючого лазера. Показано, що при цільовому, відносно терапії, синтезі ультрадисперсних (в тому числі нанорозмірних) частинок селену і його використання в медицині, принциповими є питання форм-фактору частинок, розмірозалежності їх біологічної активності і векторності дії, морфології поверхні і стану її адсорбційних шарів, стабілізації дисперсій частинок, які в сукупності і визначаються вибраним методом. Розглянуто рішення в області модифікування поверхні частинок селену і стабілізації їх дисперсій, використання їх в ролі адсорбційних матриць і транспортних систем при створенні кон'югатів із наночастинок і біомакромолекул.

Як один з підсумків роботи - висновок про найбільш перспективний напрямок у синтезі нанорозмірних частинок селену – «зелений синтез», який, як показано експериментальним дослідженням, виступає найбільш варіабельним із розглянутих.

Ключові слова: нанорозмірні частинки селену, керовані методи синтезу, стабілізація

ZIRCONIUM PHOSPHATE COMPOSITE-REINFORCED POLYTETRAFLUOROETHYLENE (PTFE) MEMBRANES FOR FILTRATION

*Luidmyla Rozhdestvenska*¹, *Kateryna Kudelko*¹, *Oleksandr Tymoshenko*², *Olexiy Palchik*¹

¹V.I. Vernadskii Institute of General and Inorganic Chemistry of the NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

²National Technical University of Ukraine “Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute”, Kyiv, Ukraine

e-mail: ludar777@ukr.net

Filter module with tubular membranes are the most practical highly productive set-up for the treatment of wastewater and industrial technological waste. Due to high mechanical and chemical properties, microfiltration tubular PTFE membranes have a high potential for use as a filter material in these set-up. One of the disadvantages of this polymer membrane is the tube walls stretching under the high-pressure conditions during the separation of liquid wastes. Another disadvantage is the significant surface hydrophobicity causes by rapid contamination of the pores with organic substances. To overcome these shortcomings, modification of membrane tubes with an organic-inorganic composite modifier is proposed. An inorganic ion exchanger based on zirconium hydrophosphate (ZHP) is the main component of the modifier, that provides an increasing of the hydrophilicity of the pores due to the dissociation of hydrogen and dihydrogen phosphate groups. It can be incorporated inside the pores of the polymer matrix as nanoparticles and thus form secondary porosity. Polytetrafluoroethylene is the second component of the composite modifier. It's caused larger macropores filling and increased the rigidity of the flexible polymer tube. Reinforced organic-inorganic membrane provides more stable permeate flow thereby positively impact the separation process and extends the membrane life-time in filtration-purification cycles.

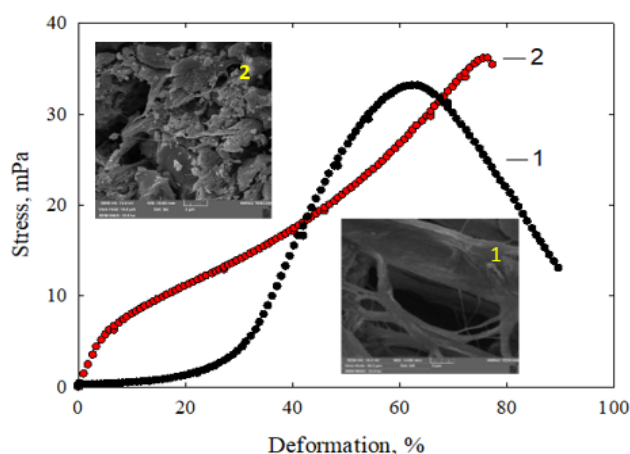


Fig. 1. Deformation and SEM images of the pristine (1) and modified (2) membranes.

As a result, composite modifier fills the pores of pristine membrane and changes its porous structure. The membrane becomes more rigid without stretching. Organic-inorganic filler significantly improves the mechanical and separation characteristics of the pristine PTFE membrane. Composite modifier halved the pore size and turned the microfiltration membrane into an ultrafiltration one. Inorganic ion exchanger provides a shift of the isoelectric point (pristine membrane – 0.1, modified membrane – 5.08) towards higher values and brings to positive surface charge that increases protein rejection and reduces irreversible fouling (water flow recovery coefficient doubles). The water flux reduction for the modified membrane was 24% (0.5 bar), indicating the effect of the composite modifier. Selectivity of the membrane for globular proteins was found to be 35% (bovine serum albumin, 69 kDa), 57% (ovalbumin, 32 kDa) and 42% (lactalbumin, 15 kDa) at low pressure (0.5 bar).

МОДИФІКАЦІЯ НЕНАСИЧЕНИХ ОЛІГОЕСТЕРІВ БІМЕТАЛЕВИМИ КОМПЛЕКСАМИ Ge(IV) ТА Sn (IV) ДЛЯ БЕЗПЕЧНОГО ЗАТВЕРДЖЕННЯ ПОЛІМЕРНИХ СИСТЕМ ПІДВИЩЕНОГО ОБ'ЄМУ В НЕІЗОТЕРМІЧНОМУ РЕЖИМІ

Сергій Савін, Олеся Кіосе, Інна Сейфулліна, Олена Марцинко

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, кафедра неорганічної хімії та хімічної освіти, вул. Дворянська 2, Одеса, 65082, Україна

savinsergei4864@ukr.net

На теперішній час актуальною темою є розробка ненасичених олігомерних систем, які здатні до затвердження з отриманням полімерних виробів достатньо великого об'єму. Головною проблемою при цьому є складність забезпечення відводу тепла і, як наслідок, ризик перегріву та руйнування кінцевого продукту. Навіть якщо виріб має тонкі стінки, але при цьому його розміри достатньо великі, ризик перегріву стосується резервуару з олігомерною системою, наприклад при 3D-друці. Найбільш поширеною з таких систем є розчин поліглікольмалеїнатфталату (ПГМФ) з вініловим мономером, який полімеризується з додаванням ініціатора під дією температури або УФ-випромінювання, а найефективнішим способом захисту від перегріву є модифікація олігомерної системи з метою зниження температурного коефіцієнта реакції кополімеризації (γ).

Раніше авторами було показано, що введення незначної кількості (0,1-1%) моно- чи біметалевого комплексу з лігандами, які містить карбоксильні, гідроксильні або аміногрупи, дозволяє майже на порядок як підвищити, так і знизити швидкість радикальної кополімеризації отриманого модифікованого ПГМФ (м-ПГМФ) на початкових стадіях процесу [1-2]. Дослідження впливу модифікації на γ дотепер не проводились. Слід зазначити, що математичний розрахунок температури системи, що формується за умовами не повного відведення тепла є складною задачею, але без її вирішення не можливо дати оцінку ефективності модифікації. Мета даної роботи – пошук таких модифікаторів, які дозволять надати системі найменшого значення γ . Для досягнення мети та вирішення поставлених задач було застосовано метод кінцевих елементів. Розрахунок проводили за допомогою комп'ютерної програми, яка наведено у роботі [3].

Нами було досліджено вплив мономера на кінетику кополімеризації і показано, що при 50%-вому вмісті мономеру в ряду метилметакрилат (ММА), бутилметакрилат, триетиленглікольдиметакрилат, дитриетиленглікольдиметакрилатфталат найменше значення γ спостерігається при використанні ММА. Іншим способом модифікації було введення в молекулу ПГМФ координаційної сполуки безпосередньо при її формуванні в процесах поліконденсації. Досліджено значну кількість координаційних сполук Ge(IV)/Sn(IV) та 3d-металів з 1,10-фенантроліном (phen) та 2,2'-біпіридином і ксиларовою (H₅Xylar)/винною (H₄Tart) кислотами. Показано, що найнижче значення $\gamma=1,26$ досягається при застосуванні біметалевого комплексу $[Zn(phen)_3]_2[(OH)_2Ge_2(\mu-HXylar)_4Ge_2(\mu-OH)_2] \cdot 18H_2O$ як модифікатора системи м-ПГМФ+ММА, що дозволяє підвищити її допустимий об'єм з 18 см³ (для системи без модифікатора) до 1600 см³.

1. Кіосе, О. О.; Савін, С. М.; Сейфулліна, І. Й.; Марцинко, О. Е.; Чебаненко, О. А. Вплив біметалічних комплексів германію(IV) як модифікаторів ненасиченого олігоестеру на кінетику його кополімеризації з метилметакрилатом. *Вісник ОНУ. Хімія*. **2021**, 26 (4(80)), 61-69. [https://doi.org/10.18524/2304-0947.2021.4\(80\).250928](https://doi.org/10.18524/2304-0947.2021.4(80).250928)

2. Кіосе, О. О.; Савін, С. М.; Афанасенко, Е. В. Солі та подвійні тартратогерманати/станнати 3d-металів як модифікатори ненасичених олігоестерів. *Voprosy khimii i khimicheskoi tekhnologii*, **2023**, 2, 67-74. <http://dx.doi.org/10.32434/0321-4095-2023-147-2-67-74>

3. Савін С. М. Моделювання розподілу температури в процесах полімеризації методом кінцевих елементів: монографія. Одеса : «Гельветика», **2022**.

АДСОРБЦІЙНЕ ВИЛУЧЕННЯ АНТОЦΙΑНІВ ЧЕРВОНОЇ ТРОЯНДИ НА ВОЛОКНИСТОМУ КАТІОНІТІ ФИБАН К-1

Людмила Солдаткіна, Вікторія Літвінова

Одеський національний університет імені І.І.Мечникова, Одеса, Україна
e-mail: soldatkina@onu.edu.ua

Антоціани – водорозчинні рослинні барвники, що відносяться до флавоноїдів та володіють антиоксидатною активністю. В останні роки дослідники особливу увагу приділяють пошуку нових економічних і легкодоступних джерел антоціанів, для того щоб використовувати антоціани як функціональні інгредієнти для виробництва харчових добавок, дієтичних продуктів і лікарських засобів.

Троянди культивуються по всьому світу в декоративних, косметичних і лікувальних цілях і є перспективним джерелом антоціанів. В залежності від сорту пелюстки троянд містять різні антоціани, але до основних належать 3,5-диглюкозиди ціанідину, пеонідину або пеларгонідину.

Мета роботи: визначити фізико-хімічні закономірності адсорбційного вилучення антоціанів червоної троянди на волокнистому катіоніті ФИБАН К-1 та провести моделювання кінетики адсорбційного процесу.

Свіжі червоні пелюстки чайно-гібридної троянди "Black Magic" були висушені в сушильній шафі при 30 °С до сталої маси і подрібнені механічно до частинок приблизно 5 мм. Антоціани вилучали з пелюсток, застосовуючи метод мацерації. Екстрагентом слугував 0,1 М водний розчин HCl. Адсорбентом обрано волокнистий сильно кислотний катіоніт ФИБАН К-1, який містить функціональні групи $-SO_3-H^+$.

Адсорбцію антоціанів троянди здійснювали в статичних умовах. Концентрацію антоціанів в екстрактах визначали за допомогою методу рН-диференціальної спектрофотометрії.

Проведенні дослідження показали, що найбільша ступінь адсорбційного вилучення антоціанів троянди можлива при рН=1.4-2.5, а при значеннях рН=3.0-3.5 ступінь адсорбційного вилучення антоціанів троянди суттєво зменшується. При збільшенні маси катіоніту ФИБАН К-1 від 3 до 20 г/л ступінь адсорбційного вилучення антоціанів троянди збільшується від 54 до 86%. При зміні початкової концентрації антоціанів троянди в екстракті від 20 до 200 мг/л ступінь адсорбційного вилучення антоціанів троянди зменшується від 91 до 68 %.

Встановлено, що адсорбція антоціанів троянди на катіоніті ФИБАН К-1 швидко зростає протягом перших 30 хв, а потім наступні 30 хвилин збільшується повільно, наближаючись до рівноважного стану, який встановлено після 120 хв від початку адсорбції. На величину рівноважного часу адсорбції антоціанів троянди на катіоніті ФИБАН К-1 збільшення температури від 293 до 313 К не впливає, але величина адсорбції антоціанів троянди збільшується.

Аналіз експериментальних кінетичних кривих адсорбції антоціанів троянди за допомогою кінетичних моделей псевдопершого і псевдодругого порядків показав, що отримані в даній роботі кінетичні криві адсорбції антоціанів троянди краще описуються моделлю псевдодругого порядку: розраховані значення рівноважної адсорбції наближаються до експериментальних значень, коефіцієнти лінійної кореляції вищі, а середні відносні похибки мають менші значення.

Отже, отримані фізико-хімічні закономірності адсорбційного вилучення антоціанів можуть бути застосовані для оптимізації процесу адсорбції антоціанів пелюсток червоної троянди на катіоніті ФИБАН К-1, що сприятиме розробці та впровадженню більш ефективних технологій вилучення антоціанів в промислових умовах.

ADSORPTION CHARACTERISTICS OF ACID ACTIVATED LAPONITE® PLATELETS

Olena Solovieva¹, Yurii Samchenko¹, Liudmyla Kernosenko¹, Irina Ganusevich²,
Olena Samoilenko²

¹F.D. Ovcharenko Biocolloidal Chemistry Institute, NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

²RE Kavetsky Institute of Experimental Pathology, Oncology and Radiobiology, NAS of Ukraine,
Kyiv, Ukraine

e-mail: a-samoilenko@ukr.net

The synthetic Laponite® (Lap) empirical formula $\text{Si}_8\text{Mg}_{5.45}\text{Li}_{0.4}\text{H}_4\text{O}_2\text{Na}_{0.7}$ (Rockwood Additives Ltd., Widnes, U.K.) has a plate-like structure and belongs to the family of silicates. Having dispersed in deionized water, the Lap platelets exist as 1 nm thick discs with diameters about 25 nm. Colloidal suspensions of the highly anisometric Lap can exhibit many unusual properties including interesting phase state - “house of cards” assembly, unique structural ordering, and dynamical arrest. The Lap-based materials have already demonstrated excellent transport, chemical and biomedical properties and can be used for production of tools for regenerative medicine and controlled antitumor drug delivery. This work compares adsorption characteristics of Lap and acid activated Lap (LapA) platelets. Acid activation was done using sulphuric (H_2SO_4) acid. The acid activation affects the overall negative charge, specific surface area, and average pore volume. For preparation of LapA samples the concentration of Lap was fixed at 2 % wt, and concentration of acid was varied within $C_a=0.5-10$ % wt. The samples are referred #1 (Lap, $C_a=0.0\%$, no acid treatment), #2 ($C_a=0.5\%$), #3 ($C_a=1.0\%$), #4 ($C_a=6.0\%$). Note that typically, the acid treatment results in protonated products, whereas the strong treatment, with severe attacks of the oxygen sites results in connection of the octahedral and tetrahedral sheets on the edge of the faces results in partial damage of the native Lap structure. The N_2 physico-sorption measurements were done using Micro300C-02-Analysis Station2 (AltaMira Instrument).

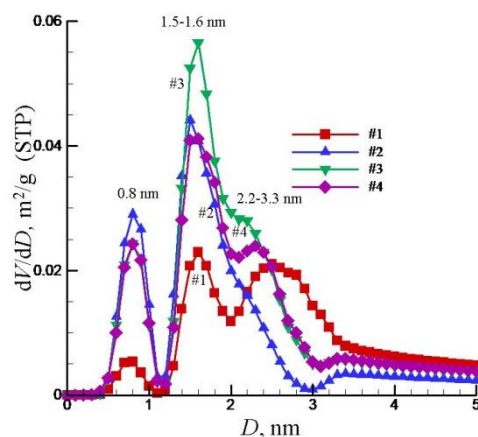
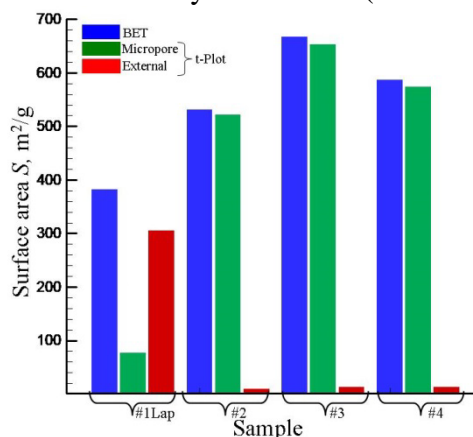


Fig. 1. Surface area S obtained according BET and t-plot methods.

Fig. 2. Pore size distributions for different samples.

Figure 1 presents obtained data on surface area for all samples obtained according BET methods and micropores and external pores analysis by t -plot methods (IV-type of isotherm for micro - mesoporous materials). Figure 2 presents evaluated pore size distributions obtained using Barrett-Joyner-Halenda (BJH) method. Note that acid activation significantly affected the micropores surface areas. Moreover it resulted in redistribution of contributions of micropores and supermicropores ($D < 2$ nm) as well as larger structures. The observed data for the strong acid treatment (samples #3, #4) can reflect the changes in Lap crystallinity and transformation into the amorphous products. Obtained data can be useful for understanding of properties of cross-linked hydrogels with incorporated LapA in the systems for controlled drug delivery and diagnosis of oncological diseases.

Grants. The National Research Foundation of Ukraine, Project № 2022.01/0039, 2024.

HEMOCOMPATIBLE FLUORINE-CONTAINING POLY(URETHANE-UREA)S AS COATING INTRAVASCULARE STENT: SYNTHESIS AND *IN VIVO* INVESTIGATION

*Oleg Shekera*¹, *Valery Muzhev*¹, *Tatiana Goridko*², *Volodumur Mushak*¹

¹Institute for Macromolecular Chemistry of the NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

²Palladin Institute of Biochemistry of the NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

shekerao@ukr.net

Intravascular stenting is known as one of the most successful and reliable methods of treating stenosis of coronary arteries. This method is considered highly effective and non-invasive for the treatment of coronary heart disease. Because restenosis, the major long-term complication after stent placement, cannot be controlled by simple design modifications, coated and surface-modified stents are believed to be the devices of the future. Today, there are several types of coatings for intravascular stents and these coatings vary from inorganic to organic, from biodegradable to biostable polymer materials. Due to their good mechanical properties, biocompatibility, processability, synthetic polymers are excellent candidates for stent coatings.

The main purpose of our research was synthesis of fluorine-containing poly(urethane-urea)s (FPUU)s as a coating of intravascular stents, study there physico-chemical properties and evaluation of the biological response of vessels to polymer coatings of stents *in vivo*.

The FPUUs were synthesized by a two-step solution polycondensation technique. Diisocyanate prepolymers are obtained on the basis of 2,4-,2,6-toluene diisocyanate (TDI, 65/35), 4,4'-diphenylmethane diisocyanate (MDI), oligooxypropylene glycol (OPG, Mw 1500 g/mol) and oligooxytetramethylene glycol (OTMG, Mw 1000 g/mol), respectively. Perfluoroaromatic isomeric diamine (DA) was used as polymer chain extender (Fig.). FPUUs were characterized by the methods of IR-Fourier spectroscopy, GPC, DSC and DMTA. Thromboresistent properties of FPUUs were investigated and a morphological analysis of the aorta of animals after implantation of stents animals (rabbit) was performed. The polymer coating was formed by immersing the stent (316L stainless steel) in a 15 % FPUU/DMAA solution. The solvent was evaporated at 50 °C for 48 h to obtain a coating. Finally, the samples were stored under vacuum to remove residual solvent.

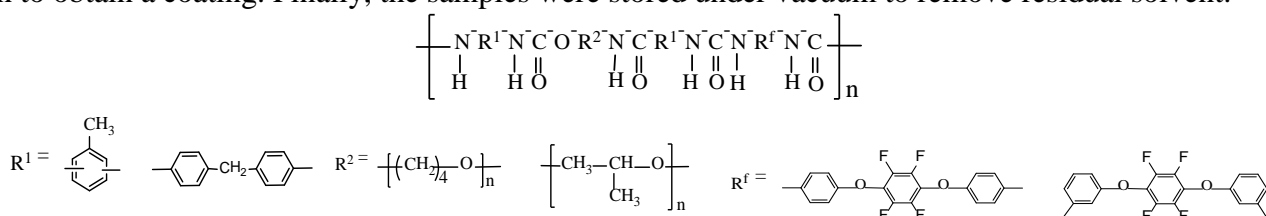


Fig. The general scheme of the synthesis of FPUUs.

It is shown that the absence of changes in the concentration of fibrinogen in whole blood indicates a slight probability of the development of thrombus formation upon contact of FPUUs with blood. An acceptable decrease in the number of platelets, as well as the preservation of functional properties (aggregation and disaggregation in the presence of ADP regardless of the concentration of the inducer) indicate the prospects of FPUUs for their use as thromboresistent polymeric materials. It was shown that both the chemical composition of the polymer coating and the isomerism of the amino groups in the composition of the fluorinated chain extender determine the nature of the morphological changes in the walls of the aorta of animals. It was established that the stent coating can both stimulate and inhibit the polymer-vessel reaction. The coating based on TDI, OPG and *para*-DA causes an increase in the reaction of the vessel walls, which causes an inflammatory reaction and the formation of a fibrous layer at the point of contact of the stent with the vessel of experimental animals. On the other hand, coatings based on MDI, OTMG, *para*-DA and MDI, OTMG, *meta*-DA, respectively, do not cause an inflammatory reaction of vessel walls and can be recommended for use as polymer coatings for stents. The obtained results allow us to conclude about the feasibility of using FPUU as a biocompatible and thromboresistent coating to prevent/weaken the reaction of the layers of the aorta (intima, media) to the presence of an intravascular stent *in vivo* in the treatment of human coronary heart disease.

SYNTHESIS AND PROPERTIES NEW FLUORINE-CONTAINING SEGMENTED POLYURETHANE MEDICAL APPLICATION

*Oleg Shekera*¹, *Valery Muzhev*¹, *Tatiana Goridko*², *Vita Semynoh*¹, *Volodumur Mushak*¹

¹Institute for Macromolecular Chemistry of the NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

²Palladin Institute of Biochemistry of the NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

shekerao@ukr.net

Fluorine-containing segmented polyurethanes (FSPUs) are a new class of functional materials that combine some of the advantages of fluorinated polymers and polyurethanes, such as good mechanical properties, excellent flexibility, low water absorption and surface energy, hydrophobicity and biocompatibility. FSPUs have found wide application as film-forming polymer materials and coatings for medical purposes due to their performance, bio- and hemocompatibility and ability to widely vary properties depending on the composition, conditions of synthesis and modification. Therefore, the study of FSPUs has been attracted considerable interest in recent years.

In this work, new FSPUs medical application were synthesized and investigated there physico-chemical and biomedical properties. The synthesis of FSPUs based on 4,4'-methylenbis(phenylene isocyanate) (MDI) and different isomeric fluorine-containing bisphenol (FBHp) which contained HO-groups in the *para*-, *meta*-, and *ortho*-positions respectively. The soft segment consisted of oligooxytetramethylene glycol (OTMG, $M_w = 1000$ g/mol). All polymer were prepared by a two-step solution polymerization method. In the first stage, a prepolymer was obtained by reaction between MDI and OTMG. In the second stage, a stoichiometric quantity of FBHp dissolved in DMAA was added to the prepolymer. The molar ratio of MDI, OTMG and BHp is 2:1:1. The reaction was performed under nitrogen atmosphere at 80 °C in the presence of dibutyltin dilaurate as catalyst. Reaction completion was monitored by the absence of IR-absorption of the free NCO group at 2270 cm^{-1} . The whole reaction process is depicted in Fig. Films FPUUs were prepared from FSPU/DMAA 20 %-solution casting onto a Teflon framework and subsequent evacuation to a constant weight. IR spectroscopy, gel penetration chromatography, differential scanning calorimetry as well as mechanical measurements carried out the characterization of polymers. Biomedical properties of polymers were investigated *in vitro* and *in vivo*.

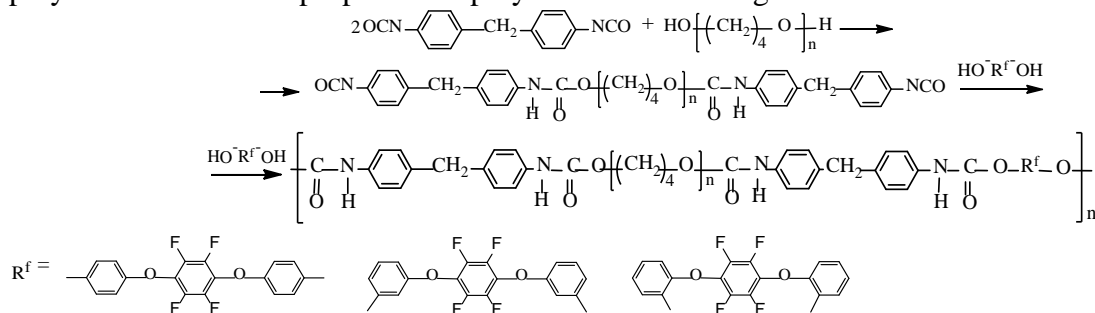


Fig. Reaction scheme synthesis of FSPUs.

It was shown that FSPUs are linear polymers soluble in DMFA, DMAA and other. Transparent flexible films with excellent mechanical characteristics are formed from solutions of the latter. The tensile strength of FSPU is in the range of 16.1 - 41.2 MPa, the relative elongation at break is 102 - 356 % and their M_w are in the range 52663-59528 g/mol. It should be noted that the strength characteristics of FPUUs are within the limits of the strength of native human blood vessels. It is shown that the properties of FSPUs depend on the isomeric position of the HO group in the composition of FBHp. The revealed regularities indicate the possibility of regulating the physico-chemical characteristics of FSPUs by introducing isomeric perfluorinated aromatic chain extenders into their composition for the purpose of purposeful synthesis of medical polymers with a given set of positive properties.

FSPUs studies *in vivo* showed that the synthesized polymers are biocompatible and thromboresistent materials. FPUUs can be used as long-term polymer implants in medicine (cardiovascular surgery, otolaryngology, stent coating and other polymer medical devices).

СОРБЦІЙНА ТА ФЛОКУЛЯЦІЙНА ЗДАТНІСТЬ СИСТЕМ ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНА РЕЧОВИНА - ПОЛІЕЛЕКТРОЛІТ

Алла Тимчук, Василь Менчук

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова,
вул. Всеволода Змієнка, 2, Одеса, Україна

Tymchuk@onu.edu.ua

Вивченню взаємодії ПАР (поверхнево-активних речовин) та водорозчинних полімерів – поліелектролітів (ПЕ) природного походження присвячено чимало досліджень, що розвиваються у двох напрямках. Згідно з першим, макромолекули розглядають як «сорбенти» без визначеної міжфазної межі, що зв'язують індивідуальні молекули ПАР або міцели, залежно від концентрації в розчині. Згідно з другим напрямом досліджень, у розчині утворюються полімерні комплекси ПАР-ПЕ стехіометричного або нестехіометричного складу. Багато властивостей систем ПАР-ПЕ, у тому числі і здатність комплексів до адсорбції та флокуляції, значною мірою визначаються взаємним впливом молекул ПАР та макромолекул. Системи ПАР-ПЕ завдяки своїм особливостям, мають перспективи використання у процесах підготовки та очистки води, саме тому, вивчення взаємодії ПАР та ПЕ з утворенням поверхнево-активних полімерних комплексів є метою представлених досліджень.

В роботі були використані методи потенціометрії, кондуктометрії та віскозиметрії. Поверхневий натяг розчинів вимірювали методом Вільгельмі, для розрахунку сорбції ПАР у присутності ПЕ використовували рівняння Гіббса. Об'єктами дослідження були іоногенні ПАР з довжиною вуглеводневого радикалу C_{16} - C_{18} . Як поліелектроліти використовували природні полімери – хітозан, альгінат натрію. Системи ПАР-ПЕ готували шляхом додавання змінної кількості ПЕ до розчину ПАР однакової концентрації.

Дослідження показали, що властивості систем ПАР-ПЕ істотно відрізняються від властивостей їх індивідуальних компонентів. Взаємний вплив ПАР та ПЕ в розчині позначається на поверхнево-активних, кислотно-основних, реологічних та гідродинамічних властивостях досліджуваних систем. Поверхневий натяг знижується на 30-40 мН/м. Сорбційна здатність збільшується в 4-6 разів у зрівнянні з поверхнево-активними речовинами. Досліджувані системи більш стабільні, меншою мірою схильні до старіння.

Процес самоорганізації в досліджуваних системах, обумовлений дифільною будовою молекул ПАР та присутністю ПЕ, можна розглядати як результат електростатичної взаємодії полярних груп ПАР з функціональними групами ПЕ та гідрофобної взаємодії вуглеводневих радикалів ПАР між собою. Роль гідрофобної взаємодії зростає в області стехіометричного співвідношення компонентів, коли в системі відбувається утворення внутрішньомолекулярних міцелоподібних структур, в результаті чого подальше згортання макромолекул у клубок призводить до помітного зниження відносної в'язкості досліджуваних систем.

Процеси, що відбуваються в досліджуваних системах, істотно впливають на здатність полімерних комплексів сорбуватися на межі поділу фаз рідина-газ в порівнянні з ПАР та ПЕ. Підвищення сорбційної здатності визначається не тільки складом комплексів, що утворюються, але і їх природою.

Дослідження показали, що процеси флокуляції з використанням полімерних комплексів є більш ефективними. Так, швидкість освітлення суспензій (бентоніту, каоліну) з використанням полімерних комплексів збільшується в середньому в 3-5 разів. Найбільш ефективна їх дія досягається при концентрації високомолекулярних сполук не вище ніж 2,0 мг/л. Різке зниження агрегативної стійкості суспензій відбувається за незначний час – перші декілька секунд.

МЕТАЛОПОЛІМЕРНІ КОМПОЗИТИ НА ОСНОВІ ТРИЕТИЛЕНГЛІКОЛЬДИМЕТАКРИЛАТУ ТА ФЕРИТУ КОБАЛЬТУ

Галина Хованець, Олена Макідо

Відділення ФХГК ІФОХВ ім. Л. М. Литвиненка НАН України, Львів, Україна
e-mail: khovanets_galina@ukr.net

Методом фотоініційованої полімеризації були отримані металополімерні композити на основі полімерної матриці триетиленглікольдиметакрилату (ТГМ-3) та попередньо синтезованих наночастинок фериту кобальту (CoFe_2O_4), які характеризуються вираженими магнітними властивостями. Досліджено вплив структури ПАР, які вводяться для запобігання агломерації наночастинок CoFe_2O_4 та рівномірного їх розподілу в полімерній матриці, та товщини фотокомпозиції на кінетику фотоініційованої полімеризації даних композитних матеріалів у тонких плівках до глибоких конверсій. Крім того, для вибору оптимальних товщини фотокомпозиції і структури ПАР та їхнього впливу на кінетичні параметри процесу, для порівняння були досліджені: 1) чистий ТГМ-3 + IRGACURE 651; 2) ТГМ-3/ CoFe_2O_4 ; 3) ТГМ-3/ CoFe_2O_4 /ПАР. В якості ПАР досліджувалися як синтетичні ПАР (додецилсульфат натрію) так і натуральні ПАР (рамноліпід і рамноліпідний комплекс).

Синтез наночастинок фериту кобальту, що характеризуються магнітними властивостями проводили за допомогою методу співосадження з розчину нітратів Fe(III) та Co(II) (2:1) шляхом додавання гідроксиду амонію (NH_4OH) за присутності ПАР (лимонна кислота ($\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$)). Реакцію проводили при інтенсивному перемішуванні за температури 80°C . Утворення частинок фериту кобальту – пористого матеріалу з розвиненою питомою поверхнею – відбувалося під час прожарювання при температурі 300°C протягом 3 год [1].

Кінетику стаціонарної фотополімеризації систем металополімерних композитів досліджували в тонких плівках, закритих від доступу кисню повітря покривним склом, з використанням лазерного інтерферометра під дією УФ-опромінення лампи ДРТ-400 за постійної інтенсивності 17 Вт/м^2 та кімнатної температури до глибоких конверсій [2].

Для отримання вихідних фотокомпозицій на основі системи ТГМ-3 + IR 651 з додаванням 5 % мас. ПАР і 5 % мас. CoFe_2O_4 , які використовували в подальших дослідженнях кінетики полімеризаційного процесу спочатку готувався розчин фотоініціатора 2,2-диметокси-1,2-дифенілетан-1-он (IRGACURE 651) у мономері (ТГМ-3) (2 % мол. з розрахунку на мономер), який слугував в подальшому для всіх систем в якості полімерної матриці. Додатково зразки обробляли УЗ на протязі 20 хв. для гомогенізації системи.

Результати експерименту зображали у вигляді інтегральних кінетичних кривих «відносна конверсія P – час t (с)» та їхніх диференціальних анаморфоз за різної товщини плівки. Статистичний аналіз отриманих кінетичних експериментальних кривих виконували з використанням програми ORIGIN. Усі інтегральні кінетичні криві незалежно від товщини плівок, що полімеризуються, мають типовий S-подібний вигляд і складаються всього з двох ділянок: автоприскорення і автогальмування. Методом числового диференціювання інтегральних кінетичних кривих визначено максимальну швидкість W_0 полімеризації на стадії автоприскорення та відповідні їй конверсію P_0 і час t_0 її досягнення.

На основі експериментальних даних визначено оптимальну товщину фотокомпозиції та структуру ПАР. Синтезовані полімерні композити, незалежно від складу компонентів, прозорі, міцні, еластичні, однорідні за структурою, окрім системи ТГМ-3 + IR 651 + CoFe_2O_4 + ПАР (рамноліпідний комплекс). Одержані плівки на основі металополімерного композиту характеризуються адсорбційними властивостями та є магнітосепарабельні, що робить їх перспективними у процесах відновлення водних ресурсів.

[1]. Макідо О., Хованець Г., Хавунко О. Синтез каталізаторів на основі магнітних частинок CoFe_2O_4 // Праці НТШ. Хімічні науки, 2021, Т. LXVI, с.с. 90-97.

[2]. Khovanets' G., Makido O., Kochubey V. et al. Thermal stability of organic-inorganic composites based on dimethacrylate-tetraethoxysilane system // Chemistry & Chemical Technology, Vol. 11, No. 2, 2017, p.p. 158-165.

НАНОРОЗМІРНІ ЧАСТИНКИ ЗОЛОТА ТА СРІБЛА В РОСЛИННОМУ ЕКСТРАКТІ ЯК СКЛАДОВА ЛІКАРСЬКОГО ЗАСОБУ «КОАГУЛОКС_N»

О.А. Циганович, С.М. Дибкова, Л.С. Рєзніченко, В.А. Прокопенко, І.В. Затовський

Інститут біологічної хімії імені Ф.Д. Овчаренка НАНУ,
бульвар Академіка Вернадського, 42, Київ, 03142, Україна;
e-mail: elena_tsyganov@ukr.net

Розробка лікарських засобів зовнішнього застосування із комплексною терапевтичною дією, яка включає кровоспинну, антимікробну, протизапальну і регенеруючу дію є актуальним завданням сучасної фармацевтичної хімії.

З метою створення лікарського засобу «Коагулокс_N» досліджено поведінку нанорозмірної системи із наночастинок золота та срібла у рослинному екстракті незрілих плодів волоського горіха, які є перспективними компонентами цього засобу.

Суміш безпечних сферичних наночастинок срібла і золота, отримано за оригінальним протоколом. З метою характеристики цих частинок здійснено дослідження розподілу частинок за розмірами методом динамічного розсіювання світла (DLS) з використанням лазерного кореляційного спектрометра Zetasizer Nano ZS. Показано, що при $\text{pH} \geq 5$ значення ζ -потенціалу зростає від -32 мВ до 37 мВ, що вказує на наявність стабільних, стійких до агрегації AgNP з переважним розміром частинок близько 10 нм (79%), та наявними частинками 80 нм (21%). При $\text{pH} 7$ водного золю AuNP з переважним розміром частинок близько 8 нм (99%) значення ζ -потенціалу складає -37 мВ.

У розчині рослинного екстракту плодів горіха розподіл AgNP за розмірами при тих же значеннях pH корелює з таким для золю срібла у водному дисперсійному середовищі, а саме в ній наявні частинки срібла розміром 17.5 та 75 . Наночастинки золота розміром близько 10 нм фіксуються і у рослинному екстракті, а також наявні агрегати 4.6 мкм ($\sim 2\%$). Значення ζ -потенціалу систем золота та срібла в рослинному екстракті складає близько -30 мВ, що вказує на стійкість таких систем і відсутність схильності до коагуляції та взаємодії з органічними компонентами екстракту, а значить - зберігання своїх унікальних терапевтичних властивостей в композиційному матеріалі.

Дані DLS корелюють з результатами УФ-спектроскопії. Аналіз максимумів в смугах поглинання вказує на утворення нанорозмірних систем і на співіснування у водній дисперсії та екстракті плодів горіха волоського Ag та Au NP. Максимум поглинання для водної дисперсії AgNP при 424 нм вказує на наявність частинок розміром $20-50$ нм, а λ_{max} для AuNP 528 нм - на частинки розміром $15-40$ нм. У водній дисперсії і екстракті у присутності AgAuNP обидва максимуми зберігаються, що корелює з розподілом частинок за розмірами, встановленими методом DLS.

Отже, результати представлених досліджень вказують на стійкість одержаних водних золів у рослинному екстракті незрілих плодів волоського горіха та на відсутність взаємодії наночастинок золота і срібла із органічними компонентами екстракту, що вказує на збереження властивостей наночастинок у дослідженому композиті.

Автори вдячні за фінансову підтримку Національному Фонду Досліджень України, проект № 2023.04/0041 «Розробка інноваційного лікарського засобу «Коагулокс_N» з антимікробними, кровоспинними та ранозагоювальними властивостями» за договором 163/0041.

ВИЗНАЧЕННЯ КОНСТАНТ КОПОЛІМЕРИЗАЦІЇ АЛІЛ- β -ДИКЕТОНІВ ЗІ СТИРОЛОМ МЕТОДОМ ФАЙНМАНА-РОССА

Ольга Шевченко

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, Одеса, Україна
e-mail: ovchev@ukr.net

Полімерні β -дикетони (βd) є зручними об'єктами для подальшого їх зв'язування з йонами різних металів, що приводить до іммобілізації β -дикетонатних металокомплексів на полімерній матриці. Такі процеси мають місце при створенні адгезивних покриттів металевих поверхонь, гетерогенних каталізаторів хімічних реакцій, люмінесцентних матеріалів тощо. Полімерний стан ліганда суттєво відбивається на його реакції з йонами металів і має певні відмінності від взаємодії у незв'язаному стані. Гомополімерні βd , що містять у кожній ланці хелатуючу групу мають обмежене застосування. Більш вживаними для вищезазначеного призначення є кополімери βd з традиційними вініловими мономерами. Контроль за вмістом βd груп можна здійснювати на стадії синтезу таких полімерних лігандів, на підставі значень констант кополімеризації. У подальшому це забезпечить можливість керування щільністю розташування металохелатних груп, їх кількістю та будовою координаційного вузла.

Метою роботи було визначення констант кополімеризації стиролу (St) з ненасиченими β -дикетонами, що містять алільну групу в α - або γ -положенні дикетонного фрагменту: 7-октен-2,4-діон (ОД), 1-феніл-6-гептен-1,3-діон (ФГД), 3-алілпентан-1,3-діон (АПД), 2-аліл-1-фенілбутан-1,3-діон (АФБД). Реакцію проводили в радикальних умовах при $t=80^\circ C$, ініціатор – пероксид бензоїлу з концентрацією 0,01 моль/л. Продукти виділяли при конверсії 10%. Об'ємне співвідношення $\beta d:St$ складало 1:1, 1:2, 1:5, 1:10. З них вираховували мольну частку βd в комономерній сумішці (F_1).

Визначення констант кополімеризації ($r_{\beta d}$, r_{St}) проводилося за методом Файнмана-Росса. Мольну частку βd в кополімерах (f_1) визначали методом ІЧ-спектроскопії за співвідношенням інтенсивностей смуг поглинання $1240 (\nu_s (C-C=C-O) + \nu (C=O) + \delta(OH))$ та $760 (\gamma Ph-H)$. Із графічних залежностей $y=r_{St}-r_{\beta d}x$, де $y=(f_1(1-2F_1))/((1-f_1)F_1)$; $x=(f_1/(1-f_1))^2 \cdot ((1-F_1)/F_1)$ було визначено значення констант кополімеризації стиролу (r_{St}) та відповідного β -дикетону ($r_{\beta d}$), на підставі яких розраховані Q , e параметри βd -мономерів. Результати представлені в таблиці.

Таблиця. Константи кополімеризації та Q , e -параметри аліл- β -дикетонів при їх кополімеризації зі стиролом. $T=80^\circ C$.

βd	$r_{\beta d}$	r_{St}	Q	e
ОД	0,21 \pm 0,02	2,06 \pm 0,20	0,23	0,12
АПД	0,08 \pm 0,04	2,40 \pm 0,10	0,15	0,48
ФГД	0,63 \pm 0,05	1,39 \pm 0,10	0,54	- 0,44
АФБД	0,31 \pm 0,03	1,42 \pm 0,13	0,35	0,09

Як можна бачити з представлених даних, аліл- β -дикетони є менш активними мономерами за стирол, що приводить до збіднення кополімеру β -дикетонними ланками і пояснюється їх участю в реакції алільного обриву. Як положення самого алільного замісника (α - чи γ -), так і наявність груп $-Ph$ або $-Me$ впливають на їх активність як комономерів. Найбільш активними комономерами є βd , що містять алільну групу в α - положенні. Це співвідноситься із загальновідомою тезою про те, що замісники в α -положенні вносять більший внесок в квазіароматичний цикл βd порівняно із замісниками в γ -положенні. Фенільний замісник, кон'югований із β -дикетоним циклом суттєво збільшує як активність подвійного зв'язку ($Q=0,54$), так і утвореного з нього радикалу. Розташування алільного замісника в γ -положенні зменшує вплив $-Ph$ групи, за рівнем кон'югації він є другим ($Q=0,35$). βd з $-Me$ –групою мають значно менший ступінь кон'югації з алільним замісником, тут так само за цим показником α -заміщений βd превалює над γ -заміщеним.

Секція 6.
ХІМІЧНІ АСПЕКТИ ЕКОЛОГІЇ

МОНІТОРИНГ КОНЦЕНТРАЦІЙ ЗАБРУДНЮВАЧІВ У АТМОСФЕРНОМУ ПОВІТРІ м. СУМИ

Анастасія Вініченко, Людмила Пономарьова
Сумський державний університет, м. Суми, Україна
e-mail: nastya.vinichenko92@gmail.com

За останні десять років концентрація речовин-забруднювачів у повітрі значно збільшилась. Це стало важливою проблемою не просто у масштабах однієї країни, а і величезною загрозою для всього живого, що живе на нашій планеті.

Моніторинг атмосферного повітря в Україні було впроваджено на законодавчих рівнях ще 1991 року. Спочатку був запроваджений Закон України «Про охорону навколишнього середовища», згідно якого створена система, що проводить моніторингові спостереження для оцінки стану навколишнього середовища [1]. Також була затверджена постанова Кабінету Міністрів України від 09.03.1999 №343 «Про затвердження організації та проведення моніторингу в галузі охорони атмосферного повітря», дана постанова і регламентує моніторингову систему для атмосферного повітря і вказаний перелік речовин-забруднювачів для атмосферного повітря та інгредієнти атмосферних опадів, їх допустимі концентрації. У місті Суми дані моніторингові дослідження проводяться лабораторією спостереження за забрудненнями повітря, що є одним із підрозділів Сумського обласного центру з гідрометеорології. Проби для дослідження збираються у 3-х різних точках міста та чотири рази на добу. Аналіз проводиться для таких домішок як: пил, сульфур(IV) оксид, вуглекислий газ, нітроген(IV) оксид, нітроген(II) оксид, розчинні сульфати, амоніак, формальдегід та важкі метали. Процес підготовки та аналізу виконується згідно стандарту РД 52.04.186-89 «Керівництвом з контролю забруднення атмосфери» [2].

У 2024 році було проведення моніторингове дослідження у співробітництві з лабораторією дослідження за забрудненням повітря та були визначені середньорічні концентрації за 2023 рік таких забруднюючих речовин, як пил, сульфур(IV) оксид, вуглекислий газ, нітроген(IV) оксид, нітроген(II) оксид, амоніак та формальдегід, ці результати узагальнені на рисунку 1.

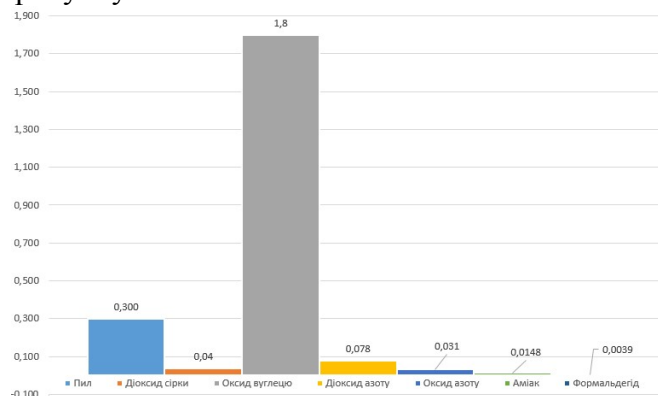


Рис. 1. Діаграма середньорічних концентрацій домішок за 2023 р

Згідно з узагальненими у вигляді діаграми, можна прийти до висновку, що концентрації які є в межах норми мають речовини: сульфур(IV) оксид, вуглекислий газ, нітроген(II) оксид, амоніак. Речовини концентрації яких є вищі гранично допустимих – це пил, нітроген(IV) оксид та формальдегід.

Список джерел:

1. Про охорону навколишнього природного середовища : Закон України від 25.06.1991 р. № 1264-XII : станом на 8 жовт. 2023 р. URL: <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/1264-12#Text>.

Про затвердження Положення про державну систему моніторингу довкілля : Постанова Каб. Міністрів України від 30.03.1998 р. № 391 : станом на 21 черв. 2023 р. URL: <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/391-98-п#Text>.

**БІОСЕНСОРНИЙ БІОЛЮМІНЕСЦЕНТНИЙ АНАЛІЗ В ОЦІНЦІ
ЕКОТОКСИЧНОСТІ ҐРУНТІВ СІЛЬСЬКОГОСПОДАРСЬКОГО ПРИЗНАЧЕННЯ**
*Тамара Грузіна¹, Людмила Резніченко¹, Олена Нікіпелова², Катерина Губіна^{3,4}, Зоя Ульберг¹,
Світлана Дибкова¹*

¹Інститут біоколоїдної хімії імені Ф.Д. Овчаренка НАН України, Київ, Україна

²Інженерно-технологічний інститут «Біотехніка» НААН України, Одеса, Україна

³Лабораторія «Агротест», Київ, Україна

⁴Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, Україна

e-mail: guzinatamara@gmail.com

В останні роки зростає інтерес до аналізу ґрунтів сільськогосподарського призначення з точки зору оцінки якості навколишнього середовища, тобто інтерес до екологічного аналізу. Агрохімічний аналіз дає якісну та кількісну оцінку ґрунтів у системі «ґрунт-рослина-добриво» у відповідності до державних стандартів та нормативних документів. За результатами цього аналізу формується відповідний агрохімічний паспорт ґрунту. Екологічний аналіз ґрунту є завданням більш складним і недостатньо вивченим на сьогодні, оскільки надзвичайно складним є завдання кількісної оцінки екологічно-небезпечної складової забруднювачів.

Результати агрохімічного аналізу, які доповнені результатами екологічного аналізу, дозволяють сформуванню, в цілому, еколого-агрохімічний аналіз, який спрямований, з одного боку, на екологічний моніторинг, а з іншого – на безпосередньо сільськогосподарське виробництво. Екологічна складова еколого-агрохімічного аналізу включає, насамперед: оцінку потенційної небезпечності мікро- та макроелементів, нормування вмісту важких металів та органічних сполук як забруднювачів, тощо. Ці показники значною мірою і обумовлюють рівень загальної екотоксичності ґрунту.

Адекватне якісне та кількісне визначення параметрів екотоксичності в ґрунтах не можливе без використання біологічних методів аналізу, де особливе місце займає біосенсорний аналіз. Серед усього різноманіття існуючих біосенсорних аналітичних систем особлива увага у практиці екологічного моніторингу ґрунтів надається біолоюмінесцентним аналізаторам на основі живих бактеріальних клітин. Підхід базується на реєстрації змін в інтенсивностях біолоюмінесценції бактеріальних клітин під впливом токсикантів, присутніх у пробах ґрунту, порівняно з контрольною пробою (як правило це еталонний ґрунт). Параметр екотоксичності (E), що визначається біолоюмінесцентним методом, відображає рівень загальної забрудненості ґрунту. Цей параметр виражається як відношення інтенсивності біолоюмінесценції бактерій при контакті з пробою ґрунту (I_n) до такої ж при контакті з контрольною (еталонною) пробою (I_k). Маючи різні значення величин екотоксичності прогнозується рівень інтегральної забрудненості ґрунту.

ІБКХ імені Ф.Д. Овчаренка НАН України спільно з Інженерно-технологічним інститутом «Біотехніка» НААН України та Лабораторією «Агротест» проведено апробацію методичних підходів біолоюмінесцентного аналізу на зразках ґрунту з різних регіонів України (Одеська, Київська, Вінницька, Кіровоградська, Львівська області), що зазнали техногенного навантаження, та порівняльний аналіз отриманих результатів біосенсорного аналізу з результатами агрохімічного аналізу зразків ґрунту, проведеного згідно нормативних документів і стандартів України.

В результаті проведеної апробації можна зробити наступні висновки:

- (1) біолоюмінесцентний аналіз через визначення параметру екотоксичності може бути суттєвим доповненням, як елемент екологічної складової, в еколого-агрохімічному аналізі ґрунту та слугувати експресним методом в оцінці потенційних ризиків у сільськогосподарському виробництві;
- (2) рівень екотоксичності, визначений біолоюмінесцентним методом, дає можливість прогнозувати стан та потенційну біологічну активність ґрунту.

**POLYTYPE DIVERSITY OF THE HYDROTALCITE-LIKE
Mg,Fe-LAYERED DOUBLE HYDROXIDE MATERIALS:
SYNTHESIS, STRUCTURE AND ADSORPTION ACTIVITY TOWARD IBUPROFEN**

Tetiana Hubetska, Victor Demchenko, Natalia Kobylinska

A.V. Dumansky Institute of Colloid and Water Chemistry,
National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine,
e-mail: kobilinskaya@univ.kiev.ua

Layred structures of the hydrotalcite-supergruop materials consist of positively charged brucite layers with octahedral sites occupied by M^{2+} and M^{3+} cations, which usually were found in two polytypic modifications: 3R and 2H. In layered materials, the layer-stacking sequence allows the tuning of ion transport and sorption properties by modulating the host-ion interactions. However, unlike in the case of cations, the relation between the stacking sequence and anion sorption properties is less clearly understood.

The present study is concerned the synthesis of synthetic pyroaurite clays with general formula $[Mg^{2+}_{(1-x)}Fe^{3+}_x(OH)_2][CO_3^{2-}_{x/2} \cdot mH_2O]$ (where $x = Fe^{3+}/(Mg^{2+} + Fe^{3+})$, $0,15 < x < 0,33$). These materials are prepared by co-precipitation method and systematically characterized by several techniques (e.g. XRD, VRM, SEM, FTIR, TEM, etc.). The obtained sorbents were applied for pharmaceuticals removal using ibuprofen as model in anionic form (*Fig. 1*).

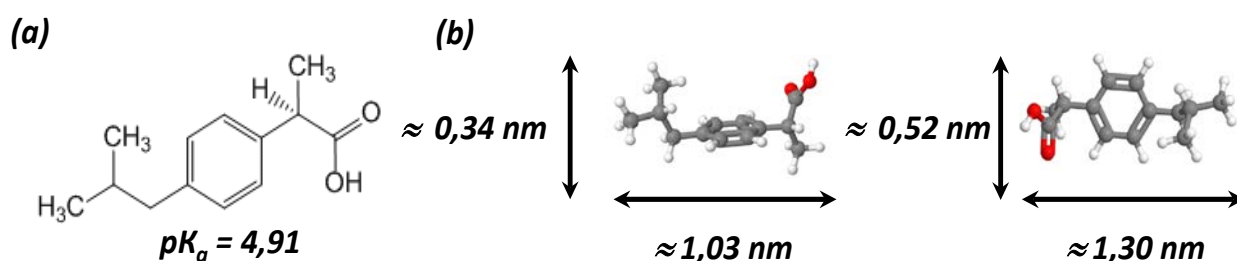


Fig. 1. Chemical structure (a) and model (b) of the ibuprofen molecule.

The XRD patterns confirms formation of pyroaurite-like structure of crystalline phases in the composition range, $0,15 < x < 0,35$. Product with $x < 0,14$ and $x > 0,45$ contained brucite or other compounds as an impurity phases. The plate-like morphology of materials is evident by TEM. EDX and AAS analysis showed that the Mg:Fe ratios of the precipitates were equal to those of the starting reaction mixtures. Thus, neither Mg nor Fe precipitated preferentially. The parameter, a , was $3,1120 \text{ \AA}$ at $x = 0,33$ and increased to $3,1183 \text{ \AA}$ at $x = 0,20$ with decrease in the amount of Fe. The ionic radii are $0,720 \text{ \AA}$ for Mg^{2+} and $0,645 \text{ \AA}$ for low spin Fe^{3+} . Thus, the substitution of Mg^{2+} with smaller Fe^{3+} decreased the a parameter. The gallery height ($7,7707\text{-}7,8373 \text{ \AA}$ and $7,7550\text{-}7,88550 \text{ \AA}$ determined by 3R and 2H, respectively) of sorbents is in all cases lower than the size of the ibuprofen (*Fig. 1b*) depending on the synthesis route followed and space group of sorbents. Experimental data suggest the analyte molecules in better case form a very thin lying monolayer, with the carboxylate groups pointing towards the brucite-like layers without stretching interlayer distance according to XRD data. When the samples were immersed into the ibuprofen solution, a part of the Mg^{2+} ions into the solution (dissolve of hydrotalcite layers).

Acknowledgements

The authors thank of the MINECO (Spain) for MCI-21-PID2020-113558RB-C41 and PID2020-119130 GB-I00 grants. Authors are grateful to Raquel Díaz for providing excellent technical assistance. The Armed Forces of Ukraine for the opportunity to continue scientific research during Russian military aggression against Ukraine.

THE LATEST TECHNOLOGIES OF POLYOLEFIN WASTE PROCESSING

Anatoliy Ranskiy¹, Bohdan Korinenko², Roksolana Korinenko¹, Olha Sandul¹

¹Vinnitsia National Technical University, Vinnitsia, Ukraine

²V. P. Kukhar Institute of Bioorganic Chemistry and Petrochemistry of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine

e-mail: naydichroksolana2017@gmail.com

Despite the fact that plastic waste occupies a small amount of the total amount of solid household waste (12 %), it poses a great threat to the environment, polluting water objects, land and air. Household plastics include PET, PE, PP, PS, PVC, but polyolefins (PE, PP) account for the largest number of them due to their versatility and one-time use in everyday life [1]. In order to increase the commercialization of plastic processing, extensive research is currently performed on its pyrolysis processing in order to obtain alternative sources of energy. Thus, recently we [2], [3] investigated the pyrolytic processing of polyolefins (HDPE, LDPE, PP) using low-temperature pyrolysis (250–412 °C, 3.5 hours) with obtaining the following thermal processing products. In the case of HDPE and LDPE was obtained 85,57 % wt. pyrolysis liquid, 5.57 % wt. gas mixture and 3.83 % wt. of pyrocarbon, and in the case of PP – 78.49 % wt. of pyrolysis liquid, 13.56 % wt. gas mixture and 5.08 % wt. pyrocarbon. The use of a natural bischofite catalyst (MgCl₂·6H₂O) during the thermolysis of a mixture (HDPE 50 % + LDPE 50 %) in the temperature range of 290–400 °C for 2.5 hours made it possible to obtain 72.60 % wt. of pyrolysis liquid, 14.60 % wt. gas mixture and 4.24 % wt. pyrocarbon. That is, the use of the catalyst made it possible to reduce the time of thermal destruction of the PE mixture by 1.4 times, increase the yield of the gas mixture by 2.6 times, and reduce the yield of pyrolysis liquid by 1.17 times. The formation of pyrocarbon changed insignificantly, within the error of performing the experiment. Previously, we [4] on a pilot plant investigated the pyrolytic processing of polyolefins (line 1 with the production of alkanes and alkenes C₆–C₁₃) and food waste (line 2 with the production of hydrogen H₂) with the aim of further catalytic hydrogenation of the alkene component (hydrogenation unit 3) and obtaining high-quality gasoline for internal combustion engines. However, the purification of hydrogen from H₂S using monoethanolamine (MEA) or more technological methyldiethanolamine (MDEA) was not effective enough and led to the passivation of the catalyst [5].

Recently, extensive research has been performed on hydrogenolysis – a new method of pyrolytic processing of polyolefins using transition metals (Ru, Pt, Ni, Co, Zr, Ta, Rh) and hydrogen under pressure as selective catalysts [6]. As a result of such processing, not only C–C bonds of the polymer chain are split, but also intermediate alkenes are reduced to alkanes with the formation of high-quality motor fuels (C₂₁–C₄₅) [7]. The mentioned organometallic catalytic systems are expensive and quite complex, but it should be noted that Ukraine has a sufficient amount of both zirconium (ZrO₂) and its waste, which indicates the high scientific and practical potential of such research.

[1] P. A. Kots, B. C. Vance, D. G. Vlachos, *React. Chem. Eng.* 2022, 7(1), 41 – 54. <https://doi.org/10.1039/D1RE00447F>.

[2] A. P. Ranskiy, B. V. Korinenko, *Visnyk VPI* 2023, 2, 6 – 14. <https://doi.org/10.31649/1997-9266-2023-167-2-6-14>.

[3] B. V. Korinenko, V. O. Yevdokymenko, A. P. Ranskiy, O. A. Gordienko, R. V. Korinenko, *Visnyk VPI* 2024, 2, 25 – 32. <https://doi.org/10.31649/1997-9266-2024-173-2-25-32>.

[4] V. A. Bortyshevsky, I. M. Bugovsky, D. V. Hladkovsky, S. M. Kylymystyi, A. P. Ranskiy, “The method of processing organic household waste by pyrolysis” Patents 85826 UA, IPC C10G 1/02, F23G 5/027. № u 2013 11942, 25.11.2013.

[5] Kohl A. L., Nielsen R. B.: Gas purification. Gulf Publishing Company, Houston, 1997.

[6] A. Musa, E. Jaseer, S. Barman, N. Garcia, *Energy Fuels* 2024, 38(3), 1676 – 1691. <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.3c04109>.

[7] S. D. Jaydev, A. J. Martín, J. Pérez-Ramírez, *ChemSusChem* 2021, 14(23), 5179 – 5185. <https://doi.org/10.1002/cssc.202101999>.

DEVELOPMENT OF GREEN PROTOCOLS FOR THE SYNTHESIS OF PLASMONIC NANOPARTICLES

R. Mariychuk¹, R. Smolkova¹, A. Eliasova¹, L.M. Grishchenko², and V.V. Lisnyak²

¹University of Presov, Presov, Slovakia

²Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, Ukraine

e-mail: ruslan.mariychuk@unipo.sk

The fascinating progress in the development and utilization of nanomaterials in various areas has been noticed in the last decades. Unique physical and chemical properties of nanoparticles (NPs) make them prospective for applications in many fields, such as optics, electronics, catalysis, food science, agriculture, pharmacy, and medicine. Such interest has initiated the interest in the development of new efficient synthesis methods. Modern chemistry can offer various efficient wet chemistry protocols for the synthesis of NPs using different reducing and capping agents, including biochemicals, i.e., chemical compounds from natural sources (plants, microorganisms, or fungi). These methods are known as “green methods” due to the use of renewable natural reagents, their simplicity, cost-effectiveness, and energy efficiency. When we think about biomedical applications, we assume that NPs will not be toxic. The use of phytochemicals of the plants, known as medicinal, also can contribute to efficient application.

The special feature of NPs is the ability to absorb radiation in visible and near infrared (NIR) regions due to surface plasmon resonance (SPR), which has generated many applications, including biomedicine and biosensing. SPR absorbance of NPs depends on several factors: material, size, shape, and environment. For example, if the regular (spherical) gold NPs (AuNPs) in aqueous nanocolloid solutions absorb the radiation in the visible range (520–540 nm), the irregularly shaped AuNPs, such as nanotriangles, nanorods, nanostars, etc., absorb NIR radiation (>700 nm). This makes AuNPs prospective for use as photothermal and drug delivery agents.

Therefore, this report is dedicated to a review of available publications and our own experiments in the synthesis of irregularly shaped AuNPs with responses in the NIR range using whole extracts of selected plants and some isolated phytochemicals. For example, leaf extracts of peppermint (DOI: 10.1007/s13204-021-01740-8), goldenrod (DOI: 10.1007/s13204-020-01406-x), juniper (DOI: 10.1080/15421406.2022.2073528), lemon balm, as well as fruit extracts of elderberry (DOI: 10.1007/s13204-020-01324-y) and clove (DOI: 10.1007/s13204-021-01726-6).

The characterization of AuNP nanocolloid solutions is usually carried out through UV-Vis spectroscopy using a Shimadzu UV-1800 spectrophotometer (Japan). The morphology analysis of AuNPs was conducted via transmission electron microscopy (TEM) using a JEOL JEM-2100F instrument. The photothermal effects of nanocolloid solutions were studied using infrared lasers provided by Laserland and Jolooyo, China, with λ_{ex} of 808 and 850 nm with powers of 500 and 1000 mW, respectively, and the temperature changes were measured using an infrared thermometer (MLX90614, Melexis, Belgium). The stability of the nanocolloid solutions was followed by three heating-cooling cycles.

On several examples, we will show how the size and shape, which means control over optical properties, of AuNPs can be tuned by the selection of phytochemicals and synthesis conditions. Obtained AuNPs solutions exhibited reliable photothermal responses when exposed to lasers at 808, and 850 nm. AuNPs represent a promising option for bioimaging or hyperthermic applications due to their advantageous optical properties and potential for biocompatibility.

Acknowledgements: This study is supported by the Slovak Research and Development Agency under the project APVV SK-PL-23-0032: “Microbial response to phytosynthesized metal nanoparticles”.

НАУКОВО-ОБГРУНТОВАНИЙ ПІДХІД ДО ВИБОРУ МЕТОДУ ОЧИСТКИ ВОДИ ВІД АНТИСЕПТИКІВ НА ОСНОВІ КАТІОННИХ ПАР

Олена Стрельцова, Ольга Волювач

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

e-mail: elen_streltsova@onu.edu.ua

Виробництво протимікробних (антисептичних) лікарських засобів на основі катіонних поверхнево-активних речовин (наприклад, четвертинні амонієві солі, солі алкілпіридинію) неминуче призводить до їх появи у поверхневих водах. Знання деяких аспектів екології та науково-обгрунтовані підходи до вибору фізико-хімічного методу предочищення багатокомпонентних за складом фармстоків, що містять поверхнево-активні речовини (ПАР), дозволять попередити негативні наслідки виробництва антисептиків, оскільки з причини значного піноутворення ПАР (і як наслідок порушення кисневого режиму), низької здатності до біорозкладання та солюбілізації високотоксичних іонів важких металів й ін. небезпечних органічних речовин збільшується антропогенне навантаження на екосистему.

На сучасному фармацевтичному ринку України доступними і вживаними є: таблетовані форми декаметоксину (таблетки “Септефрил”), водні розчини N-хлориду *цетилпіридинію*, мірамістину (0,1 мг/мл, для з/застос.), декаметоксину (“Горостен“, “Декасан“, 0,2 мг/мл, для з/застос.; рН 1,0% розчину від 5,5 до 7,5; критична концентрація міцелоутворення декаметоксину – $(1,0 \pm 0,2) \cdot 10^{-2}$ М), крем Бетаметазон-Дарниця (діючі речовини: активний кортикостероїд бетаметазону валерат у комбінації з антисептиком хлоридом цетилпіридинію (ХЦП); ХЦП чинить бактеріостатичну та фунгістатичну дію, внаслідок чого препарат запобігає розвитку вторинної інфекції); різні пасти, в тому числі для пломбуванні зубів на основі біс-четвертинних амонієвих сполучень, похідних етилендіаміну мазі (наприклад, Етоній мазь 1%; мірамістин-Дарниця мазь 5 мг/г). В основі дії катіонних поверхнево-активних антисептиків лежить пряма гідрофобна взаємодія ПАР з ліпідами мікроорганізмів, що призводить до їх фрагментації та руйнуванню.

Проаналізовано на основі псевдофазної моделі розподілення ПАР в рамках теорії Рубіна-Розена утворення змішаних асоціатів з синергетичними поверхнево-активними і міцелоутворюючими властивостями за присутності у водних розчинах катіонних поверхнево-активних антисептиків полімерів: полівінілового спирту, поліетиленгліколю та натрієвої солі карбоксиметилцелюлози. Науковий підхід дозволив обгрунтувати, що з метою зменшення кількості реагентів та скорочення тривалості процесу, як реагент в процесі ПАР-вмісних розчинів рекомендовано використовувати екологічно безпечну для людини і навколишнього середовища натрієву сіль карбоксиметилцелюлози в кількості 0,05-0,1 мг на 1 мг ПАР, що вилучається, а флотацію проводити при рН 8-10. Розроблений спосіб відрізняється не тільки дешевизною використаного реагенту-осаджувача Na-КМЦ, технічною простотою, але й високою ефективністю очистки (99%), що сприяє охороні навколишнього середовища.

Не виключена можливість ефективного проведення осаджувальної флотації за сумісної присутності у фармстоках антисептичних лікарських засобів на основі четвертинних амонієвих солей або солей алкілпіридинію і натрію докузату $C_{20}H_{37}NaO_7S$ (критична концентрація міцелоутворення – 0,11% водного розчину при 25 °С; рН 5,8-6,9 1% водного розчину) або його солей, які широко використовуються у фармацевтичних препаратах (капсулах і таблетках) як аніонні ПАР у концентраціях 0,01-1,0%, для покращення їх змочування й розчинення - у концентраціях 0,5%. Пропоновані оптимальні умови проведення осаджувальної флотації, а саме: рН 4-8, еквімолярне співвідношення речовин, надлишок в системі електролітів або 10-кратний надлишок аніонної ПАР за обробки технологічних ПАР-вмісних розчинів 10-15 хв, що супроводжується зменшенням переходу сублату в пінний продукт і підвищенням ступеня очистки води від катіонних ПАР, застосованих у складі антисептиків, з 62-78% до 83-97% відповідно.

ОГЛЯД МЕТОДІВ ОЧИЩЕННЯ ПРОМИСЛОВИХ СТІЧНИХ ВОД

Вадим Федін¹, Інна Трус¹

¹Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського", Київ, Україна
e-mail: vadimfedin00@gmail.com

Проблема очищення промислових стічних вод є актуальною через значне забруднення водних ресурсів різноманітними токсичними речовинами, що викидаються промисловими підприємствами. Забруднення води хімічними речовинами викликає занепокоєння та є пріоритетом як для суспільства, так і для органів державної влади, але, що важливіше, для всього індустріального світу [1]. Тому розробка та впровадження ефективних методів очищення стічних вод є актуальним та пріоритетним завданням для багатьох галузей промисловості. Основними фізико-хімічними методами очищення стічних вод є: реагентні (коагуляція), флотація, сорбція, іонний обмін, а також екстракція та кристалізація.

Якщо розглядати хімічний процес осадження, у якому небажані розчинні іони металів і певні аніони видаляються з води або стічних вод шляхом перетворення в нерозчинну форму, то можна сказати що це широко використовується техніка обробки для видалення різноманітних поллютантів з води. Процедура передбачає зміну іонної рівноваги з утворенням нерозчинних осадів, які можна легко видалити седиментацією [2]. Процес коагуляції є важливим методом очищення промислових стічних вод, як коагулянти в цьому процесі використовуються сульфат алюмінію, хлорид магнію ($MgCl_2$), поліалюміній хлорид та оксиди гідроксиду алюмінію [3].

Флотація також в наш час знайшла широке застосування, зокрема, для очищення промислових стічних вод [4]. Поверхнево-активні речовини, як правило, виділяються з продукту і можуть бути перероблені, а також отримують очищену воду [5]. Поєднання коагуляції та флотації дозволяє підвищити ефективність очищення води.

Останнім часом для очищення води використовують адсорбцію через її високу ефективність та низьку експлуатаційну вартість [6]. Адсорбція зазвичай вважається економічно вигідним та надійним методом очищення стічних вод [7, 8]. Ефективність видалення адсорбції може досягати 99,9%. Агентство з охорони навколишнього середовища Сполучених Штатів Америки (USEPA) оголосило процес адсорбції одним із найдосконаліших та найкращих методів очищення стічних вод, серед інших методів [9].

Отже, як висновок можна сказати, що дані методи очищення промислових стічних вод від важких металів та токсичних речовин відіграють ключову роль у забезпеченні екологічної безпеки та стійкого розвитку промислових підприємств. Оптимізація існуючих технологій та впровадження інноваційних підходів є необхідними кроками для зменшення впливу промислових забруднень на навколишнє середовище. У майбутньому важливим напрямом розвитку є створення високоефективних та екологічно безпечних методів очищення, які враховуватимуть специфіку різних галузей промисловості та вимоги сучасного екологічного законодавства.

Список використаної літератури

1. Sonune A. <https://doi.org/10.1016/j.desal.2004.06.113>
2. Wang L. K. https://doi.org/10.1007/978-3-030-61002-9_6
3. Renault F. <https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2008.12.027>
4. Sebba, F. (1962) Ion Flotation, Elsevier, Amsterdam.
5. Deliyanni E. A. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2016.11.069>
6. Foroutan R. <https://doi.org/10.1007/s11356-018-04108-8>
7. Liu Q. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2019.125043>
8. Manchisi J. <https://doi.org/10.3390/su12052118>
9. Anil I. <https://doi.org/10.3390/nano10010131>

ІНДИКАТОРНІ ХЕМОСОРБЕНТИ ДІОКСИДУ СІРКИ АБО І АМІАКУ

Руслан Хома, Тетяна Беньковська, Олена Ватраль, Сергій Водзінський
Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, Одеса, Україна
e-mail: rek@onu.edu.ua

Для створення теоретичного підґрунтя розробки індикаторних імпрегнованих волокнистих хемосорбентів (ІВХС-І) кислих або основних газів (наприклад, SO_2 та NH_3 , відповідно) нами досліджена поведінка, в тому числі колориметрична, кислотно-основних індикаторів у водних розчинах та на поверхні ІВХС-І при взаємодії з SO_2 або NH_3 [1-4]. Виявлені закономірності в кольориметричній поведінці ІВХС-І при хемосорбції діоксиду сірки або аміаку дозволили нам судити про механізм зміни забарвлення ІВХС-І під час вказаного процесу.

Здійснено рН- спектрофото- та кольориметричне дослідження впливу хлороводневої, хлорної, сірчаної та сірчистої кислот на протолітичні рівноваги в системах амін (КОН) – тропеолін ООО – вода (Am – етаноламіни, морфолін) при $C_{\text{TrOOO}} = 1,12 \cdot 10^{-4}$ М, $C_{\text{Am(КОН)}} = 0,1$ М, $T = 293$ К. Відмічена прямолінійна залежність між значеннями рН розчинів та повної колірної відмінності (ΔE_{76}). Суттєва відмінність спектрофотометричної та кольориметричної поведінки системи SO_2 – MEA – TrOOO – H_2O від систем із HCl, HClO_4 та H_2SO_4 зумовлена окисно-відновною взаємодією сірко(IV)оксианіонів із азоіндикатором. Встановлено взаємозв'язок кольориметричних функцій (повної колірної відмінності та питомої колірної відмінності) систем SO_2 – Am – TrOOO – H_2O із молярною рефракцією Am, емпіричною функцією $pK_a - \lg P_{\text{ow}}$, що об'єднує основність та гідрофільність Am, константами утворення аммонієвих сульфатів та гідросульфатів, характеристиками рН-, редокс і кондуктометричних кривих титрування водних розчинів Am газоподібним оксидом сірки (IV).

Розроблені ІВХС-І кислих газів, одержані шляхом просочування волокнистих носіїв водними розчинами N-вмісних органічних основ (моноетаноламіном (MEA), гексаметилентетраміном (НМТА), поліетиленполіаміном (PEPA) тощо), а також цитратами натрію, моноетаноламонію та поліетиленполіамонію, які додатково містять один із кислотно-основних індикаторів (Ind). Встановлено, що забарвлення більшості вихідних зразків ІВХС-І кислих газів відмінне від забарвлення класичних бренстедівських основ і суттєво залежить не лише від будови Ind, а й від природи реагентів, що входять до їх складу. Зміна забарвлення досліджених ІВХС-І на основі цитратних солей під час хемосорбції SO_2 зумовлена бренстедівськими взаємодіями. Цитрат-іони виступають як інгібітори окисно-відновної взаємодії S(IV) оксианіонів з азоіндикаторами. Встановлені кореляції дозволяють прогнозувати кольориметричну поведінку хемосорбентів (на основі амінів, цитратних солей та буферних сумішей) діоксиду сірки з пасивною індикацією моменту “спрацьовування” поглинальної ємності.

Встановлені закономірності планується використовувати в подальшому при розробці хемосорбентів кислих або/і основних газів з активною індикацією “спрацьовування”.

Список літератури

1. Хома Р.Є., Еннан А.А.-А., Беньковська Т.С., Бугова Є.Ю., Осадчий Л.Т., Менчук К.В. *Вісник ОНУ. Хімія*. 2021. Т. 26, № 4. DOI: 10.18524/2304-0947.2021.4(80).248292
2. Khoma R.E., Ennan A.A.-A., Bienkovska T.S., Dlubovskii R.M., Vodzinskii S.V., Mukhailova T.V. *Укр. хім. журн.* 2022. Т. 87, № 1. С.35-48. DOI: 10.33609/2708-129X.88.01.2022.35-48
3. Хома Р.Є., Беньковська Т.С., Бугова Є.Ю., Осадчий Л.Т., Водзінський С.В., Топоров С.В. *Вісник ОНУ. Хімія*. 2022. Т. 27, № 3. С. 43-52. DOI: 10.18524/2304-0947.2022.3(83).268625
4. Bienkovska T., Khoma R., Vatrал O., Dlubovskii R.M., Vodzinskii S.V., Menchuk V.V. *Ukr. Chem. J.* 2022. Vol. 88, N12. P. 175-188. DOI: 10.33609/2708-129X.88.12.2022.175-188

ЦИТРАТИ НАТРІЮ, МОНОЕТАНОЛАМОНІЮ ТА ПОЛІЕТИЛЕНПОЛІАМОНІЮ ЯК ХЕМОСОРБЕНТИ ДІОКСИДУ СІРКИ

*Тетяна Беньковська, Руслан Хома, Катерина Циганенко,
Анастасія Карич, Анастасія Кононченко, Ганна Кірюшкіна, Сергій Топоров*
Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, Одеса, Україна
e-mail: rek@onu.edu.ua

Солі лимонної кислоти використовуються при переливанні крові для попередження згортання крові, пониження кислотності при дистальному ацидозі ниркових каналців, пероральній регідратації, як антациди перед анестезією, в хімічному аналізі, а також при уловлюванні токсичних кислих газів (зокрема SO₂) та ін. [1-3]. Вказані сполуки є перспективними хемосорбентами діоксиду сірки, оскільки вони мають високу реакційну здатність щодо вказаного політантау, є екологічно чистими та характеризуються низькою летючістю та токсичністю [1, 2-4].

Здійснено рН-, кондукто та денситетричне дослідження кислотно-основної та електрохімічної поведінки, систем H₃Cit – Am (Na₃Cit) – H₂O (H₃Cit – лимонна кислота; Am – моноетаноламін (МЕА) і поліетиленполіамін (PEPA); (Na₃Cit–цитрат натрію) та їх структурних характеристик при сумарному вмісті цитратних форм (лимонна кислота, дигідроцитрат (H₂Cit⁻), гідроцитрат (HCit²⁻) та цитрат (Cit³⁻) аніонів) 1,0 М в області температур 293÷ 313 К. Розраховані іон-молекулярний склад та йонна сила досліджених розчинів. Проведено оцінку концентраційних та термодинамічних констант утворення катіон-молекулярних комплексів і йонних асоціатів.

Проведено рН-редокс- та кондуктометричне дослідження взаємодії газоподібного SO₂ з модельними водними розчинами цитратів натрію, моноетаноламонію та поліетиленполіамонію (Na₃Cit, (МЕАН)₃Cit, (PEPAH_k)₃Cit_k, відповідно), а також буферними сумішами МЕА–(МЕАН)₃Cit та PEPA–(PEPAH_k)₃Cit_k при 273 – 313 К. Розраховані іон-молекулярний склад розчинів на основі МЕА, а також вказані вище константи.

Отримано зразки імпрегнованих волокнистих хемосорбентів-амфолітів (ІВХС-А) на основі цитратів-гідроцитратів моноетаноламонію при різному стехіометричному співвідношенні компонентів (МЕА:H₃Cit = (2,8 ÷ 3,0) : 1,0). Встановлено оптимальне співвідношення компонентів в просочуючому розчині, при якому відбувається практичне “спрацьовування” по SO₂ та NH₃ в динамічних умовах за рахунок утворення Н-зв’язаних іонних та йон-молекулярних комплексів. Встановлено вплив додавання компонентів в розчини для просочування на захисні характеристики відповідних зразків ІВХС-А.

У статичних умовах досліджена сорбція пари води та хемосорбція SO₂ зразками ІВХС–МЕА–H₃Cit. Процесу поглинання SO₂ сприяє гідратна вода у складі (МЕАН)₃Cit·nH₂O та (МЕАН)₂HCit·mH₂O, яка спричинює хемосорбцію абсолютно “сухими” зразками ІВХС–МЕА–H₃Cit, на відміну від зразків ІВХС-А на основі комплексних солей Ni(II), Cu(II) із МЕА, ЕДА та НМТА [4].

Показано, що отриманий ІВХС-А здійснює комбіноване очищення повітря від оксиду сірки (IV) та аміаку і може бути використаний для спорядження засобів індивідуального захисту органів дихання – полегшених газопилозахистних респіраторів.

Список літератури

1. Apelblat A. Citric acid. Springer Cham. 2014. 357 p. DOI: 10.1007/978-3-319-11233-6
2. Sun Z., Zhou Y., Jia S., Wang Y., Jiang D., Zhang L. *Catalysts*. 2021. Vol. 11, N 7. An 865. DOI: 10.3390/catal11070865
3. Mattingly A.N., Gianturco S.L., Pavlech L.L., Storm K.D., Yuen M.V. Sodium citrate: Summary Report. Maryland, 2021. 52 p.
4. Ennan A.A.-A., Khoma R.E., Dlubovskii R.M., Zakharenko Yu.S., Bienkovska T.S., Knysh I.M. *Visn. Odes. nac. univ., Him.* 2022. Vol. 27, N 1. P. 5-30. DOI: 10.18524/2304-0947.2022.1(81).248297 (in Ukrainian)

Секція 7.
ІННОВАЦІЇ В ХІМІЧНІЙ ОСВІТІ

ПРАКТИКУМ ДЛЯ ШКОЛЯРІВ НА БАЗІ УНІВЕРСИТЕТУ
Большаніна С.Б.¹, Диченко Т.В.¹, Пономарьова Л.М.¹, Яновська Г.О.¹

¹Сумський державний університет, м. Суми, Україна

e-mail: s.bolshanina@chem.sumdu.edu.ua

Профорієнтаційна робота - важливий етап в освітньому процесі, який допомагає школярам визначитись із майбутньою професією. У рамках профорієнтації з хімії університети можуть запропонувати унікальні можливості для учнів, забезпечуючи доступ до передових лабораторій та професійного обладнання. Профорієнтаційна робота в умовах воєнного стану вимагає від викладачів додаткових зусиль у пошуку нових форм й методів профорієнтаційної роботи більш гнучких та адаптованих, які б заохотили майбутніх випускників приймати в ній активну участь. Хімія – це експериментальна наука, яка не може розвиватися без різноманітних дослідів із речовинами. В умовах дистанційного навчання учні позбавлені можливості поводитися із різноманітними речовинами, виконувати лабораторні досліди, працювати із лабораторним посудом і приладами. Лабораторні та практичні заняття, що проводять в навчальних лабораторіях, дозволяють школярам практично побачити застосування теоретичних знань і поринути у дослідницьку діяльність.

Мета програми Лабораторно-хімічного практикуму націлена на надання учням необхідних компетентностей при поводженні із речовинами і при виконанні лабораторних дослідів, чого вони не можуть отримати в сучасних умовах дистанційного навчання в закладах середньої освіти.

Основними етапами реалізації програми Лабораторно-хімічного практикуму стали:

1. Вступна лекція, де викладач університету проводить оглядову лекцію, розповідаючи про важливість хімії, сучасні дослідження та перспективи роботи в цій галузі.
2. Знайомство з обладнанням: Школярі знайомляться з лабораторним обладнанням, правилами безпеки та основними методами роботи. Це включає використання аналітичних приладів, хімічних реактивів і обладнання.
3. Практична робота: школярі виконують лабораторні роботи, передбачені шкільною програмою під керівництвом викладачів. Слід зауважити, що всі лабораторні роботи починаються з міні лекції по темі лабораторної роботи, та з питань техніки безпеки, що є актуальними для даної теми. Так, на заняттях учні дізнаються, які хімічні реакції супроводжуються виділенням газу, випаданням осаду, зміною забарвлення, появою запаху, тепловим ефектом. Разом вони добувають кисень, виготовляють водні розчини із заданими масовими частками розчинених речовин; досліджують властивості основних класів неорганічних сполук. Викладач вчить, як розв'язувати експериментальні задачі; досліджувати реакції в розчинах, та спостерігати за впливом різних чинників на швидкість хімічних реакцій.
4. Обговорення результатів: Після завершення лабораторних робіт учасники обговорюють результати своїх досліджень, роблять висновки та оформлюють свої спостереження в лабораторному журналі. По завершенню заняття учасники програми проходять експрес-тестування.

Практичні заняття в університетських лабораторіях надають низку переваг:

- Школярі отримують реальний досвід роботи в лабораторії, що допомагає краще зрозуміти та засвоїти шкільну програму.
- Учні можуть побачити, як працюють професійні хіміки, що допомагає визначитися з майбутньою професією.
- Практична робота розвиває критичне мислення, вміння працювати в команді та навички вирішення проблем.

Профорієнтаційна робота з хімії в університетах, що включає проведення практичних та лабораторних занять, відіграє ключову роль у формуванні інтересу до науки та вибору професії. Ці заняття в умовах дистанційного навчання не лише збагачують знання школярів, а й допомагають їм свідомо підходити до вибору майбутньої кар'єри, що, зрештою, сприяє підготовці висококваліфікованих фахівців у галузі хімії.

ДОСВІД ПРАКТИЧНОГО ВПРОВАДЖЕННЯ МЕТОДУ МОДЕЛЮВАННЯ ТА АНАЛОГІЙ ПРИ ВИВЧЕННІ ОКРЕМИХ ТЕМ В КУРСІ «НЕОРГАНІЧНА ХІМІЯ»

Вадим Галиця, Юлія Ніколаєва

Мелітопольський державний педагогічний університет імені Богдана Хмельницького
e-mail: halytsyavady@gmail.com

Використання різноманітних методичних підходів при викладанні хімічних дисциплін дозволяє здобувачам освіти більш детально розглянути вплив компонентів цілого – структурних частинок речовин, у результаті якого з'являються нові властивості. На сьогодні не втрачає актуальності метод моделювання та аналогій, впровадження якого доцільно розглянути при вивченні різних типів кристалічних ґраток в модулі «Хімічний зв'язок і будова речовин». Не без уваги також залишаються 3D-проекції, віртуальні моделі, які можна створювати за допомогою різноманітних хімічних комп'ютерних програм, але саме метод моделювання та аналогій відрізняється простотою використання та високим рівнем засвоєння. Властивості кристалічних речовин залежать не лише від характеру хімічного зв'язку між частинками, але й від просторового розміщення цих частинок одна відносно одної. Розглянемо атомні, йонні та металічні кристалічні ґратки з позиції вищенаведеного методу. У вузлах атомної кристалічної ґратки містяться атоми, які зв'язані міцними ковалентними зв'язками у протяжну сітку. У цьому випадку структура відрізняється такою внутрішньою єдністю, що весь кристал є єдиною молекулою. Тобто цю структуру можна навести у вигляді гімнастичної піраміди (рис. 1, А).

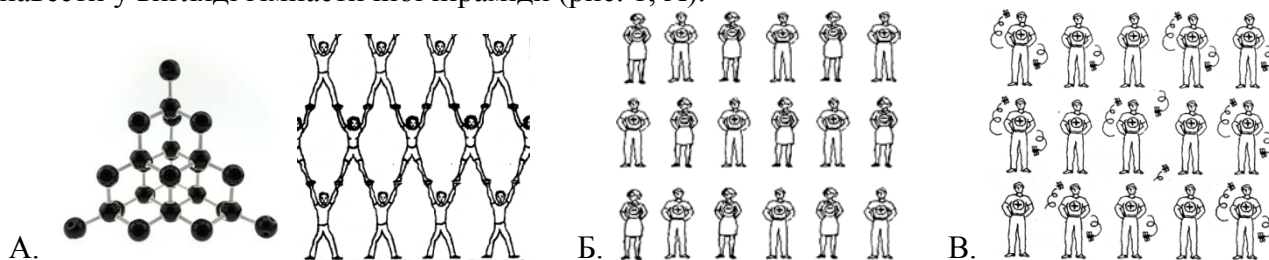


Рис. 1. Аналогія атомної (А), йонної (Б) та металічної (В) кристалічних ґраток.

Порівнюючи гімнастичну піраміду з атомною будовою алмазу – кожний гімнаст символізує атом Карбону, зв'язаний чотирма ковалентними зв'язками із сусідніми атомами. Цілісність структури підтримується виключно завдяки зусиль кожного з гімнастів. Отже, залежність учасників у цій ситуації один від одного набагато більше, ніж в інших аналогіях, що пояснюється виключно підвищеною міцністю кристала, й, відповідно, високою температурою плавлення. Наведена піраміда демонструє також високу взаємопов'язаність вузлів атомної кристалічної ґратки. У результаті послаблення одним з гімнастів лише однієї зв'язки – вся структура може впасти. У речовин з йонною ґраткою у вузлах розміщено різнойменно заряджені йони, які утримуються за рахунок сил електростатичного притягання. Цю структуру можна уявити у вигляді групи чоловіків та жінок, розміщених в шаховому порядку (рис 1, Б). Чоловіки символізують катіони, жінки – аніони. Тоді кожна людина знаходиться в зоні оточення її представником протилежної статі, до якого (якої) в силу закону притягання протилежностей відчуває інтерес. Цей інтерес має однакову виразність у всіх напрямках, оскільки на рисунку зображені неодружені чоловіки та незаміжні жінки. Цим і пояснюється підвищена міцність йонного кристала. Металічна кристалічна ґратка є характерною для металів з металічним хімічним зв'язком, а також багатьох сплавів. Отже, для ілюстрації будови металів можна уявити наступне. Групи чоловіків (рис. 1, В) символізують катіони металів (у вузлах кристалічної ґратки). Увесь простір між ними заповнений бджолами (делокалізовані електрони). На рисунку продемонстровано сили, які утримують однойменно заряджені катіони у вузлах ґратки: при всьому бажанні подітися нікуди – всюди бджоли. Завдяки методу моделювання та аналогій можна наочно пояснити наступну закономірність – якщо відома будова речовин, то можна передбачити їхні властивості, й, навпаки, – якщо відомі властивості речовин, можна визначити будову.

ОСВІТНІЙ ПРОСТІР LvivOpenLab – МІЖ ШКОЛОЮ ТА УНІВЕРСИТЕТОМ

Григорій Дмитрів¹, Микола Лехновський²

¹Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів, Україна

²STLab Молодіжна лабораторія №1, Львів, Україна

e-mail: grygoriy.dmytriv@lnu.edu.ua

Останнім часом спостерігається скорочення кількості абітурієнтів, які вступають на хімічні спеціальності до університетів, класичних та технічних. Ця проблема однаковою мірою стосується як України, так і Європейських країн. Є низка причин такого скорочення і однією з них – зменшення зацікавлення учнів у вивченні хімії, що насамперед пов'язане із зменшенням кількості лабораторних робіт, які виконують учні (в деяких школах вчителі демонструють дітям досліди, а в деяких лише демонструють відео з інтернету). На жаль матеріально технічне забезпечення шкіл бажає кращого і тому варто звернути на функціонування освітніх просторів, які останнім часом з'являються в різних містах України.

У 2020 році за ініціативи керівництва м. Львова був створений освітній простір LvivOpenLab основною метою якого є популяризація науки серед учнів та студентської молоді. До складу освітнього простору входять різноманітні підрозділи, одним з яких є Молодіжна лабораторія ST Lab, до роботи якої залучені студенти хімічного факультету. Особливістю функціонування цього простору є те, що для фінансування освітніх проектів активно залучаються грантові кошти міжнародних організацій та партнерів, наприклад Фонду ООН у галузі народонаселення UNFPA, Дитячого фонду ООН (ЮНІСЕФ) в Україні, Федерального міністерства економічного співробітництва і розвитку Німеччини, посольств Швеції та Фінляндії, що дало змогу забезпечити хімічну лабораторію сучасними лабораторними меблями, витяжною шафою, обладнанням, посудом та реактивами.

Оскільки освітній простір знаходиться в Сихівському районі, який є найбільш заселеним районом м. Львова, то в цьому районі є найбільша кількість Львівських шкіл. Завдяки підтримці управління освіти міста розроблено графік відвідування Молодіжної лабораторії ST Lab учнями разом з вчителями хімії для виконання низки лабораторних робіт з програми шкільного курсу хімії, зокрема “Розділення неоднорідної суміші”, “Дослідження властивостей основних класів неорганічних сполук”, тощо.

Окрім роботи з класами школярів, освітній простір LvivOpenLab реалізовує і свої власні проекти, наприклад, STEAM LAB, літній STEAM-інтенсив, “Ековідновлення”, Ecolab, AquaSTEAM, до яких на партнерських засадах залучається хімічний факультет Львівського національного університету імені Івана Франка. В рамках цих проектів учнями були здійснені такі міні-дослідження:

- Метали та їхні властивості;
- Вирощування кристалів;
- Харчова хімія;
- Хімія полімерів;
- Визначення якості води.

Самостійно виконуючи експерименти учні мають можливість наочно зрозуміти роботу хіміка в лабораторії, отримати практичні навички роботи з сучасним лабораторним обладнанням, сформуванню стійкий інтерес до хімії, що мотивуватиме їх вступати на хімічний факультет.

ПІДВИЩЕННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ ВИВЧЕННЯ ЛАТИНСЬКОЇ ФАРМАЦЕВТИЧНОЇ ТЕРМІНОЛОГІЇ ЗА ДОПОМОГОЮ ІНТЕРАКТИВНИХ МЕТОДІВ НАВЧАННЯ

Лариса Миронова, Вікторія Ульянова
ОНУ імені І.І. Мечникова, Одеса, Україна,
e-mail: larysamyronova@gmail.com;
e-mail: ulyanova.viktorija@onu.edu.ua

Жодна з сучасних галузей науки, за винятком філології, не використовує латинську мову настільки широко, як медицина та фармація. Звідси очевидно, що майбутній фармацевт повинен вивчати латинську мову насамперед для того, щоб правильно розуміти і використовувати фармацевтичні та медичні терміни у своїй майбутній професійній діяльності.

Найбільшою перешкодою на шляху до активного, творчого засвоєння фармацевтичної термінології є вимога механічного, пасивного запам'ятовування термінів. Тому для здобувачів особливого значення набуває вміння поєднувати отримані різноманітні граматичні знання (насамперед у межах латинських іменників та прикметників) в процесі вивчення і самостійного конструювання фармацевтичного терміну. Не менш важливим є вміння розуміти значення словотворчих елементів – латинських і грецьких коренів, префіксів, суфіксів.

Невелика кількість аудиторних годин і значно більша кількість годин, відведених для самостійної роботи, вимагають створення принципово нового підходу до викладання дисципліни, яку здобувачі опановують практично самостійно. Виклад матеріалу має бути максимально коротким, але насиченим спеціальними фармацевтичними термінами. Мовний матеріал для кращого засвоєння впорядкувати у спеціальних таблицях.

Латинська мова, як одна з найдавніших дисциплін, традиційно викладається за граматико-перекладним методом. Однак, сучасні підходи до вивчення мов пропонують інтерактивні методи, які дозволяють зробити навчання цікавішим та ефективнішим. Попри те, що латина є «мертвою» мовою, використання інтерактивних елементів може оновити традиційні методики і зробити вивчення цієї мови більш живим процесом. Інтерактивне навчання – це особливий підхід до освітнього процесу, який спрямований на створення такого середовища, де кожен здобувач має можливість активно брати участь у навчанні, відчувати свою значущість та досягати успіхів відповідно до своїх індивідуальних можливостей. Оскільки латина в фармації виконує суто практичну функцію (термінологічну), важливо, щоб здобувачі не просто запам'ятовували слова, а й вміли їх застосовувати на практиці. Тому на заняттях бажано використовувати інтерактивні методи, такі як командні ігри з використанням дидактичних карток, що допомагають закріпити лексику та вирази, необхідні для роботи фармацевта. Під час гри здобувачі активно залучаються до перекладу фармацевтичних та медичних термінів з української на латину і навпаки, формують нові терміни з окремих частин слів, пояснюють їх значення та розкривають роль латинської мови у формуванні сучасної термінології. Такий підхід не лише допомагає закріпити теоретичні знання, але й розвиває практичні навички, необхідні для майбутньої професійної діяльності. Крім того, ігри сприяють підвищенню мотивації до навчання, розвитку ерудиції та формуванню таких важливих якостей, як креативність та вміння працювати в команді.

Таким чином, інтерактивні методи перетворюють заняття з латинської мови на захопливий процес, що сприяє глибшому засвоєнню матеріалу. Крім того, ігри створюють атмосферу співпраці та взаємодопомоги, що позитивно впливає на мотивацію до навчання. Важливо пам'ятати, що інтерактивні елементи є лише доповненням до традиційних методів навчання і не повинні замінювати їх повністю.

DIGITAL TRANSFORMATION OF THE COURSE "STRUCTURAL AND SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY" TO MEET THE NEEDS OF DISTANCE LEARNING

*Serhii Radio*¹, *Kateryna Loza*², *Oleg Prymak*²

¹ Vasyl' Stus Donetsk National University, Vinnytsia, Ukraine

² University of Duisburg-Essen, Essen, Germany

e-mail: radio@donnu.edu.ua

The academic discipline "Structural and Supramolecular Chemistry" is a core subject for students pursuing a Bachelor's degree in Chemistry (specialty 102 "Chemistry"). It provides in-depth professional training for future chemists. The course aims to develop the competencies and learning outcomes specified by the Standard of Higher Education of Ukraine for the first (bachelor's) level of higher education in the field of study 10 "Natural Sciences" (specialty 102 "Chemistry"), as approved by the Ministry of Education and Science of Ukraine (Order No.563, dated April 24, 2019). The discipline aims to introduce students to the fundamental principles and methods of supramolecular chemistry, as well as modern approaches to molecular design based on an understanding of non-covalent (supramolecular) interactions between molecules and ions. Additionally, the course covers software for decoding and visualizing structural information from single-crystal experiments and verifying X-ray crystallography data (CIF files). In Ukraine, starting in 2020 due to the COVID-19 pandemic and quarantine restrictions, followed by the full-scale war that began in February 2022, distance learning has become one of the most widespread and safest forms of education at all levels of education. Distance learning in the course "Structural and Supramolecular Chemistry" imposes specific requirements on both students and lecturers, which differ from those of traditional in-person education. However, these requirements foster the development of relevant competencies, the most important of which include:

1. Self-discipline and self-organization: students must be able to independently manage their time, set priorities, and adhere to the study schedule. On the other hand, students are provided with open access to lecture materials (18 PowerPoint presentations, and scientific publications that form the basis of the lecture content) and methodological guidelines for conducting laboratory work.

2. Technical literacy: understanding the basic technical tools and platforms used for distance learning, such as video conferencing (MS Teams, ZOOM, Skype) and email services, is essential. The course is conducted using the MS Teams platform, where all necessary materials are provided. Access to these resources is granted through the university's corporate email system.

3. Active use of electronic resources and libraries: Students need to be proficient in searching for, verifying, and utilizing information from various online sources for completing assignments and preparing for classes. Key resources include: I. The Cambridge Crystallographic Data Centre: Tools for molecular structure visualization such as Mercury (<https://www.ccdc.cam.ac.uk/solutions/software/free-mercury/>) and DIAMOND Crystal and Molecular Structure Visualization (<https://www.crystalimpact.com/diamond/>, temporary trial version); II. Structural information search services: CCDC Access Structures (<https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures/>) and Crystallography Open Database (<https://www.crystallography.net/cod/>); III. Structural data file analysis: EnCIFer (<https://www.ccdc.cam.ac.uk/solutions/software/encifer/>).

4. Ability to work independently and in a team: It is crucial to be able to work effectively both independently and as part of a team (laboratory work requires collaboration with other students, such as comparing structural parameters and finding correlations in the structures of isostructural compounds. Students individually determine discrete parameter values and then consolidate these into a unified answer).

The updating and digitalization of the course "Structural and Supramolecular Chemistry" at Vasyl' Stus Donetsk National University is being carried out with the support of German partners through the project "Ukraine Digital: Ensuring Academic Success in Times of Crisis" (funded by the German Academic Exchange Service, DAAD), coordinated by the University of Duisburg-Essen.

МОЖЛИВОСТІ ГРУПОВОЇ РОБОТИ ДЛЯ КОМУНІКАЦІЇ ЗДОБУВАЧІВ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ В УМОВАХ ДИСТАНЦІЙНОГО НАВЧАННЯ

Олександра Семерик

Вінницький державний педагогічний університет імені Михайла Коцюбинського,
Вінниця, Україна

e-mail: olexandrasemeryk@gmail.com

Комунікативна компетентність є однією з ключових в концепції реалізації Нової української школи. Відповідно до Державного стандарту базової середньої освіти, здійснення комунікації має відбуватися як у письмовій, так і в усній формах [1]. Проте в умовах дистанційного навчання простежуються ризики неповноцінного формування мовленнєвих навичок здобувачів загальної середньої освіти в результаті: зменшення частки прямого спілкування між учнями; збільшення обсягу матеріалу для самостійного опрацювання в асинхронному режимі; під час уроків в синхронному форматі переважає викладацька діяльність учителя.

Ми вважаємо, що одним зі шляхів урегулювання окресленої проблеми є використання групової роботи. Дослідниця О. Ярошенко обґрунтовує ефективність впливу спілкування в процесі групової роботи на формування предметної компетентності з хімії, розвитку та виховання здобувачів освіти, оскільки спілкування є «умовою і результатом цього виду діяльності» [2, с. 47].

Спільна робота учнів на уроках хімії з одночасним спілкуванням може реалізовуватися наступним чином: взаємоперевірка рівня сформованості знаннєвого складника предметної компетентності з хімії; розподіл обов'язків при виконанні короткострокової пошукової роботи під час уроку; визначення алгоритму дій для розв'язку розрахункових або експериментальних задач; обговорення можливих варіантів відповідей на запропоноване завдання (на цьому етапі важливо, щоб кожен учасник групи вступав в дискусію, відстоював власну думку, наводив аргументи та підкріплював фактами [1]).

Для організації освітнього процесу в синхронному режимі в умовах дистанційного навчання придатні такі сервіси відеотелефонного зв'язку як Google Meet та Zoom. Створення переговорних кімнат в Google Meet потребує попереднього встановлення розширення Google Meet Breakout Rooms. Серед особливостей даного сервісу варто відзначити можливість як одночасної комунікації учителя з усіма групами, так і з кожною окремо; створювати переговорні кімнати можна заздалегідь; склад та кількість груп під час уроку є варіативними; учні самостійно приєднуються до створених груп, перейшовши за відповідним посиланням. У сервісі Zoom групова робота відбувається в сесійних залах, які створюються безпосередньо під час уроку в режимі онлайн. Існує три варіанти об'єднання учнів у групи: автоматичний, на розсуд вчителя, а також за власним бажанням учнів. Учитель може відвідувати кожен сесійний зал лише окремо; надавати учням дозвіл для демонстрації екрану в основному залі, щоб учасники кожної групи мали можливість за необхідності використовувати цю опцію. Спільним для обох сервісів є можливість учнів надавати запит для отримання допомоги вчителя та встановлення таймера з часом, відведеним на роботу груп.

Таким чином, організація групової роботи на уроках хімії під час дистанційного навчання сприяє одночасному формуванню комунікативної та предметної компетентностей.

1. Державний стандарт базової середньої освіти: Постанова КМУ від 30.09.2020 року. № 898. URL: <https://www.kmu.gov.ua/npas/pro-deyaki-pitannya-derzhavnih-standartiv-rovnoyi-zagalnoyi-serednoyi-osviti-i300920-898> (дата звернення: 17.08.2024).

2. Ярошенко О.Г. Віхи становлення наукової школи. Вінниця: Видавець ФОП Кушнір Ю.В., 2020. 292 с.

ВПРОВАДЖЕННЯ STEM-ТЕХНОЛОГІЙ НА УРОКАХ ХІМІЇ В ЗАКЛАДАХ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ

Олексій Сергєєв

Вінницький державний педагогічний університет ім. Михайла Коцюбинського,
Вінниця, Україна

e-mail: serhieievoleksiy@gmail.com

Згідно з концепцією розвитку природничо-математичної освіти (STEM-освіти) [1], її широкомасштабне впровадження в навчальний процес на початковому, базовому, профільному та вищому/професійному рівнях освіти, є ключовим напрямом розвитку освітньої галузі. Задля реалізації даної концепції передбачене використання STEM-орієнтованих підходів в усіх основних видах освіти, серед яких: формальна, неформальна та інформальна освіта. Актуальність даних підходів полягає у підвищенні мотивації учнів до вивчення хімії, глибшого розуміння предмету через залучення до практичних досліджень і вирішення реальних задач, шляхом використання сучасних методик та засобів навчання хімії. Здійснивши збір даних шляхом анкетування вчителів хімії Вінниччини та Полтавщини й проаналізувавши їх відповіді, нами було встановлено, що найбільш використовуваними елементами STEM-навчання серед опитаних учителів є електронні освітні ресурси, їх використовує 103 педагоги, що відповідає 77,4% усіх учасників опитування, проектно-дослідницькою діяльністю, як елементом STEM-орієнтованого навчання користується 94 вчителів (70,7%), практико-орієнтованим навчанням- 70 вчителів (52,6%), інтегровані уроки є популярними у 67 вчителів (50,4%), позакласні заходи- 53 вчителів (39,8%). Застосування в освітньому процесі даних елементів для реалізації STEM-орієнтованого підходу до навчання хімії забезпечує як міждисциплінарні можливості для учнів, так і підвищує їх мотивацію до навчання і засвоєння нових знань у цікавий для них спосіб.

Опираючись на результати анкетування можна стверджувати, що 97% усіх опитаних педагогів повністю або частково згодні із твердженням, що дані технології та елементи підвищують рівень навчальних досягнень учнів з хімії і лише 3% вчителів не згодні із цим твердженням. Водночас, існує ряд перешкод, що стоять на заваді впровадження STEM-технологій в навчальний процес з хімії, незважаючи на позитивний вплив рівня навчальних досягнень учнів та популярність даних технологій постає відсутність матеріально-технічної бази у закладах освіти, дану проблему, як головну перешкоду для впровадження STEM-навчання, виділили 120 вчителів (90,2%), що є найбільш значним показником, 87 педагогів (65,4%) повідомили про відсутність методичних матеріалів (програм, вказівок, розробок), 42 вчителів (31,6%) виділили недостатню їх підготовку для реалізації даних підходів у навчальний процес, така підготовка може бути здійснена у вигляді практичних вебінарів, семінарів, майстер-класів, нажалі, 57 вчителів (42,9%) вказали на відсутність мотивації учнів та вчителів. З огляду на викладене вище можна зробити висновок про те, що STEM-орієнтоване навчання є популярним, сучасним комплексом технологій, які поліпшують мотиваційний та компетентнісний рівень учнів з хімії, водночас, гостро постає потреба в поліпшенні матеріально-технічної бази закладів освіти, задля ефективної реалізації даних технологій, в розробці методичних матеріалів для учителів хімії та в їх підготовці. Впровадження STEM-орієнтованого підходу у навчання хімії потребує подальших зусиль з боку освітніх закладів, учителів і науковців.

1. Концепція розвитку природничо-математичної освіти (STEM-освіти) URL: <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/960-2020-%D1%80#n8>

ФРАЗЕОЛОГІЗМИ УКРАЇНСЬКОЇ МОВИ ЯК БАЗА ДЛЯ ІНТЕГРОВАНОГО НАВЧАННЯ ХІМІЇ

Володимир В. Ткач^{1,2}, Марта В. Кушнір³, Галина В. Фурдига⁴, Діана Р. Багрій⁴

¹Чернівецький національний університет ім. Ю.Федьковича, Україна

²Факультет інженерії університету Порту, Португалія

³Чернівецький міський ліцей №5 «Оріянна», м. Чернівці

⁴Чернівецька гімназія №9, м. Чернівці

e-mail: nightwatcher2401@gmail.com

«Наш обмежений розум для зручності поділяє «цей світ на частини: фізику, біологію, астрономію, психологію тощо, але ж природа насправді ніякого поділу не знає». Так писав Нобелівський лауреат Р. Фейман.

Приблизно два останні десятиріччя відбувається реформування освіти. Поряд із звичними для кожного педагога поняттями «знання, уміння і навички» народилося поняття «компетенція», що є синонімом інтегрованих досягнень учня. Інтеграція – це об'єднання в одне ціле будь-яких частин, відновлення, поповнення, взаємодоповнення, узгоджений розвиток. У навчанні – це внесення порядку, єдності у розчленований світ знань з метою підвищення як їх здобуття, так і використання.

За рахунок інтегрованих дисциплін можна максимально диференціювати предмети, які становлять ядро майбутньої професії випускника. Пізнання об'єктивної дійсності не можна забезпечити лише одною наукою і відповідним навчальним предметом. Перед сучасною шкільною освітою постає складне завдання – це розв'язувати досить гостру проблему міжнаукових взаємодій та відношень між ними. Проте проблема інтеграції предметів природничо-математичного циклу в умовах сучасної української школи зумовлюється тематичною близькістю даних навчальних дисциплін, пошуком раціональних шляхів їх інтеграції, необхідністю формування цілісного світогляду у взаємозв'язку його елементів. І звичайно постає питання, щодо неузгодженості навчальних програм з природничо-математичних дисциплін.

У даній роботі показано можливість інтеграції хімічних завдань зі знаннями із інших предметів на базі фразеологізмів української мови. Фразеологізми відображають ментальність народу чи народів, що розмовляють їх мовою – історію, культуру, міжетнічні контакти, ерудицію, гумор (подекуди навіть і чорний) і описані в них явища так чи інакше пов'язані з хімією. За значенням ряду фразеологізмів стоять хімічні процеси. Інші ж можуть бути використаними для художнього вираження хімічних процесів.

У даній роботі описано та проаналізовано три інтегровані завдання на основі фразеологізмів української мови. Аналіз інтеграції хімічних завдань зі знаннями з інших предметів на базі фразеологізмів підтверджує ефективність інтегрованого підходу у навчанні хімії та активізації міжпредметних зв'язків.

ВИКОРИСТАННЯ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ НА ЗАНЯТТЯХ ІЗ ЛАТИНСЬКОЇ Й АНГЛІЙСЬКОЇ МОВ У ФАРМАЦЕВТИВ-ХІМІКІВ

Вікторія Ульянова, Лариса Миронова
ОНУ імені І.І. Мечникова, Одеса, Україна,
e-mail: larysamyronova@gmail.com;
e-mail: ulyanova.viktoria@onu.edu.ua

Використання штучного інтелекту (ШІ) у викладанні латинської мови на фармацевтичних факультетах тісно пов'язане зі змінами, що відбуваються в сучасному світі та відкриває нові перспективи для персоналізації навчання, підвищення ефективності та якості освітнього процесу. Цей підхід дозволяє створювати інтерактивні навчальні середовища, адаптовані до індивідуальних потреб кожного студента.

Зараз цифрові технології стали значущою частиною життя молоді, вони народилися в епоху цифрової революції й сприймають інформацію зовсім по-іншому, ніж попередні покоління. По-перше, сучасні здобувачі вищої освіти очікують, що навчання буде інтерактивним, цікавим і персоналізованим. ШІ дозволяє створювати індивідуальні навчальні траєкторії, використовувати ігрові елементи та забезпечувати постійний зворотний зв'язок. По-друге, вони хочуть мати можливість навчатися в будь-який час і в будь-якому місці. Мобільні додатки та онлайн-платформи, що використовують ШІ, забезпечують таку можливість. По-третє, сучасні студенти звикли працювати в команді. ШІ-платформи можуть забезпечити ефективну співпрацю здобувачів у процесі навчання, а також ШІ автоматизує рутинні завдання, звільняючи час студента для більш творчих завдань.

ШІ-технології надають можливості для **адаптивного навчання**. Вони аналізують дані про успішність здобувача, його сильні та слабкі сторони та автоматично підбирають навчальні матеріали та завдання, що відповідають його рівню знань. ШІ надає можливість для **створення інтерактивних навчальних середовищ** (ШІ-чати, віртуальні помічники та ігрові елементи роблять процес навчання цікавішим та залучають студентів до активної участі) та для **автоматизації рутинних завдань** (ШІ-системи можуть автоматично перевіряти домашні завдання, проводити тести та надавати статистику успішності здобувачів, звільняючи викладачів для більш творчих завдань). Так, наприклад, наведемо деякі з них:

Adaptive Learning Platforms: системи, які адаптують складність завдань та темп навчання до індивідуальних особливостей кожного студента (*Realizeit, 360Learning, Adaptemy, EdApp*);

Intelligent Tutoring Systems: системи, які надають індивідуалізовану допомогу студентам у процесі навчання, відповідаючи на їхні запитання та пояснюючи складні поняття (*CIRCSIM_Tutor, e-Teacher*);

Virtual Tutors: чат-боти, які можуть відповідати на запитання студентів з граматики, лексики та фармацевтичної термінології (*Talkpal*);

Language Partners: віртуальні партнери для практики мови (*Tandem GPT, Talkio AI, YesChat*).

Таким чином, використання ШІ у викладанні англійської та латинської мов не тільки відповідає сучасним трендам в освіті, але й дозволяє підготувати фахівців, які зможуть успішно працювати в динамічному світі. ШІ допомагає створити індивідуальне, інтерактивне та ефективне навчальне середовище, що відповідає потребам сучасної студентської спільноти. Перспективи розвитку цього напрямку пов'язані з розробкою складніших ШІ-моделей, які зможуть розуміти природну мову, генерувати креативний контент та адаптуватися до індивідуальних потреб кожного здобувача вищої освіти.

ПРОБЛЕМНЕ НАВЧАННЯ У КУРСІ «ОСНОВИ НАУКОВИХ ДОСЛІДЖЕНЬ»

Михайло Філеп, Золтан Чома, Єва Бак

Закарпатський угорський інститут ім. Ференца Ракоці II, Берегово, Україна
filep.mihaly@kmf.org.ua

Сучасні тенденції розвитку закладів вищої освіти зробили наукову складову невід'ємною частиною освітньої діяльності. У зв'язку з цим підготовка кваліфікованих та компетентних спеціалістів з навиками науково-дослідницької діяльності є актуальним питанням. Науково-дослідницькі компетентності зазвичай розподілені у декількох освітніх компонентах, однак теоретичні та практичні засади планування експерименту закладаються у курсі «Основи наукових досліджень». Даний курс знайомить здобувачів з основними елементами наукових досліджень – планування, проведення, обробка та оформлення результатів, тому ймовірно для кращого засвоєння відповідних компетентностей є надання можливості здобувачам самостійно пройти всі етапи наукового дослідження.

Для реалізації даного підходу обрано наукову тематику, щодо синтезу та дослідження сполук. Вибір зупинено на оксалатах d-металів. Це зумовлено як і наявністю певних літературних даних, що необхідно для здійснення літературного аналізу, так і простоті їх синтезу. Здобувачам було запропоновано на вибір один з можливих іонів Fe^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} та оголошену тему і завдання проекту. Виконання проекту здійснювалась індивідуально. Перший етап передбачав пошук та аналіз літературних даних, щодо властивостей та практичного використання даних сполук. Наступним етапом було запропонувати метод синтезу та здійснити відповідний синтез оксалату у кількості зазначеній викладачем. Всі здобувачі для одержання оксалатів обрали синтез з водного розчину. У якості джерела іонів металів Me – Fe^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} використовували відповідні сульфати металів, а як джерело оксалат-іонів використовували $\text{K}_2\text{C}_2\text{O}_4 \times \text{H}_2\text{O}$. Одержання оксалатів здійснювали реакцією еквімолярних кількостей $\text{Me}^{2+} : \text{C}_2\text{O}_4^{2-} = 1:1$ відповідних солей.

Синтезовані зразки досліджували методом рентгенівського фазового аналізу (РФА) з використанням порошкового дифрактометра Proto AXRD Benchtop. Підготовка зразків для дослідження методом РФА здійснювалась здобувачами, а фазовий аналіз у програмі PDAnalysis (надається Proto) за участю викладача. За результатами досліджень методом РФА встановлено фазову однорідність одержаних зразків (Рис.1). Це підтверджує коректність обраного методу синтезу і рівень його здійснення. Оскільки інтенсивність та форма дифракційних піків вказує на значну дисперсність одержаних порошків, вирішено було оцінити розміру кристалітів з використанням формули Шеррера. Експериментальну дифрактограму здобувачі самостійно представили у графічній формі використовуючи дві програми з переліку запропонованих безкоштовних програм (SciDAVis, QtiPlot 0.9.8.9, AlphaPlot, LabPlot).

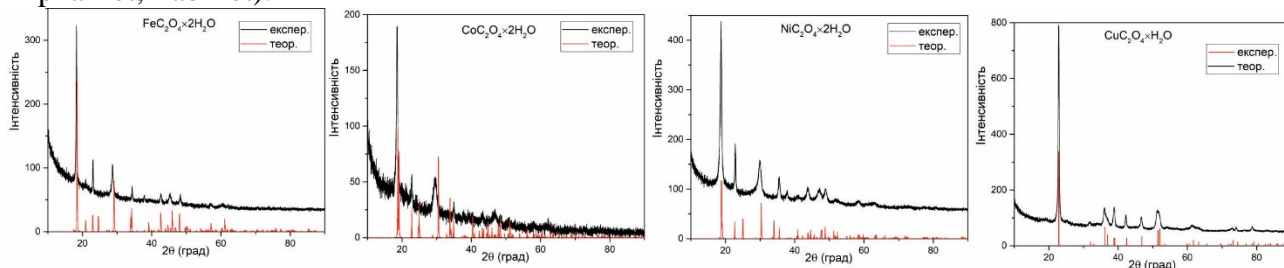


Рис.1. Експериментальні та теоретичні дифрактограми синтезованих оксалатів.

Заключним етапом було написання наукової праці обсягом 2 сторінки, що містить всі необхідні розділи: вступ із обґрунтуванням актуальності, результати та їх обговорення і висновків. Таким чином здобувачі змоги самостійно здійснити всі основні етапи наукового дослідження – від планування до обробки та оформлення результатів.

МЕТОД НАВЧАЛЬНИХ КЕЙСІВ В ОПАНУВАННІ ХІМІЧНИХ ДИСЦИПЛІН

Тетяна Дюжикова, Тетяна Четвертак

Мелітопольський державний педагогічний університет імені Богдана Хмельницького,
Україна
e-mail: shafranskaja@ukr.net

Актуальність. Використання навчальних кейсів в опануванні хімічних дисциплін дає змогу студентам влучно приймати правильні рішення в реальних життєвих ситуаціях, а також дає змогу сформувати у здобувачів освіти високі моральні цінності. Опрацювання навчального матеріалу зі студентами, зокрема проблемних ситуацій, засобами кейс-методу, дозволяє виявити та вдосконалити навички оцінки ситуації, знаходити найбільш раціональне вирішення поставленої проблеми, що покращує якість отриманих знань студентами.

Мета дослідження. Перевірити ефективність застосування навчальних кейсів у викладанні хімічних дисциплін, як засобів навчання, з метою покращення рівня знань здобувачів.

Матеріали та методи. Опитування, оцінка й узагальнення статистичних даних. В опитуванні прийняли участь 96 респондентів, серед яких здобувачі (74%) та викладачі (26%). Опитування проведено засобами анкетування.

Отримані результати. За результатами опитування позитивні відгуки щодо використання навчальних кейсів отримали наступні етапи: респонденти виявили найбільше зацікавлення щодо аналізу окремих кейсів (34,3%), організації обговорення змісту навчального кейса (27,6%), дискусії та презентації кейса (33,3%), підведення підсумків обговорення та оцінювання результатів (4,8%). Серед різновидів навчальних кейсів, найбільш високу оцінку отримали - структуровані кейси, в яких наведено незначну кількість інформації (34,3%), друге місце надано кейсам-замальовкам, обсягом до десяти сторінок тексту з додатками, що містять ключові поняття (26,6%), третє місце посіли великі неструктуровані кейси, в яких представлено детальну інформацію обсягом до п'ятдесяти сторінок (21,3%), і четверте місце, на думку респондентів, заслуговують дослідницькі кейси (17,8%), які орієнтовані на підвищення кваліфікації і мають більш специфічний характер та характеризуються вузькою професійною направленістю. Серед методів кейс-технологій вподобання студентів отримали: метод ситуаційного аналізу (23,5%), метод дискусії (25,1%), ігрове проектування (37,3%) та метод інциденту (14,1%). Командний розв'язок навчальних кейсів дав змогу здобувачам проявити активність, в повному обсязі застосувати отримані теоретичні знання при вирішенні кожної окремої проблемної ситуації, надати власні пропозиції, провести всебічний аналіз та аргументувати особисту думку. За експертною думкою викладачів-респондентів (83,4%), значно покращено ступінь володіння матеріалом при застосуванні навчальних кейсів у викладанні хімічних дисциплін.

Висновки. Отже, ефективність підготовки фахівців зростає із застосування навчальних кейсів у викладанні хімічних дисциплін. В умовах змішаного навчання використання навчальних кейсів позитивно впливає на показники рефлексії здобувачів освіти.

ЗМІСТ

Стор.

ПЛЕНАРНІ ДОПОВІДІ

SIMPLE STRUCTURES - NUMEROUS POSSIBILITIES <i>Roman Gladyshevskii</i>	5
ХІМІЧНА ТЕРМІНОЛОГІЯ НА ШЛЯХУ ДО ІUPAC <i>Олесь Голуб</i>	6
АНАЛІЗ НЕБЕЗПЕЧНОЇ ДІЇ ХІМІЧНИХ ЗАБРУДНЮВАЧІВ, ЗОКРЕМА ВІЙСЬКОВОГО ПРИЗНАЧЕННЯ, МЕТОДАМИ ТЕОРЕТИЧНОЇ ХІМІЇ ТА ХЕМОІНФОРМАТИКИ <i>Віктор Кузьмін, Леонід Горб, Сергій Оковитий, Олексій Нипорко, Анатолій Артеменко, Євген Муратов, Людмила Огніченко</i>	7
ГЕТЕРОПОЛІСПОЛУКИ З АНІОНОМ ЗІ СТРУКТУРОЮ ПІКОКА–УКЛІ: СПОСОБИ СИНТЕЗУ, ВЗАЄМОЗВ'ЯЗОК СТРУКТУРИ ТА ВЛАСТИВОСТЕЙ, ПРАКТИЧНЕ ВИКОРИСТАННЯ <i>Олександра Марійчак, Георгій Розанцев, Сергій Радіо</i>	8
МЕТАЛОКОМПЛЕКСНІ ТА МЕТАЛОКСИДНІ НАНОКАТАЛІЗАТОРИ В РЕДОКС-РЕАКЦІЯХ ЗА УЧАСТЮ ГАЗОПОДІБНИХ ТОКСИЧНИХ РЕЧОВИН (PH ₃ , CO, SO ₂ , O ₃) <i>Тетяна Ракитська</i>	9
ФОРМУВАННЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНИХ ОСНОВ ХІМІЧНОГО КОНСТРУЮВАННЯ НОВИХ ТИПІВ МЕТАЛОКОМПЛЕКСНИХ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНИХ АРХІТЕКТУР БІОМЕДИЧНОГО ПРИЗНАЧЕННЯ ЯК ВЕКТОР ДОСЛІДЖЕНЬ В ОНУ імені І.І. МЕЧНИКОВА <i>Інна Сейфулліна, Олена Марцинко</i>	10

Секція 1

ФУНКЦІОНАЛЬНІ НЕОРГАНІЧНІ МАТЕРІАЛИ

СИНТЕЗ ТА ЛЮМІНЕСЦЕНТНІ ВЛАСТИВОСТІ ЛЕГОВАНИХ ІОНАМИ Cr ³⁺ МІКРО- ТА НАНОРОЗМІРНИХ ОРТОБОРАТІВ ІНДІО <i>Ірина Березовська, Олена Хоменко, Сергій Кулешов, Олена Трунова, Нінель Єфрюшина, Володимир Доценко</i>	12
ФУНКЦІОНАЛЬНІ МАТЕРІАЛИ НА ОСНОВІ La-TiO ₂ ДЛЯ ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО СЕНСОРА РОЗЧИНЕНОГО КИСНЮ <i>Віра Воробець, Ірина Медик, Геннадій Колбасов</i>	13
НОВІ ТЕТРАРНІ СПОЛУКИ У СИСТЕМАХ {Nd,Sm}-Ni-Al-Ge <i>Роман Дацко, Наталія Муць, Роман Гладішевський</i>	14
ДОСЛІДЖЕННЯ ВЗАЄМОДІЇ СУЛЬФІДУ ЦИНКУ З ФТОРИДОМ ЄВРОПІО СПЕКТРОСКОПІЧНИМИ МЕТОДАМИ <i>Віктор Зінченко, Ігор Магунов, Антон Бабенко, Павло Дога</i>	15
ЗАКРІПЛЕНІ НА ПРИРОДНИХ НОСІЯХ МОНО- ТА БІМЕТАЛЬНІ КОМПОЗИЦІЇ В РЕАКЦІЇ ХЕМОСОРБЦІЙНО-КАТАЛІТИЧНОГО ОКИСНЕННЯ ДІОКСИДУ СУЛЬФУРУ <i>Тетяна Кіосе, Тетяна Ракитська, Людмила Раскола, Олеся Данюкіна</i>	16
BEE POLLEN, A NATURAL WEALTH OF BIOLOGICALLY ACTIVE COMPOUNDS AS AN ADDITIVE TO COMPOZITES <i>Klaudia Kowalska, Ewa Skwarek</i>	17
СИНТЕЗ ТА ФОТОЕЛЕКТРОХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ПЛІВОК ОКСИДА ЗАЛІЗА <i>Геннадій Колбасов, Сергій Фоманюк, Ігор Русецький, Сергій Мальований</i>	18

НАТРІЙ, МАГНІЙ ТА КАРБОНАТ-ВМІСНІ КАЛЬЦІЙ ФОСФАТИ: СИНТЕЗ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ	
<i>Єва Комащенко, Наталія Струтинська, Ірина Гринюк, Дмитро Прохоренко</i>	19
НОВИЙ ПРЕДСТАВНИК РОДИНИ ФАЗ НОВОТНОГО У СИСТЕМІ Mo–Ru–Ge	
<i>Богдан Коротошин, Наталія Муць, Лев Аксельруд, Ярослав Токайчук, Роман Гладишевський</i>	20
НОВІ ТЕТРАРНІ ФАЗИ ЗІ СТРУКТУРОЮ ТИПУ CrB	
<i>Христина Місько, Наталія Муць, Роман Гладишевський</i>	21
ТВЕРДІ РОЗЧИНИ У СИСТЕМІ GdNiIn _{1-x} Sn _x	
<i>Г. Ничипорук, Я. Вільчинська, М. Горяча, А. Зелінський, В. Заремба</i>	22
РОЗЧИННІСТЬ Ni У СПОЛУЦІ Ti ₅ Si ₃	
<i>Світлана Пукас, Наталія Семусь, Роман Гладишевський</i>	23
ОДЕРЖАННЯ ТА ВЛАСТИВОСТІ МОНОКРИСТАЛІВ Ti ₄ SnS ₄ , Ti ₂ SnS ₃ ТА Ti ₄ SnS ₃	
<i>Мар'ян Сабов, Ігор Барчій, Міхал П'ясецькі, Тетяна Малаховська, Артем Погодін, Михайло Поп, Вікторія Сабов, Михайло Філеп</i>	24
ФАЗИ ЗІ СТРУКТУРОЮ ПЕРОВСКІТУ У СИСТЕМАХ {Pr,Sm}–Pd–Ge	
<i>Катерина Степанович, Оксана Заремба, Ярослав Токайчук, Роман Гладишевський</i>	25
СИНТЕЗ ТА АНТИМІКРОБНІ ВЛАСТИВОСТІ ЦИРКОНІЙ ТА ЦИНК- ВМІСНИХ КАЛЬЦІЙ ФОСФАТІВ АПАТИТОВОГО ТИПУ	
<i>Наталія Струтинська, Лідія Дремова, Ірина Гринюк, Ольга Василюк, Микола Слободяник</i>	26
СИНТЕЗ ТА ЛЮМІНЕСЦЕНТНІ ВЛАСТИВОСТІ ФОСФАТНО-БОРАТНОГО СКЛА, ЩО МОДИФІКОВАНО ОКСИДОМ МОЛІБДЕНУ(VI) ТА ЄВРОПІО(III)	
<i>Катерина Терєбіленко, Лілія Саєнко, Микола Слободяник</i>	27
ANALYSIS OF THE MICROSTRUCTURE AND MECHANICAL CHARACTERISTICS OF SUPERIONIC Ag _{6+x} (P _{1-x} Ge _x)S ₅ I CERAMIC MATERIALS	
<i>Shender I.O., Pogodin A.I., Malakhovska T.O., Filep M.J., Kokhan O.P., Bilanych V.S., Suslikov L.M.</i>	28

Секція 2

КООРДИНАЦІЙНА ТА СУПРАМОЛЕКУЛЯРНА ХІМІЯ

PROSPECTS FOR USING PYRAZOLES IN SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY	
<i>Yuliia Davydenko</i>	30
THE SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF THE PROPYL 4-((1-(4-NITROPHENYL)-1H-1,2,3-TRIAZOL-4-YL)METHOXY) BENZOATE- COPPER COMPLEX	
<i>Hakimov Muminjon, Ortikov Ilkhomjon, Tojiboev Akmaljon</i>	31
КОМПЛЕКСИ ЛАНТАНІДІВ З 1,2,4-ТРИАЗОЛВМІСНИМИ ОСНОВАМИ ШИФФА ТА ПІРИДИНОЛГІДРАЗОНАМИ: СИНТЕЗ ТА ЛЮМІНЕСЦЕНТНІ ВЛАСТИВОСТІ	
<i>Валерія Галущенко, Олександр Коровін, Наталія Шматкова, Сергій Смола, Дмитро Хоменко, Роман Дорощук, Наталія Русакова</i>	32
QUANTUM-CHEMICAL CALCULATIONS OF THE STRUCTURE OF Gd(III) COMPLEXES WITH 2,5-DIMETHYLHEPTEN-1-3,5,-DIONE	
<i>Artur Horbenko, Oleksandra Berezhnytska, Olena Trunova</i>	33
LUMINESCENT CHARACTERISTICS OF ZINC COMPLEXES WITH CURCUMINOIDS	

<i>Oleksandra Berezhnytska, Nadiia Ivakha, Olena Trunova</i>	34
SYNTHESIS AND STUDY OF STEREOCHEMISTRY OF NINE NEW SUPRAMOLECULAR COMPOUNDS OF METHYLENE BLUE	
<i>Mukarram Kadirova and Vakhobjon Sabirov</i>	35
ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ДІЕТАНОЛАМІНІВ	
<i>Кац Андрій, Марія Мироняк, Гогунський Олександр, Олена Волнянська, Микола Ніколенко</i>	36
ПОРІВНЯННЯ РОЗРАХУНКОВОГО ТА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ІЧ СПЕКТРІВ КООРДИНАЦІЙНОЇ СПОЛУКИ ЦИННАМАТУ НІКЕЛЮ З ТІОСЕМІКАРБАЗИДОМ	
<i>Ковальов А. Ю., Кокишарова Т. В.</i>	37
КОМПЛЕКСИ ГЕРМАНІЮ(IV) З ГАЛОВОЮ КИСЛОТОЮ ТА ЇЇ ЕТИЛОВИМ ЕСТЕРОМ ЯК МОДИФІКАТОРИ ПОЛІГЛІКОЛЬМАЛЕЇНАТФТАЛАТІВ	
<i>Микола Мартинюк, Олена Марцинко, Олена Фінік, Євген Фадєєв, Інна Сейфулліна, Сергій Савін, Олеся Кіосе</i>	38
МОНІТОРИНГ ВМІСТУ АКТИВНИХ КОМПОНЕНТІВ ҐРУНТУ	
<i>Марія Мироняк, Єлизавета Прилуцька, Нікіта Гуназа, Оксана Лабяк, Микола Ніколенко</i>	39
CRYSTAL STRUCTURE OF 2-ETHYLHINAZOLON-4-ONE AND 2-BUTYLHINAZOLON-4-ONE	
<i>Davlatboyev Muzaffar¹, Tulkin Sattorov¹, Yakubov Ubaydullo²</i>	40
THE HETERONUCLEAR NMR AND X-RAY PHOTOELECTRON SPECTROSCOPY IN THE COORDINATION CHEMISTRY OF TRANSITION METAL COMPOUNDS	
<i>Svitlana Orysyk, Polina Novikova, Viktor Orysyk, Yurii Zborovskii, Myhailo Vovk</i>	41
АВ ІНІТІО ПОРІВНЯННЯ МАЛЕЇНАТНИХ π -АЦИДОАКВАКОМПЛЕКСІВ Cu^+ У ВОДНОМУ РОЗЧИНІ	
<i>Євген Осокін</i>	42
ДІАМІНОКАРБОНОВІ КОМПЛЕКСОНАТИ ГЕРМАНІЮ(IV) ЯК ПЕРСПЕКТИВНІ СТИМУЛЯТОРИ ФІЗІОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ РОСЛИН	
<i>Дмитро Печінка, Олена Марцинко, Олена Фінік, Інна Сейфулліна, Євген Фадєєв, Ольга Снурнікова, Олена Песарогло</i>	43
OBTAINING MODIFIED THICKENERS BY TOROCHEMICAL TRANSFORMATIONS ON A SOLID SURFACE	
<i>Anatoliy Ranskiy, Olha Sandul, Olga Gordienko, Taras Titov, Roksolana Korinenko</i>	44
ПОРФІРИНИ, КОРОЛИ ТА ФТАЛОЦІАНІНИ ЯК СЕНСИБІЛІЗАТОРИ 4f-ЛЮМІНЕСЦЕНЦІЇ	
<i>Микола Семенішин, Валерія Лінник, Наталя Русакова</i>	45
СТРУКТУРНІ ОСОБЛИВОСТІ π -КООРДИНАЦІЙНИХ СПОЛУК КУПРУМУ(I) З АЛІЛЬНИМИ ПОХІДНИМИ 1,2,4-ТРИАЗОЛУ	
<i>Юрій Сливка, Дмитро Дмитрів, Evgeny Goreshnik, Андрій Батюк</i>	46
НОВІ КОМПЛЕКСИ РІДКІШНОЗЕМЕЛЬНИХ МЕТАЛІВ З 3-(2-ПІРИДИЛ)-1,2,4-ТРИАЗОЛВМІСНИМ ЛІГАНДОМ ТА ЛЮМІНЕСЦЕНТНІ ГІБРИДНІ МАТЕРІАЛИ НА ЇХ ОСНОВІ	
<i>Сергій Смола, Олександр Коровін, Валерія Галущенко, Дмитро Хоменко, Ростислав Лампека, Наталя Русакова</i>	47
REGULARITIES OF FORMATION OF HETEROMETALLIC LUMINESCENT COMPLEXES OF LANTHANIDES AND 3d METALS WITH AMINOPOLYCARBOXYLIC ACIDS	
<i>Olena Trunova, Oleksandra Berezhnytska, Liudmyla Sliusarchuk, Tamara Makotryk</i>	48
FEATURES OF SYNTHESIS AND STRUCTURE OF COORDINATION POLYMER Ni(II) WITH 2-(4-BROMOPHENOXY)ACETONHYDRAZIDE	

<i>Kyrylo Tsymbaliuk, Olena Martsynko, Olena Finik, Mariia Nesterkina, Iryna Kravchenk, Viktoriya Dyakonenko, Svitlana Shishkina</i>	49
ВЗАЄМОДІЯ КЛАСТЕРУ РЕНІО(III) З СУРФАКТИНОМ <i>Олена Величко</i>	50

Секція 3

АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ТЕРМООБРОБКИ КРОХМАЛЮ <i>Дмитро Гречка, Вікторія Миргородська-Терентьєва, Микола Ніколенко</i>	52
4-ГІДРОКСИСТИРИЛОВІ БАРВНИКИ ЯК МУЛЬТИФУНКЦІОНАЛЬНІ ХЕМОСЕНСОРИ <i>Юлія Жукова, Ярослав Студеняк</i>	53
МІЦЕЛЯРНО-ЕКСТРАКЦІЙНЕ КОНЦЕНТРУВАННЯ ТА СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ГЕРМАНІЮ(IV) З ПОХІДНИМИ 6,7-ДИГІДРОКСИБЕНЗОПІРИЛІО <i>Олена Жуковецька, Олена Гузенко, Денис Снігур, Тетяна Щербакова</i>	54
COMPOSITION OF THE MEMBRANE OF A POTENTIOMETRIC SENSOR WITH OPTIMUM ELECTROACTIVE CHARACTERISTICS <i>Oksana Ivanenko, Olena Volnyanska, Maria Mironyak, Oksana Labyak, Mykola Nikolenko</i>	55
SYNTHESIS OF SiO ₂ WITH COVALENTLY IMMOBILIZED 1,10-PHENANTHROLINE DERIVATIVES: USEFUL INDICATOR SYSTEM FOR <i>IN SITU</i> PRECONCENTRATION AND DETERMINATION OF METAL IONS IN AQUEOUS SOLUTION <i>Natalia Kobylinska, Victor Demchenko, Victor Chernii</i>	56
ВИЗНАЧЕННЯ ВМІСТУ ІОНІВ ВАЖКИХ МЕТАЛІВ (Cu, Pb, Cd, Zn) І КИСНЮ В РІДИНАХ ІНВЕРСІЙНИМИ ФОТО- ТА ЕЛЕКТРОХІМІЧНИМ МЕТОДАМИ <i>Геннадій Колбасов, Віра Воробець, Ірина Медик, Сергій Фоманюк</i>	57
ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНИЙ СЕНСОР ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ НАФАЗОЛІНУ <i>Жолт Кормош, Наталія Кормош, Наталія Горбатюк, Юлія Бохан, Володимир Ткач</i>	58
ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНИЙ СЕНСОР ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ФЕНОПРОФЕНУ <i>Жолт Кормош, Наталія Кормош, Наталія Горбатюк, Юлія Бохан, Володимир Ткач</i>	59
ВЛАСТИВОСТІ ПОПЕРЕЧНОЗШИТИХ МОДИФІКОВАНИХ КРОХМАЛІВ <i>Кіра Миргородська, Микола Ніколенко, Валентина Вечерова</i>	60
ОСОБЛИВОСТІ УТВОРЕННЯ ТА ЕКСТРАКЦІЇ Pd(II) У ФОРМІ ІОННОГО АСОЦІАТУ З КАТІОННИМ РОЖЕВИМ 2С <i>Вячеслав Міллер, Олена Гузенко, Денис Снігур</i>	61
МІЦЕЛЯРНО-ЕКСТРАКЦІЙНЕ ВИЛУЧЕННЯ ТА СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ХАРЧОВОГО БАРВНИКА ЖОВТИЙ «ЗАХІД СОНЦЯ» <i>Кирило Снігур, Олена Гузенко, Денис Снігур, Олена Рахлицька</i>	62
МОДИФІКАЦІЯ КРОХМАЛІВ МЕТОДОМ ЕКСТРУЗІЙНОЇ ОБРОБКИ <i>Вячеслав Терентьєв, Микола Ніколенко, Вікторія Миргородська-Терентьєва</i>	63
ТЕОРЕТИЧНИЙ ОПИС ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ АНТИГЕЛЬМІНТНОГО ПРЕПАРАТУ АЛЬБЕНДАЗОЛ НА ЕЛЕКТРОДІ, МОДИФІКОВАНОМУ ПОЛІ(АКРИДИНОВИМ ПОМАРАНЧЕВИМ) <i>Володимир Ткач, Жозе Інасіу Ф. Мартініш, Тетяна Морозова, Мехмет Тюркменоглу, Яна Іванушко</i>	64

ТЕОРЕТИЧНИЙ ОПИС КАТОДНОГО ВІДНОВЛЕННЯ БУНОДОЗИНУ-391 – ТОКСИНУ ГІДРИ <i>Володимир Ткач, Марта Кушнір, Сільвіо С. де Олівейра, Марія Жуау Монтейру, Яна Іванушко, Адріано О. да Сілва, Петро Ягодинець, Жолт Кормош, Ольга Луганська, Жозе Інасіу Феррау да Пайва Мартініш</i>	65
ЕКСТРАКЦІЙНІ ВЛАСТИВОСТІ (ГЛИБОКО)ЕВТЕКТИЧНИХ РОЗЧИННИКІВ НА ОСНОВІ МЕНТОЛУ ВІДНОСНО КАТІОНІВ МЕТАЛІВ <i>Маргарита Чернякова, Костянтин Беліков</i>	66
ОСОБЛИВОСТІ УТВОРЕННЯ ТА ХІМІКО-АНАЛІТИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ІОННОГО АСОЦІАТУ ТЕТРАЙОДОКАДМІАТУ(II) З ХІНАЛЬДІНОВИМ ЧЕРВОНИМ <i>Єлизавета Шевченко, Іван Кіртока, Денис Снігур</i>	67

Секція 4

ОРГАНІЧНА ТА ФАРМАЦЕВТИЧНА ХІМІЯ

SYNTHESIS AND BIOLOGICAL ACTIVITY OF QUINOID COMPOUNDS <i>Avdeenko Anatoly, Konovalova Svetlana, Komarovska-Porokhnyavets Olena, Baranovych Diana, Lubenets Vira</i>	69
АНТИОКСАДАНТНА АКТИВНІСТЬ N-ГЕТЕРИЛ- І N-ЕТИЛКСАНТОГЕНАТО-1,4-БЕНЗОХІНОНІМІНІВ <i>Анатолій Авдєєнко, Світлана Коновалова, Сергій Коваленко, Наталія Стадницька, Юрій Семенчук, Віра Лубенець</i>	71
PREDICTION OF PHARMACOKINETIC PARAMETERS OF XANTHENE DERIVATIVES <i>Svitlana Varenuchenko, Karolina Yanova, Oleg Farat</i>	72
ДОСЛІДЖЕННЯ АНТИОКСИДАНТНОЇ ТА АНТИГІПОКСИЧНОЇ АКТИВНОСТІ В РЯДУ 4-((7-ЕТИЛ-3,7-ДИГІДРО-3-МЕТИЛ-1H-ПУРИН-2,6- ДІОН-8-ІЛ)АМІНО)КАРБОНОВИХ КИСЛОТ <i>Ірина Галиця, Тетяна Дюжикова</i>	73
ОСОБЛИВОСТІ СИНТЕЗУ D-ІЗОМЕРУ (2-МЕТИЛАМІНО)-1- ФЕНІЛПРОПАН-1-ОЛУ ЗА ПРИНЦИПОМ «ONE-POT SYNTHESIS» <i>Володимир Донець, Вадим Галиця</i>	74
ПОШУК БЛОКАТОРІВ КАЛЬЦІЄВИХ КАНАЛІВ L-ТИПУ В РЯДУ НЕСИМЕТРИЧНИХ АНАЛОГІВ НІФЕДПІНУ <i>Ірина Журавель, Анна Гелеверя, Сергій Коваленко, Ігор Білов, Олександр Кириченко</i>	75
ПЛАНАРНІ ГЕТЕРОЦИКЛІЧНІ СПОЛУКИ ЯК ІНТЕРКАЛЯТОРИ ДНК ТА ПОТЕНЦІЙНІ ТЕРАПЕВТИЧНІ АГЕНТИ <i>Олександр Карпенко</i>	76
STANDARDIZATION TINCTURE OF RHIZOME WITH THE ROOTS OF SANGUISORBA OFFICINALIS <i>Tetiana Oproshanska, Olga Khvorost, Kateryna Skrebtsova</i>	77
NOVEL LIGANDS FOR OREXIN 2 RECEPTOR: A MODEL STUDY <i>Mykyta Prud, Vira Morozova</i>	78
НОВІ БІОЛОГІЧНО АКТИВНІ АМІДИ ІНДЕНОХІНОКСАЛІН-6- КАРБОНОВОЇ КИСЛОТИ: СИНТЕЗ, ВЛАСТИВОСТІ ТА АФІНІТЕТ ДО ДНК <i>Кирило Сазонов, Юрій Ішков, Ольга Шевченко</i>	79
SOIL CONDITIONERS BASED ON MIXED GELS OF CALCIUM ALGINATE WITH PECTIN AND GELLAN <i>Kateryna Samchenko, Olena Goncharuk, Liudmyla Kernosenko, Yuriy Samchenko</i>	80
FLAVONOIDS OF <i>OXYTROPIS MACROCARPA</i> <i>Sulaymonov Sheali Abdupattayevich, Abdullaev Shavkat Vaxidovich</i>	81

ANTIMICROBIAL ACTIVITY OF THIENOPYRIMIDINE DERIVATIVES <i>Yulia Tkachenko, Svitlana Varenychenko, Karolina Yanova, Oleg Farat</i>	82
СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ ПРОДУКТІВ КОНДЕНСАЦІЇ ЗАМІЩЕНИХ НАФТАЛЕВИХ АНГІДРИДІВ З АЛІФАТИЧНИМИ ТА АРОМАТИЧНИМИ ДІАМІНАМИ <i>Надія Федько, Віра Ведута, Валерій Ластеженко</i>	83
IN SILICO ACTIVITY PREDICTION OF PERSPECTIVE THIOSULFONATE COMPOUND <i>Liubov Fizer, Sofiya Vasylyk, Nataliya Monka, Vira Lubenets</i>	84
КИСЛОТНО-ОСНОВНІ ВЛАСТИВОСТІ ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНИХ ПАР У МІЦЕЛЯРНИХ СИСТЕМАХ <i>Олександр Шумейко, Миколо Бураков</i>	85
РЕГІОСЕЛЕКТИВНИЙ АЦЕТОЛІЗ ЕПІХЛОРОГІДРИНУ У ПРИСУТНОСТІ МЕТАЛОКОМПЛЕКСІВ САЛОФЕНУ <i>Ксенія Ютілова, Олена Швед, Денис Соколовський, Ягельський Євген</i>	86

Секція 5

ФІЗИЧНА ТА КОЛОЇДНА ХІМІЯ

ХІМІЯ ВИСОКОМОЛЕКУЛЯРНИХ СПОЛУК

ДОСЛІДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОХІМІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ І СТАБІЛЬНОСТІ НОВИХ ЕЛЕКТРОДІВ НА ОСНОВІ ВУГЛЕЦЕВИХ І ПРОЗОРИХ ПРОВІДНИХ МАТЕРІАЛІВ <i>Бохан Ю.В.</i>	88
ВПЛИВ ПРИРОДИ РОЗЧИННИКА НА МОЛЕКУЛЯРНУ МАСУ СИНТЕЗОВАНИХ ПОЛІМЕРНИХ ІОННИХ РІДИН ІОНЕНОВОГО ТИПУ <i>Борис Буркевич, Максим Потапчук, Ольга Свердліковська</i>	89
ВІСКОЗИМЕТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ПОЛІМЕРНИХ ІОННИХ РІДИН ІОНЕНОВОГО ТИПУ <i>Богдан Вовчук, Максим Потапчук, Ольга Свердліковська</i>	90
ПРОСТОРОВА БУДОВА, ТЕРМОДИНАМІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТА КОЛИВАЛЬНІ СПЕКТРИ НАНОЧАСТИНОК ГІДРОКСИДУ КАЛШО <i>Анатолій Гребенюк</i>	91
СИНТЕЗ НАНОЧАСТИНОК СРІБЛА З ВИКОРИСТАННЯМ ЯК ВІДНОВНИКА СУМІШІ ОЛІГОМЕРНИХ СІЛСЕСКВІОКСАНІВ, ЩО МІСТЯТЬ В ОРГАНІЧНІЙ СКЛАДОВІЙ ТРЕТИННІ АТОМИ АЗОТУ І ГІДРОКСИЛЬНІ ГРУПИ <i>Мар'яна Гуменна, Олександр Стрюцький, Андрій Пилипенко, Едуард Лисенков, Валерій Шевченко</i>	92
НАНОКОМПОЗИТНІ КАТАЛІЗАТОРИ НА ОСНОВІ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБОК ТА ОКСИДУ АЛЮМІНІЮ ДЛЯ БЕЗОКИСНОГО ДЕГІДРУВАННЯ МЕТАНОЛУ <i>Олексій Жох, Ігор Бичко, Петро Стрижак</i>	93
ВНУТРІШНЬО-ДИФУЗІЙНА ДИСКРИМІНАЦІЯ КІНЕТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ДЕГІДРУВАННЯ МЕТАНОЛУ НА ЦЕОЛІТІ H-ZSM-5 <i>Олексій Жох, Андрій Трипольський, Петро Стрижак</i>	94
ДІЛАТАЦІЙНА В'ЯЗКОПРУЖНІСТЬ АДСОРБЦІЙНИХ ШАРІВ ПАР НА ПОВЕРХНЯХ МАСТИЛО/ВОДА <i>Володимир Ковальчук, Джузеппе Логліо, Євген Аксененко, Франческа Равера, Ліберо Ліггієрі, Емануель Шнек, Райнхард Міллер</i>	95
ТЕРМОДИНАМІЧНА СПОРІДНЕНІСТЬ ВИСОКО- ТА НИЗЬКОКРЕМНІЄВИХ КЛІНОПТИЛОЛІТІВ ДО КАТІОНІВ K ⁺	96

<i>Крисенко Д. А., Демченко В. Я.</i>	
ZINC FERRO- AND FERRICYANIDES FROM POINT OF COLLOID CHEMISTRY VIEW	
<i>Anna Laguta, Petra van Koningsbruggen</i>	97
ПОРІВНЯННЯ АДСОРБЦІЙНОЇ АКТИВНОСТІ ЕНТЕРОСОРБЕНТІВ НА ОСНОВІ АКТИВОВАНОГО ВУГІЛЛЯ І ДІОКСИДУ КРЕМНІЮ	
<i>Любомир Луканюк, Ігор Микитин, Ірина Прокіпчук</i>	98
ULTRAFILTRATION MEMBRANES PRODUCED BY 3D PRINTING FROM POLYLACTIC ACID	
<i>L.C.A. Molina, L.G. de Souza Bairros, G.A.V. Magalhães-Ghiotto, A. Diorio</i>	
<i>C. Moser Paraíso, Yu.S. Dzyazko, A.M.S. Vieira, R. Bergamasco</i>	99
СТРУКТУРНО-МЕХАНІЧНІ ТА ЛІКУВАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ ЛІКУВАЛЬНОЇ КОМПОЗИЦІЇ МОДИФІКОВАНОЇ НАНОРОЗМІРНИМИ МАТЕРІАЛАМИ	
<i>Андрій Панько, Ігор Ковзун, Ігор Затовський, Віталій Прокопенко, Олена Циганович</i>	100
СОРБЦІЙНА ФЛОТАЦІЯ – ПЕРСПЕКТИВНИЙ МЕТОД ОЧИЩЕННЯ ТЕХНОГЕННИХ ТА СТИЧНИХ ВОД ВІД УРАНУ(VI) І ТОРІЮ(IV)	
<i>Перлова О. В.</i>	101
КІНЕТИКА, РІВНОВАГА ТА МЕХАНІЗМ АДСОРБЦІЇ МЕТАЛІВ ІІІ В ГРУПИ ЦИРКОНІЙ-КРЕМНЕЗЕМНИМ НАНОСОРБЕНТОМ	
<i>Перлова О. В.</i>	102
СИНТЕЗ ІОННИХ РІДИН ІОНЕНОВОГО ТИПУ НА ОСНОВІ ПОХІДНИХ ТЕТРАГІДРО-1,4-ОКСАЗИНУ	
<i>Максим Потапчук, Ольга Сverdліковська</i>	103
ФОРМУВАННЯ НАНОЧАСТИНОК СЕЛЕНУ ТА ЇХ ВИКОРИСТАННЯ В МЕДИЦИНІ	
<i>В.А. Прокопенко, О.А. Циганович</i>	104
ZIRCONIUM PHOSPHATE COMPOSITE-REINFORCED POLYTETRAFLUOROETHYLENE (PTFE) MEMBRANES FOR FILTRATION	
<i>Luidmyla Rozhdestvenska, Kateryna Kudelko, Oleksandr Tymoshenko, Olexiy Palchik</i>	105
МОДИФІКАЦІЯ НЕНАСИЧЕНИХ ОЛІГОЕСТЕРІВ БІМЕТАЛЕВИМИ КОМПЛЕКСАМИ Ge(IV) ТА Sn (IV) ДЛЯ БЕЗПЕЧНОГО ЗАТВЕРДЖЕННЯ ПОЛІМЕРНИХ СИСТЕМ ПІДВИЩЕНОГО ОБ'ЄМУ В НЕІЗОТЕРМІЧНОМУ РЕЖИМІ	
<i>Сергій Савін, Олеся Кіосе, Інна Сейфулліна, Олена Марцінко</i>	106
АДСОРБЦІЙНЕ ВИЛУЧЕННЯ АНТОЦΙΑНІВ ЧЕРВОНОЇ ТРОЯНДИ НА ВОЛОКНИСТОМУ КАТІОНІТІ ФИБАН К-1	
<i>Людмила Солдаткіна, Вікторія Літвінова</i>	107
ADSORPTION CHARACTERISTICS OF ACID ACTIVATED LAPONITE® PLATELETS	
<i>Olena Solovieva, Yurii Samchenko, Liudmyla Kernosenko, Irina Ganusevich, Olena Samoilenko</i>	108
FLUORINATED POLY(URETHANE-UREA)S MEDICAL APPLICATION: SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION	
<i>Oleg Shekera, Valery Muzhev, Oleksii Motailo, Lilie Krynychko, Volodumur Mushak</i>	109
HEMOCOMPATIBLE FLUORINE-CONTAINING POLY(URETHANE-UREA)S AS COATING INTRAVASCULARE STENT: SYNTHESIS AND <i>IN VIVO</i> INVESTIGATION	
<i>Oleg Shekera, Valery Muzhev, Tatiana Goridko, Volodumur Mushak</i>	110
SYNTHESIS AND PROPERTIES NEW FLUORINE-CONTAINING SEGMENTED POLYURETHANE MEDICAL APPLICATION	111

<i>Oleg Shekera, Valery Muzhev, Tatiana Goridko, Vita Semynoh, Volodumur Mushak</i> СОРБЦІЙНА ТА ФЛОКУЛЯЦІЙНА ЗДАТНІСТЬ СИСТЕМ ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНА РЕЧОВИНА - ПОЛІЕЛЕКТРОЛІТ <i>Алла Тимчук, Василь Менчук</i>	112
МЕТАЛОПОЛІМЕРНІ КОМПОЗИТИ НА ОСНОВІ ТРИЕТИЛЕНГЛІКОЛЬДИМЕТАКРИЛАТУ ТА ФЕРИТУ КОБАЛЬТУ <i>Галина Хованець, Олена Макідо</i>	113
НАНОРОЗМІРНІ ЧАСТИНКИ ЗОЛОТА ТА СРІБЛА В РОСЛИННОМУ ЕКСТРАКТІ ЯК СКЛАДОВА ЛІКАРСЬКОГО ЗАСОБУ «КОАГУЛОКС_Н» <i>О.А. Циганович, С.М. Дибкова, Л.С. Рєзніченко, В.А. Прокопенко, І.В. Затовський</i>	114
ВИЗНАЧЕННЯ КОНСТАНТ КОПОЛІМЕРИЗАЦІЇ АЛІЛ- β -ДИКЕТОНІВ ЗІ СТИРОЛОМ МЕТОДОМ ФАЙНМАНА-РОССА <i>Ольга Шевченко</i>	115

Секція 6

ХІМІЧНІ АСПЕКТИ ЕКОЛОГІЇ

МОНІТОРИНГ КОНЦЕНТРАЦІЙ ЗАБРУДНЮВАЧІВ У АТМОСФЕРНОМУ ПОВІТРІ м. СУМИ <i>Анастасія Вініченко, Людмила Пономарьова</i>	117
БІОСЕНСОРНИЙ БІОЛЮМІНЕСЦЕНТНИЙ АНАЛІЗ В ОЦІНЦІ ЕКТОКСИЧНОСТІ ҐРУНТІВ СІЛЬСЬКОГОСПОДАРСЬКОГО ПРИЗНАЧЕННЯ <i>Тамара Грузіна, Людмила Рєзніченко, Олена Нікіпелова, Катерина Губіна, Зоя Ульберг, Світлана Дибкова</i>	118
POLYTYPE DIVERSITY OF THE HYDROTALCITE-LIKE Mg,Fe-LAYERED DOUBLE HYDROXIDE MATERIALS: SYNTHESIS, STRUCTURE AND ADSORPTION ACTIVITY TOWARD IBUPROFEN <i>Tetiana Hubetska, Victor Demchenko, Natalia Kobylinska</i>	119
THE LATEST TECHNOLOGIES OF POLYOLEFIN WASTE PROCESSING <i>Anatoliy Ranskiy, Bohdan Korinenko, Roksolana Korinenko, Olha Sandul</i>	120
DEVELOPMENT OF GREEN PROTOCOLS FOR THE SYNTHESIS OF PLASMONIC NANOPARTICLES <i>R. Mariychuk, R. Smolkova, A. Eliasova, L.M. Grishchenko, and V.V. Lisnyak</i>	121
НАУКОВО-ОБҐРУНТОВАНИЙ ПІДХІД ДО ВИБОРУ МЕТОДУ ОЧИСТКИ ВОДИ ВІД АНТИСЕПТИКІВ НА ОСНОВІ КАТІОННИХ ПАР <i>Олена Стрельцова, Ольга Волювач</i>	122
ОГЛЯД МЕТОДІВ ОЧИЩЕННЯ ПРОМИСЛОВИХ СТІЧНИХ ВОД <i>Вадим Федін, Інна Трус</i>	123
ІНДИКАТОРНІ ХЕМОСОРБЕНТИ ДІОКСИДУ СІРКИ АБО/І АМІАКУ <i>Руслан Хома, Тетяна Бєньковська, Олена Ватраль, Сергій Водзінський</i>	124
ЦИТРАТИ НАТРІЮ, МОНОЕТАНОЛАМОНІЮ ТА ПОЛІЕТИЛЕНПОЛІАМОНІЮ ЯК ХЕМОСОРБЕНТИ ДІОКСИДУ СІРКИ <i>Тетяна Бєньковська, Руслан Хома, Катерина Циганенко, Анастасія Карич, Анастасія Кононченко, Ганна Кірюшкіна, Сергій Топоров</i>	125

Секція 7

ІННОВАЦІЇ В ХІМІЧНІЙ ОСВІТІ

ПРАКТИКУМ ДЛЯ ШКОЛЯРІВ НА БАЗІ УНІВЕРСИТЕТУ <i>Большаніна С.Б., Диченко Т.В., Пономарьова Л.М., Яновська Г.О.</i>	127
ДОСВІД ПРАКТИЧНОГО ВПРОВАДЖЕННЯ МЕТОДУ МОДЕЛЮВАННЯ ТА	128

АНАЛОГІЙ ПРИ ВИВЧЕННІ ОКРЕМИХ ТЕМ В КУРСІ «НЕОРГАНІЧНА ХІМІЯ» <i>Вадим Галиця, Юлія Ніколаєва</i>	
ОСВІТНІЙ ПРОСТІР LvivOpenLab – МІЖ ШКОЛОЮ ТА УНІВЕРСИТЕТОМ <i>Григорій Дмитрів, Микола Лехновський</i>	129
ПІДВИЩЕННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ ВИВЧЕННЯ ЛАТИНСЬКОЇ ФАРМАЦЕВТИЧНОЇ ТЕРМІНОЛОГІЇ ЗА ДОПОМОГОЮ ІНТЕРАКТИВНИХ МЕТОДІВ НАВЧАННЯ <i>Лариса Миронова, Вікторія Ульянова</i>	130
DIGITAL TRANSFORMATION OF THE COURSE "STRUCTURAL AND SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY" TO MEET THE NEEDS OF DISTANCE LEARNING <i>Serhii Radio, Kateryna Loza, Oleg Prymak</i>	131
МОЖЛИВОСТІ ГРУПОВОЇ РОБОТИ ДЛЯ КОМУНІКАЦІЇ ЗДОБУВАЧІВ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ В УМОВАХ ДИСТАНЦІЙНОГО НАВЧАННЯ <i>Олександра Семерик</i>	132
ВПРОВАДЖЕННЯ STEM-ТЕХНОЛОГІЙ НА УРОКАХ ХІМІЇ В ЗАКЛАДАХ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ <i>Олексій Сергєєв</i>	133
ФРАЗЕОЛОГІЗМИ УКРАЇНСЬКОЇ МОВИ ЯК БАЗА ДЛЯ ІНТЕГРОВАНОГО НАВЧАННЯ ХІМІЇ <i>Володимир Ткач, Марта Кушнір, Галина Фурдига, Діана Багрій</i>	134
ВИКОРИСТАННЯ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ НА ЗАНЯТТЯХ ІЗ ЛАТИНСЬКОЇ Й АНГЛІЙСЬКОЇ МОВ У ФАРМАЦЕВТИВ-ХІМІКІВ <i>Вікторія Ульянова, Лариса Миронова</i>	135
ПРОБЛЕМНЕ НАВЧАННЯ У КУРСІ «ОСНОВИ НАУКОВИХ ДОСЛІДЖЕНЬ» <i>Михайло Філеп, Золтан Чома, Єва Бак</i>	136
МЕТОД НАВЧАЛЬНИХ КЕЙСІВ В ОПАНУВАННІ ХІМІЧНИХ ДИСЦИПЛІН <i>Тетяна Дюжикова, Тетяна Четвертак</i>	137

Наукове видання

ІННОВАЦІЙНІ НАПРЯМИ РОЗВИТКУ ХІМІЇ - 2024

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

І наукової конференції з міжнародною участю

9 -11 вересня 2024 року, Одеса

Електронне видання мережевого використання

Під редакцією :

к.х.н., доц. **Менчука** Василя Васильовича

д.х.н., проф. **Марцинко** Олени Едуардівни

к.х.н., доц. **Гузенко** Олени Михайлівни

к.х.н., доц. **Тимчук** Алли Федорівни

к.х.н., доц. **Снігура** Дениса Васильовича

Затвердж. авт. 27.09.2024. Шрифт Times New Roman
Системні вимоги: операційна система сумісна з програмним
забезпеченням для читання файлів формату PDF.

Обсяг 4,27 МБ. Зам. № 2877

Видавець і виготовлювач:

Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

65082, Україна, м. Одеса, вул. Університетська, 12

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 4215 від 22.11.2011 р.

Тел.: (048) 723 28 39, E-mail:druk@onu.edu.ua