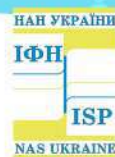


Міністерство освіти і науки України  
Житомирський державний університет імені Івана Франка  
Національний університет "Києво-Могилянська академія"  
Донецький національний університет імені Василя Стуса  
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького  
Інститут фізики напівпровідників НАН України  
Інститут хімії поверхні НАН України



## ІХ ВСЕУКРАЇНСЬКА НАУКОВА КОНФЕРЕНЦІЯ



**АКТУАЛЬНІ ЗАДАЧІ ХІМІЇ:**  
**ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ПЕРСПЕКТИВИ**

**МАТЕРІАЛИ КОНФЕРЕНЦІЇ**

Житомир  
2025

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
ЖИТОМИРСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА  
НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ “КИЄВО-МОГИЛЯНСЬКА АКАДЕМІЯ”  
ДОНЕЦЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТУСА  
ЧЕРКАСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ БОГДАНА ХМЕЛЬНИЦЬКОГО  
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ НАПІВПРОВІДНИКІВ НАН УКРАЇНИ  
ІНСТИТУТ ХІМІЇ ПОВЕРХНІ НАН УКРАЇНИ

## ***IX ВСЕУКРАЇНСЬКА НАУКОВА КОНФЕРЕНЦІЯ***

### **«АКТУАЛЬНІ ЗАДАЧІ ХІМІЇ: ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ПЕРСПЕКТИВИ» ЗБІРНИК МАТЕРІАЛІВ КОНФЕРЕНЦІЇ**



**9 квітня 2025 р.**

**м. Житомир**

**Житомир**

УДК 061 54(06)  
ББК Гя431  
А 43

*Рекомендовано до друку рішенням Вченої ради Житомирського державного університету імені Івана Франка (протокол № 5 від 28 березня 2025 року).*

*Посвідчення про реєстрацію в УкрІНТЕІ № 82 від 27 січня 2025 р.*

**IX Всеукраїнська наукова конференція «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи» (9 квітня 2025 року).**

Матеріали конференції. – Житомир: Житомирський державний університет імені Івана Франка, 2025. – 347 с., іл.

Збірник містить тези доповідей, у яких викладені результати наукових досліджень у галузях неорганічної та фізичної хімії, матеріалознавства та нанотехнологій, аналітичної хімії та хімії навколишнього середовища, хімії органічних та високомолекулярних сполук, теорії та методики навчання хімії. Дослідження виконані у навчальних закладах та наукових установах України та за кордоном.

Матеріали друкуються в авторській редакції.

*Конференцію проведено відповідно до плану проведення наукових конференцій з проблем вищої освіти і науки в системі Міністерства освіти і науки України на 2025 рік*

#### **Співорганізатори конференції:**

Національний університет "Києво-Могилянська академія"  
Донецький національний університет ім. В. Стуса  
Черкаський національний університет ім. Б. Хмельницького  
Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України  
Інститут хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України

**Підтримка конференції:** ТОВ «УкрХімАналіз»

**Укладачі:** *Н.В.Кусяк, В.В.Листван, О.Ю.Кичкирук*

#### **Рецензенти збірника:**

- *Старостенко Ольга Миколаївна* – кандидат хімічних наук, старший науковий співробітник відділу термостійких полімерів і нанокompозитів Інституту хімії високомолекулярних сполук НАН України, старший дослідник.
- *Прокопенко Сергій Леонідович* – кандидат хімічних наук, старший науковий співробітник відділу наноматеріалів Інституту хімії поверхні ім.О.О.Чуйка НАН України;
- *Заблоцька Ольга Сергіївна* – доктор педагогічних наук, професор, завідувач кафедри технологій медичної діагностики, реабілітації та здоров'я людини Житомирського медичного інституту Житомирської обласної ради

#### **Адреса редколегії:**

10008, м. Житомир, вул. Університетська, 42,  
природничий факультет Житомирського державного університету  
імені Івана Франка.

ISBN 978-966-485-297-2

© Житомирський державний університет імені Івана Франка,  
2025

## НАУКОВИЙ КОМІТЕТ КОНФЕРЕНЦІЇ

|                                      |                                                                                                                                                                                                                      |
|--------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <i>Киричук Галина Євгеніївна</i>     | ректор ЖДУ імені Івана Франка, д.б.н., проф., (голова);                                                                                                                                                              |
| <i>Анічкіна Олена Василівна</i>      | завідувач кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка, к.п.н., доц.;                                                                                                                                                        |
| <i>Вакулюк Поліна Василівна</i>      | завідувач кафедри хімії НаУКМА, д.т.н., проф.;                                                                                                                                                                       |
| <i>Гетьман Євген Іванович</i>        | професор кафедри фундаментальної та прикладної хімії факультету хімії, біології і біотехнологій ДонНУ імені Василя Стуса, д.х.н., проф.;                                                                             |
| <i>Голуб Олександр Андрійович</i>    | професор кафедри хімії НаУКМА, д.х.н., проф.;                                                                                                                                                                        |
| <i>Горбик Петро Петрович</i>         | зав. відділу наноматеріалів, заступник директора Інституту хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України, д.ф.-м.н., проф., чл.-кор. НАН України;                                                                         |
| <i>Жильцова Світлана Віталіївна</i>  | в.о. директора навчально-наукового інституту розвитку академічного потенціалу, доцент кафедри фундаментальної та прикладної хімії факультету хімії, біології і біотехнологій ДонНУ імені Василя Стуса, к.х.н., доц.; |
| <i>Картель Микола Тимофійович</i>    | почесний директор Інституту хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України, д.х.н., проф., акад. НАН України;                                                                                                              |
| <i>Кичирук Ольга Юріївна</i>         | доцент кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка, к.х.н.;                                                                                                                                                                 |
| <i>Кусяк Наталія Володимирівна</i>   | доцент кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка, к.х.н.;                                                                                                                                                                 |
| <i>Листван Віталій Володимирович</i> | доцент кафедри хімії ЖДУ імені Івана Франка, к.х.н.;                                                                                                                                                                 |
| <i>Маланич Галина Петрівна</i>       | заступник керівника відділу хімії і технології напівпровідників Інституту фізики напівпровідників ім. В.Є.Лашкарьова НАН України, к.х.н.                                                                             |
| <i>Мінаєв Борис Пилипович</i>        | професор кафедри хімії та наноматеріалознавства ЧНУ імені Богдана Хмельницького, д.х.н, проф.;                                                                                                                       |
| <i>Радіо Сергій Вікторович</i>       | проректор з наукової роботи, доцент кафедри фундаментальної та прикладної хімії факультету хімії, біології і біотехнологій ДонНУ імені Василя Стуса, к.х.н., доц.;                                                   |
| <i>Розанцев Георгій Михайлович</i>   | завідувач кафедри фундаментальної та прикладної хімії факультету хімії, біології і біотехнологій ДонНУ імені Василя Стуса, д.х.н., проф.;                                                                            |
| <i>Романюк Руслана Костянтинівна</i> | декан природничого факультету, к.б.н., д.п.н., проф.;                                                                                                                                                                |
| <i>Томашик Василь Миколайович</i>    | провідний науковий співробітник відділу хімії і технології напівпровідників Інституту фізики напівпровідників ім. В. Є. Лашкарьова НАН України, д.х.н., проф.;                                                       |
| <i>Туров Володимир Всеволодович</i>  | директор Інституту хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України, д.х.н., проф., акад. НАН України;                                                                                                                       |
| <i>Тьортих Валентин Анатолійович</i> | зав. відділу хемосорбції та гібридних матеріалів Інституту хімії поверхні ім. О.О.Чуйка НАН України, д.х.н., проф.;                                                                                                  |
| <i>Чеканов Максим Олександрович</i>  | науковий співробітник Vertex Pharmaceuticals (USA), к.х.н.;                                                                                                                                                          |
| <i>Чумак Володимир Валентинович</i>  | проректор з навчально-методичної та виховної роботи ЖДУ імені Івана Франка, к.х.н., доц.;                                                                                                                            |
| <i>Шендрик Олександр Миколайович</i> | в.о. декана факультету хімії, біології і біотехнологій, професор кафедри біофізичної хімії, фізики і педагогіки ДонНУ імені Василя Стуса, д.х.н., проф.                                                              |

# **МАТЕРІАЛИ КОНФЕРЕНЦІЇ**

**АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ**

**ТА ХІМІЯ НАВКОЛИШНЬОГО**

**СЕРЕДОВИЩА**

## APPLICATION OF METAL NANOPARTICLES FOR WATER PURIFICATION

*Bityutskyy V.S., Tsekhmistrenko S.I., Tsekhmistrenko O.S.*

Bila Tserkva National Agrarian University, [voseb@ukr.net](mailto:voseb@ukr.net)

Water purification is one of the key environmental problems of our time, which requires the introduction of innovative technologies to increase the efficiency of contaminant removal, including organic and inorganic pollutants, microbial pathogens and heavy metals. The use of metal nanoparticles in water treatment systems can significantly increase the level of purification due to their unique physical and chemical properties, including high catalytic activity, sorption capacity and antibacterial characteristics [6]. Nanoparticles of silver, iron, copper, titanium and their oxides are widely used to remove specific groups of pollutants due to their ability to photocatalyse, reduce and adsorb. For example, zero-valent iron nanoparticles demonstrate high efficiency in the reduction of toxic heavy metal ions, and  $\text{TiO}_2$  nanoparticles are actively used for the photocatalytic oxidation of organic pollutants under UV radiation. In addition, in recent years, there has been a growing interest in combined nanomaterials that combine several functional properties, such as magnetic nanoparticles coated with photocatalytic layers, which provide effective reduction and destruction of toxic substances.

The use of nanoparticles in water treatment is of particular importance during wartime and post-war periods, when there is a significant disruption of critical infrastructure and deterioration in the quality of drinking water. The destruction of industrial facilities, oil storage facilities and wastewater treatment plants leads to the contamination of water resources with a wide range of toxic compounds, including oil products, heavy metals and organic toxicants. In such conditions, the use of autonomous purification systems based on nanotechnology is key to ensuring the vital activity of the population. Mobile nanofiltration plants can be deployed in areas of environmental disaster to quickly remove harmful compounds and disinfect water. In addition, it is promising to combine nanotechnology with traditional purification methods to increase their efficiency and economic viability. Modern developments also focus on the use of hybrid nanomaterials that combine photocatalytic and biocidal properties, which can be useful for water disinfection in crisis conditions [7].

Among the advanced areas of water treatment technology development is the synthesis of nanoparticles using 'green' methods based on the use of biogenic agents such as plant extracts, microorganisms or enzymes [1]. The use of such technologies eliminates the need for toxic reagents and minimises the environmental risks associated with the production of nanomaterials. Green synthesis not only helps to reduce the cost of nanoparticles, but also increases their biocompatibility, which reduces the risk of negative impact on aquatic ecosystems. In addition, the resulting nanoparticles may have improved physicochemical characteristics, such as increased surface activity and selective sorption of specific pollutants, making them particularly effective in removing organic trace contaminants and heavy metal ions [2].

The use of different types of nanoparticles in water treatment can achieve different goals depending on the nature of the contaminants. For example, titanium oxide ( $\text{TiO}_2$ ) nanoparticles are widely used in photocatalytic systems because they are activated by ultraviolet radiation and are capable of decomposing organic compounds into safe products. Silver nanoparticles have powerful antimicrobial properties and are used to disinfect water from pathogens. Magnetic nanoparticles, such as magnetite ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ), are highly effective in removing heavy metals due to the ability to easily extract them from the medium using an external magnetic field. Zero-valent iron nanoparticles are used to remediate toxic pollutants such as arsenic or chromium (VI) by reducing them to less toxic forms. The combination of these nanomaterials in multi-component systems can provide a synergistic effect and increase the efficiency of water treatment even in difficult conditions [4].

From an economic point of view, the use of nanoparticles in water treatment technologies is cost-effective due to the reduction in reagent and energy costs compared to traditional treatment methods [3]. In particular, the introduction of nanotechnology can reduce the use of chemical coagulants and flocculants, as well as reduce the amount of secondary waste generated, which is an

important aspect for industrial enterprises and municipal water supply systems. Analytical studies show that the combined use of nanoparticles with classical treatment methods can reduce operating costs by 30-50%, depending on the type of contaminants and operating conditions. At the same time, the need for further research into the safe extraction of nanoparticles after the cleaning process remains relevant, as the release of residual nanomaterials into the environment can cause undesirable ecotoxicological effects. Nanotechnology also opens up prospects for the implementation of smart water quality monitoring systems based on sensor platforms using nanomaterials [5].

Thus, the use of metal nanoparticles in water treatment technologies is a promising area that combines high efficiency, economic feasibility and environmental safety. Further development of this area requires a comprehensive approach, including optimisation of methods for obtaining nanomaterials, studying their long-term stability in water systems, and developing effective strategies for their disposal after use. Regulatory support is also an important aspect of the large-scale implementation of nanotechnology in water treatment processes, requiring the development of appropriate standards and assessment of potential risks to human health and the environment. Research in this area also focuses on developing new methods for recycling used nanoparticles and preventing their uncontrolled release into ecosystems.

1. Бітюцький В.С., Цехмістренко С.І., Веред П.І., Онищенко Л.С. Використання "зелених" нанотехнологій для контролю забруднення та екологічного відновлення. Екологія, охорона навколишнього середовища та збалансоване природокористування: освіта – наука – виробництво: матеріали міжнародної науково-практичної конференції. – 3 жовтня 2024 р. Біла Церква. – С. 17–19.

2. Бітюцький В.С., Цехмістренко С.І., Мельниченко Ю.О. Екстракти рослин як джерело відновників і стабілізаторів у разі зеленого синтезу наночастинок металів і металоїдів. Інноваційні технології в агрономії, землеустрої, електроенергетиці, лісовому та садово-парковому господарстві: матеріали міжнародної науково-практичної конференції. – 3 жовтня 2024 р. – Біла Церква. – С. 37–39.

3. Цехмістренко, С.І., Бітюцький, В.С., Цехмістренко, О.С., Демченко, О.А., Тимошок, Н.О., & Мельниченко, О.М. Екологічні біотехнології “зеленого” синтезу наночастинок металів, оксидів металів, металоїдів та їх використання: за редакцією С.І. Цехмістренко. – Біла Церква. – 2022. – 270 с.

4. Marfavi, Z., Han, Y., Cai, Y., Lv, Q., Sun, K., Yuan, C., Tao, K. Sonocatalytical Nanoparticles with Persistent Action after Ceasing Ultrasound for Water Disinfection // *ACS Applied Engineering Materials*. – 2025.

5. Selvaraj, R., Nagendran, V., Varadavenkatesan, T., Goveas, L. C., Vinayagam, R. Stable silver nanoparticles synthesis using *Tabebuia aurea* leaf extract for efficient water treatment: A sustainable approach to environmental remediation // *Chemical Engineering Research and Design*. – 2024. – 208. – 456-463.

6. Simeonidis, K., Mourdikoudis, S., Kaprara, E., Mitrakas, M., Polavarapu, L. Inorganic engineered nanoparticles in drinking water treatment: a critical review // *Environmental Science: Water Research & Technology*. – 2016. – 2(1). – P. 43-70.

7. Tsekhmistrenko S., Bityutskyy, V., Tsekhmistrenko O. The use of nanoparticles for remediation of the ecological environment of ukraine caused by war. Proceedings of the VI International Conference on European Dimensions of Sustainable Development. – May 15-17, 2024. – Kyiv, 44.



# EFFECT OF pH AND ORGANIC LIGAND ON THE RECOVERY OF CADMIUM AND LEAD USING NEW MENTHOL-BASED (DEEP) EUTECTIC SOLVENTS

*Cherniakova M.Yu.<sup>1</sup>, Vashchenko O.V.<sup>2</sup>, Belikov K.N.<sup>1,3</sup>*

<sup>1</sup>Institute of Functional Materials Chemistry, State Scientific Institution

"Institute for Single Crystals" NASU, Ukraine, [chernyakova@isc.kh.ua](mailto:chernyakova@isc.kh.ua)

<sup>2</sup>Institute for Scintillation Materials NASU, Ukraine

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

Cadmium and lead are toxic to biological organisms. These elemental impurities belong to the class 1 according to ICH Q3D and are regulated at very low levels in pharmaceutical products and substances [1]. Moreover, their analysis is important for food quality control and environmental monitoring. However, the analysis of these objects often encounters the problem of matrix effects, which can be solved by extraction methods.

Eutectic and, in particular, deep eutectic solvents have gained attention as "green" extraction systems. They are mixtures of substances that have a network of intermolecular bonds. The selection of substances, their ratio and, if necessary, modifiers enables the creation of designer solvents with the desired properties. Hydrophobic eutectic solvents are promising for use in aqueous environments. Menthol can be used as one of the components of these systems, as it is a natural compound, non-toxic, poorly soluble in water, and easy to store [2].

The solid-liquid phase diagrams were obtained for new (deep) eutectic solvents, namely menthol : ortho-vanillin (M : o-V), menthol : resorcinol (M : R), menthol : antipyrine (M : A), and menthol : oleic acid (M : OA). The lowest melting points of these systems, which were determined by differential scanning calorimetry, were 34.4, -34.8, 36.3 and -7.4 °C, respectively [3]. The M : R system exhibits a glass transition at the mentioned temperature.

The influence of the pH of the aqueous medium and the addition of an organic ligand on the extraction properties was studied using model solutions of Cd(II) and Pb(II) with a concentration of 1 mg/L. For the formation of complexes with metal ions, 8-hydroxyquinoline was chosen, the solution of which was added in excess concentration before the extraction. The extraction rate (*R*) of the metal was calculated based on the analysis of the aqueous phase by inductively coupled plasma atomic emission spectrometry.

The obtained data showed an increase in *R* over a wide pH range in the presence of 8-hydroxyquinoline, although this was less apparent in the case of the M : o-V mixture. The *R* value for each metal did not exceed 26%, 38%, and 40% during the extraction directly into the M : R, M : A and M : OA, respectively. The introduction of the ligand contributed to the increase of the *R* to a maximum value at pH 8: 78% and 71% for Cd(II) and Pb(II), respectively, using the M : R mixture; 71% and 61% for Cd(II) and Pb(II), respectively, using the M : A mixture. During the extraction into the M : OA system, a high *R* value of up to 91% was achieved for Pb(II) at pH 4-9 in the presence of 8-hydroxyquinoline, while the maximum *R* of Cd(II) was 56% at pH 5.

The work was supported with the project of the National Academy of Sciences of Ukraine "New supramolecular extraction systems for analytical separation, concentration and determination of transition metals" (№ 0125U001065).

1. International Council for Harmonisation of Technical Requirements for Pharmaceuticals for Human Use, *ICH Harmonised Guideline: Guideline for Elemental Impurities Q3D(R2)*. – 2022.
2. Cherniakova M., Varchenko V. Belikov K. // *Chem. Rec.* – 2023. – 24. e202300267.
3. Cherniakova M. Y., Vashchenko O. V., Zinchenko I. O., Musatov V. I. and Belikov K. N., *Funct. Mater.* – 2024. – 31. – P. 619–629.

## NEW METHOD FOR DETERMINATION OF FLUMIOXAZIN BY HPLC

Maga I.M.

State University "Kyiv Aviation Institute", [ivan\\_maga@ukr.net](mailto:ivan_maga@ukr.net)

Agricultural production in modern conditions is impossible without the use of pesticides. Artificially created biocenoses (agrocenoses) can function with a given productivity only if they are constantly maintained within certain environmental parameters. The modern plant protection service against pests and diseases is based mainly on the use of chemically synthesized pesticides. According to researchers, only 10% of pesticides reach their intended target, the rest "fly by", polluting nature and destroying other organisms, and only 1% directly provides a toxic effect. Therefore, the negative consequences associated with pesticides are mainly due to the destruction of biogeocenoses, in which the very existence and number of individual species of living organisms are closely related to each other. At the same time, the likelihood of remote consequences caused by the pathological and genetic effect of a number of drugs on biota increases. Residual amounts of pesticides accumulate and bioconcentrate in food (trophic) chains. There is a removal of residual quantities of pesticides beyond the cultivated area. The world practice of using pesticides shows that they carry potential danger. In this regard, the development of new and improvement of known methods of pesticide control is an urgent task.

Flumioxazin (FO) is a contact herbicide absorbed by foliage or germinating seedlings producing symptoms of wilting, necrosis and chlorosis within 24 hours of application. It controls annual and biennial broadleaf weeds and grasses, FO was found to control 40 broadleaf weed species either pre- or post-emergence. The product has residual activity lasting up to 100 days depending on conditions.

FO acts by inhibition of protoporphyrinogen oxidase, an enzyme important in the synthesis of chlorophyll. It is suggested that porphyrins accumulate in susceptible plants, causing photosensitization that leads to membrane lipid peroxidation. The peroxidation of membrane lipids leads to irreversible damage of membrane function and structure in susceptible plants. The activity of FO is light and oxygen-dependent [1]. Treatment of soil with FO will cause susceptible emerging plants to turn necrotic and die shortly after exposure to sunlight.

FO is a yellow powder with melting point 71-74 °C, boiling point 254 °C, density 1.096 g/mL, refractive index 1.4770 (at 80 °C). Chemical name: *N*-(7-fluoro-3,4-dihydro-3-oxo-4-prop-2-ynyl-2*H*-1,4-benzoxazin-6-yl)cyclohex-1-ene-1,2-dicarboxamide, the chemical formula is shown in Fig. 1.

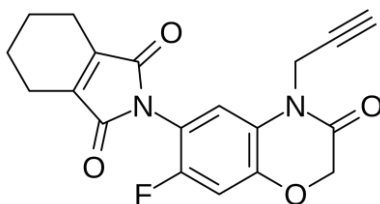


**Fig. 1.** The chemical formula of Flumioxazin.

Physical form: Yellow-brown powder. Density: 1.5136 (20 °C); Melting point: 201-204 °C; Vapour pressure: 0.32 mPa (22 °C); Solubility: In water 1.79 g/l (25 °C). Soluble in common organic solvents [2].

Toxicology: Oral: Acute oral LD<sub>50</sub> for rats >5000 mg/kg. Percutaneous: Acute percutaneous LD<sub>50</sub> for rats >2000 mg/kg. Non-irritating to skin; mild eye irritant (rabbits). Non-sensitising to skin (guinea pigs). Inhalation: LC<sub>50</sub> (4 h) for rats >3930 mg/m<sup>3</sup> air. Phytotoxicity: Soya beans and peanuts are tolerant. Maize, wheat, barley and rice are moderately tolerant [3].

Fate in aquatic systems: Flumioxazin is rapidly degraded in water by both photolysis (DT<sub>50</sub> 1 day at pH 5) and hydrolysis; it has a half-life of 4.2 days at pH 5, 1 day at pH 7 and 0.01 days at pH 9. The residues may persist in the environment and may leach to groundwater. It is possible that

flumioxazin could reach surface water via spray drift or runoff under certain environmental conditions and so should not be applied where run-off is likely to occur. The conditions for determining FO by high-performance liquid chromatography were investigated. The method of reversed-phase chromatography was used. A mixture of acetonitrile-water in a ratio of 70:30 was used as the mobile phase. The optimal eluent feed rate was selected. Based on the obtained data, a method for chromatographic determination of FO by HPLC was developed, the retention time is 5.6 min. Chromatographic determination of A in model solutions was carried out. Metrological processing of the obtained data was performed.

1. Abe J., Isobe N., Mikata K., Nagahori H., Naito Y., Saji H., Ono M. Flumioxazin metabolism in pregnant animals and cell-based protoporphyrinogen IX oxidase (PPO) inhibition assay of fetal metabolites in various animal species to elucidate the mechanism of the rat-specific developmental toxicity // *Toxicology and Applied Pharmacology*. – 2018. – V.339, I.15. – P. 34-41.

2. Ma J., Jiang P., Huang Y., Lu C., Tian G., Xiao X., Meng Y., Xiong X., Cheng B., Wang D. Oxidative stress contributes to flumioxazin-induced cardiotoxicity in zebrafish embryos. *Environmental Toxicology and Chemistry*. – 2023. – V. 42, I.12. – P. 2737–2746.

3. Ando D., et al. Fate of flumioxazin in aquatic plants: Two algae (*Pseudokirchneriella subcapitata.*), Duckweed (*Lemna* sp.), and water milfoil (*Myriophyllum elatinoides*) // *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. – 2017. – V. 65, No 40. – P. 8813–8822.

## ANALYSIS OF THE SYN-GAS COMPOSITION FORMED DURING THE PYROLYSIS OF FERULIC ACID OVER CERIUM OXIDE SURFACE

*Nastasiienko N.S.<sup>1</sup>, Kulik T.V.<sup>1,2</sup>, Palanytsia B.B.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Chuiko Institute of Surface Chemistry, NAS of Ukraine, Ukraine, [nastasiienkon@ukr.net](mailto:nastasiienkon@ukr.net)

<sup>2</sup>Cardiff Catalysis Institute, Translational Research Hub, School of Chemistry, Cardiff University, Maindy Road, UK

Lignocellulosic biomass is considered an alternative renewable source of valuable chemicals. Therefore, the search for effective technologies for processing this raw material is a challenge for modern science. Pyrolysis is one of the most promising methods for use in such technologies. In the process of pyrolysis of lignocellulosic raw material, three main products are obtained: liquid biooil, solid biochar and synthetic gas, consisting of H<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub> and low molecular weight hydrocarbon gases of biooil [1]. Despite the fact that biodiesel is considered the most valuable component, synthesis gas can also be utilized, in particular, used in the combined heat and power industry, as well as for conversion into hydrocarbons with a higher molecular weight [2]. In addition, the analysis of gases produced during biomass processing using catalysts is important for understanding the processes that occur on the catalysts surface and the effectiveness of their application. Therefore, when studying the pyrolysis of lignocellulosic raw materials, special attention is also paid to the analysis of the composition of synthesis gas [3]. Ferulic acid (FA) often serves as a model compound of lignin, since its structure is very similar to the guaiacyl subunits of lignin, which are widely represented in lignin of many types of plant raw materials, in particular for coniferous species they reach 90% [4]. Therefore, in our work, an analysis of synthesis gas formed during the pyrolysis of ferulic acid on the surface of cerium oxide was performed.

Ferulic acid (98%, Alfa Aesar, Karlsruhe, Germany) was impregnated with nanosized cerium oxide at concentrations of 0.1–1.2 mmol/g. Cerium dioxide (99.5%, S<sub>Ar</sub> = 71 m<sup>2</sup>/g, Alfa Aesar, Karlsruhe, Germany) was pre-calcined at 500 °C for 2 h to remove organic matter. The structure of the FA surface layer on the oxide was investigated by IR spectroscopy using a Thermo Nicolet Nexus Fourier-transform IR spectrometer (Thermo Nicolet Corporation, Madison, WI, USA). Catalytic pyrolysis of FA was studied using Temperature programmed desorption-mass spectrometry (TPD-MS). TPD MS studies were performed using an MX-7304 monopole mass spectrometer (Electron, Sumy, Ukraine) with an electron ionization beam, re-equipped for thermal

desorption measurements [5]. The programmed linear heating of the samples was carried out at a rate of 0.17°C/s to a temperature of ~ 750 °C under vacuum conditions.

As a result of the study of the thermal decomposition of ferulic acid on the cerium oxide, a number of gaseous products were detected, in particular CO<sub>2</sub> ( $m/z$  44), CO ( $m/z$  28), H<sub>2</sub> ( $m/z$  3 (H<sub>3</sub><sup>+</sup>) (Figure 1a) and CH<sub>4</sub> ( $m/z$  16), C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> ( $m/z$  26), propylene C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> ( $m/z$  42) (Figure 1b) which were released in much smaller quantities.

Based on the established mechanisms of FA pyrolysis, possible pathways for the formation of these gaseous compounds were proposed. It was found that CO<sub>2</sub> was formed mainly as a result of the decomposition processes of a number of carboxylate complexes (70–400 °C) and complexes formed as a result of the interaction with the oxide of functional groups of the aromatic nucleus (150–400 °C). The simultaneous destruction of aromatic and bidentate carboxylate complexes caused the maximum intensity of CO<sub>2</sub> release, recorded at about 330°C. The formation of CO ( $T_{\max}$  ~ 320°C), CH<sub>4</sub> ( $T_{\max}$  ~ 345°C) and C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> ( $T_{\max}$  ~ 350 °C), C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> ( $T_{\max}$  ~ 327 °C) is associated with secondary reactions that the main acid decomposition products that remain on the oxide surface undergo at higher temperatures. The release of H<sub>3</sub><sup>+</sup> ( $T_{\max}$  ~ 510°C) and CO above 400°C is associated with the gasification of coke formed on the CeO<sub>2</sub> surface during the FA pyrolysis.

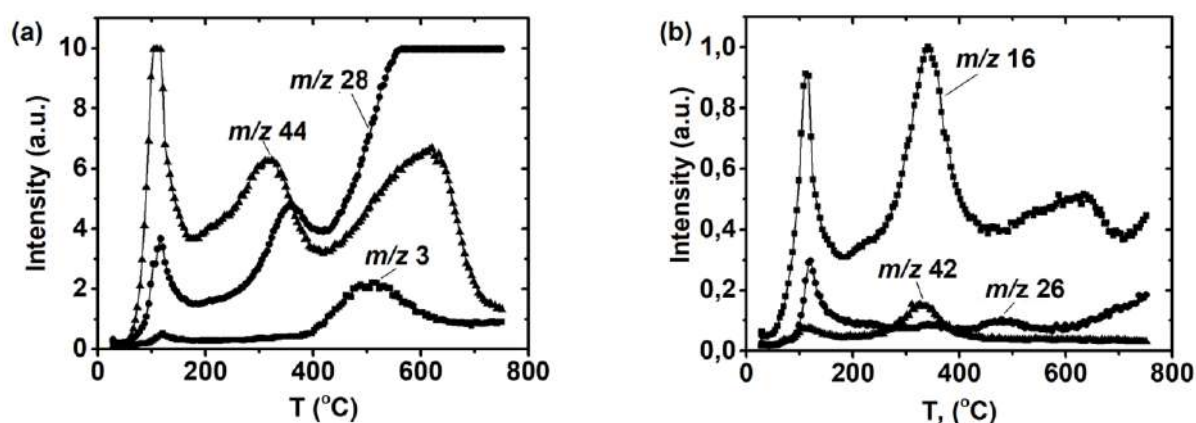


**Fig. 1.** TPD curves for products with  $m/z$  3, 28, 44 (a) and  $m/z$  16, 26, 42 (b), obtained during the study of thermal decomposition of the FA/CeO<sub>2</sub> (1.2 mmol/g) sample.

The results obtained can be used in the development of lignocellulose conversion technologies using catalytic systems based on cerium oxide, which will contribute to the economical and rational use of natural resources, as well as to the improvement of the state of our ecosystem.

#### Acknowledgements:

*This research has received funding through the EURIZON project, which is funded by the European Union under grant agreement No.871072.*

1. Boateng A.A., Hicks K.B., Vogel K.P. Pyrolysis of switchgrass (*Panicum virgatum*) harvested at several stages of maturity. - *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*: - 2006. – V.75. I.2. – P. 55-64.
2. Bakkerud P.K. Update on synthesis gas production for GTL. - *Catalysis Today*. - 2005. – V.106. I.1-4. –P. 30-33.
3. Tewari K., Balyan S., Jiang C., Robinson B., Bhattacharyya, D., Hu J. Unlocking Syngas Synthesis from the Catalytic Gasification of Lignocellulose Pinewood: Catalytic and Pressure Insights. - *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*: - 2024. – V.12. I.11. – P. 4718-4730.
4. Mei Q., Shen X., Liu H., Han B. Selectively transform lignin into value-added chemicals. - *Chinese chemical letters*: - 2019. – V.30. I.1. – P. 15-24.
5. Kulyk K., Palianytsia B., Alexander J.D., Azizova L., Borysenko M., Kartel M. Kinetics of valeric acid ketonization and ketenization in catalytic pyrolysis on nanosized SiO<sub>2</sub>, γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, CeO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/SiO<sub>2</sub> and TiO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub>. - *Chem.Phys. Chem.*: - 2017, V.18. – P. 1943-1955.

## НОВІ КОМПОЗИТНІ МАТЕРІАЛИ НА ОСНОВІ БЕНТОНІТУ

*Бідовська К.В., Басюк В.О., Кичкирук О.Ю.*

Житомирський державний університет імені Івана Франка, [kbidovska@gmail.com](mailto:kbidovska@gmail.com)

Важливим критерієм вибору сорбційних матеріалів в хімічному аналізі є їх адсорбційна здатність. Природні оксидні мінерали завдяки своїй структурі володіють досить високою сорбційною здатністю по відношенню до багатьох катіонів металів, органічних сполук та забруднювачів різної природи, що робить їх перспективними матеріалами у водоочищенні, медицині та промисловості.

Для зменшення забруднення території України важкими металами необхідно вже зараз впроваджувати інноваційні методи, засновані на досягненнях «зеленої» хімії. Одним із перспективних підходів є застосування природних поруватих мінералів України, зокрема алюмосилікатів, як адсорбентів іонів токсичних металів. Це рішення має значні екологічні та економічні переваги.

Для підвищення сорбційної здатності природних мінералів їх поверхню можна модифікувати полімерами, що здатні до комплексоутворення з цими металами. У роботі здійснено синтез, вивчення будови поверхневого прошарку і сорбційних властивостей щодо іонів  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$  та  $\text{Cd}^{2+}$  полімер-неорганічних композитів на основі бентоніту, модифікованого полі[5-(п-нітрофенілазо)-8-метакрилоксихіноліну].

В результаті синтезу отримано два композити: Bent]–AzoQN (*in situ*) та Bent]–AzoQN-MMA (*adsorb*).

Морфологію поверхні одержаних композитів досліджували сучасними фізичними методами, зокрема термогравіметричним аналізом, ІЧ-спектроскопією, методами низькотемпературної адсорбції-десорбції азоту та скануючої електронної мікроскопії.

Для вивчення сорбційних властивостей використовували розчини з вмістом катіонів металів від 2 до 30 мкг/мл шляхом розведення стандартних розчинів з концентрацією 500 мкг/мл. Зважували у конічні колби по 0,1 г композиту й відміряли піпеткою Мора по 25 мл розчинів з відповідною концентрацією  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$  та  $\text{Pb}^{2+}$ . Через добу розчини фільтрували і за потреби розводили до меншої концентрації (згідно калібрувальних графіків).

Вимірювання концентрації іонів у розчинах до та після сорбції здійснювали з використанням атомно-абсорбційного спектрофотометру С-115 ПК (Selmi, м. Суми). Атомізація здійснювалась полум'яним способом спалюванням суміші ацетилену з повітрям.

Отримані результати вивчення сорбційної здатності нових композитів було порівняно із сорбційними властивостями немодифікованого бентоніту і наведені в таблиці. Наприклад, найбільша сорбційна ємність немодифікованого бентоніту становить 0,101 ммоль/г щодо катіонів Купруму, а композитів Bent]–AzoQN (*in situ*) та Bent]–AzoQN-MMA (*adsorb*) 0,112 і 0,110 ммоль/г відповідно.

| Вихідні мінерали та гібридні матеріали на їх основі | Сорбційна ємність щодо аквакомплексів, ммоль/г |        |        |
|-----------------------------------------------------|------------------------------------------------|--------|--------|
|                                                     | Cu(II)                                         | Cd(II) | Pb(II) |
| Вихідний бентоніт                                   | 0,101                                          | 0,060  | 0,036  |
| Bent]–AzoQN ( <i>in situ</i> )                      | 0,112                                          | 0,060  | 0,036  |
| Bent]–AzoQN-MMA ( <i>adsorb</i> )                   | 0,110                                          | 0,047  | 0,031  |

Варто відмітити про незначне покращення сорбційної здатності нових композитів по відношенню до наведених катіонів металів, що потребує подальшого дослідження і пояснення.



## ЕФЕКТИВНІСТЬ ЗАСТОСУВАННЯ КОАГУЛЯНТІВ СЕРІЇ «BESFLOC» В ПРОЦЕСАХ ОЧИЩЕННЯ СТИЧНИХ ВОД

*Борук С.Д.<sup>1</sup>, Куліш В.Г.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, [boruk\\_s@hotmail.com](mailto:boruk_s@hotmail.com)

<sup>2</sup>ТОВ «Аква-холдінг»

Стичні води підприємств це складна та багатокомпонентна система. Наявність у їх складі широкого спектру забруднюючих речовин створює складнощі для їх ефективного та повного видалення. У більшості випадків необхідно застосовувати багатостадійні схеми очищення. Головною метою на перших етапах є зменшення міграційної здатності домішок. Враховуючи великий вміст у стічних водах домішок які знаходяться у високодисперсному або псевдо зрідженому стані та утворення першою стадією проведення очищення є проведення коагуляції домішок [1-4].

Як об'єкти дослідження використовували:

Стичні води Чернівецького олійно-жирового комбінату які були надані нам для проведення досліджень. Основний об'єм стічних вод, згідно з даними ЦЗЛ підприємства, утворюється при проведенні двох технологічних операцій. Перша це стадія попередньої обробки та механічного подрібнення вихідної сировини (у подальшому зразок 1) та стічна вода, що утворюється на стадії шламовипаровування (зразок 2). Обидва зразки візуально опалесцювали та мали певний вміст домішок які можна було зафіксувати візуально. Крім того наявність характерного запаху свідчила про наявність в їх складі органічних речовин.

У більшості випадків коагуляцію використовують як перший ступінь очищення стічних вод з метою агрегації високодисперсних частинок та псевдо розчинних речовин до седиментаційно нестійких агрегатів, які також легко відділити від загального об'єму стічної води проведенням фільтрації. Такий вплив коагулянту дає можливість зробити припущення, що найбільш ефективною схемою видалення антропогенних домішок із стічних вод харчових виробництв може бути двостадійна схема.

Як показали проведені нами наявність забруднюючих речовин можна легко зафіксувати оптичними методами. Так вихідна оптична густина зразків після 24 годин зберігання у лабораторних умовах складає відповідно 0,36 та 0,17. При цьому системи стійкі та впродовж експерименту практично не змінюють свою оптичну густина.

Нами встановлено, що введення до зразків стічних вод коагулянту Biscochem призводить до утворення агрегатів частинок неправильної форми та помітного пришвидшення процесу їх відділення з об'єму зразків стічних вод.

Для визначення оптимальної концентрації коагулянту були визначні величини коефіцієнту седиментаційної нестійкості.

Встановлено, що оптимальна концентрація коагулянту для досліджуваних зразків складає 0,05 – 0,075 кг/м<sup>3</sup>. Швидкість осідання агрегатів частинок сягає свого максимуму та при подальшому збільшенні не дає позитивних результатів. Разом з тим надлишкова кількість коагулянту у складі води не бажана. Підвищення концентрації сполук алюмінію у природних водах не бажано.

Хід залежності свідчить про те, що механізм впливу коагулянту на забруднюючі речовини зводиться до поступової нейтралізації поверхневого заряду частинок домішок. Встановлено, що під дією коагулянту відбувається коагуляція не лише частинок дисперсної природи, але і псевдо розчинних речовин. До них відносяться олія, жири, домішки які створюють забарвлення. Це свідчить про високу ефективність дії коагулянту.

Надійне відділення домішок можна досягти лише надійно їх зафіксувавши та попередивши їх подальшу міграцію. Тобто необхідно або виділяти та захоронювати осад або відділяти його шляхом фільтрування.

Проведені дослідження показали що залишковий об'єм частинок домішок мало залежить від концентрації коагулянту. Осад залишається рихлим та містить велику кількість імобілізованої рідини. Крім того він не має структури і при виникненні турбулентних

пульсацій легко збаламучується. Незначна густина частинок осаду призводить до зрушення частинок і вони здатні підійматись на значну висоту. Це значно ускладнює процес відділення очищеної рідини.

Це зумовлює необхідність застосування інших методів відділення осаду, найбільш раціональним є пропускання стічних вод після введення коагулянту через шар адсорбенту. Враховуючи, що нами був використаний коагулянт на основі гідроксиду алюмінію можна зробити припущення, що ефективним буде адсорбент глинистої природи який складається з алюмосилікатів.

Природні глинисті мінерали мають велику адсорбційну здатність та достатню густину (більше 2 г/см<sup>3</sup>) дозволяє попередити вимивання частинок адсорбенту з загальної маси. Висока гідрофільність поверхневих шарів дозволяє затримати утворені агрегати за рахунок електростатичної взаємодії. Тобто адсорбція має фізичний характер. Враховуючи зворотність процесів фізичної адсорбції відпрацьований адсорбент необхідно ізолювати від природних вод.

За своїми характеристиками як адсорбент можна використовувати мінерал глинистої природи каолінит. Даний мінерал має достатню твердість, що може забезпечити необхідний гранулометричний склад адсорбенту.

Нами встановлено, що обробка стічних вод коагулянтом значно підвищує вилучення добавок з стічних вод при проведенні їх пропускання через шар адсорбенту глинистої природи (табл.). Зменшується оптична густина, окиснюваність зразків.

**Таблиця**

**Ефективність очищення стічної води**

|                                         | <b>Стічна вода (зразок 1)</b> |                       | <b>Стічна вода (зразок 2)</b> |                       |
|-----------------------------------------|-------------------------------|-----------------------|-------------------------------|-----------------------|
|                                         | <b>До очищення</b>            | <b>Після очищення</b> | <b>До очищення</b>            | <b>Після очищення</b> |
| ХСК, мг О <sub>2</sub> /дм <sup>3</sup> | 2440                          | 530                   | 620                           | 510                   |
| Оптична густина                         | 0,255                         | 0,09                  | 0,095                         | 0,035                 |

Отже, запропонована технологічна схема дозволяє розв'язати проблему очищення стічних вод олійно-жирового виробництва та зменшити вміст забруднюючих речовин до санітарних норм. Необхідно підкреслити, що впровадження даної методики не потребує введення до експлуатації нових очисних споруд, що зведе всі додаткові капіталовкладення лише до вартості необхідних реагентів. Необхідні реагенти є на підприємстві у достатній кількості.

1. Запольський А.К.. Фізико-хімічні основи технології очищення стічних вод / А.К. Запольський, Н.А. Мішкова-Клименко, І.М. Астрелін. – К.: Лібра, 2000. – С. 337–365.

2. Boruk S., Kulish V., Winkler I., Boruk O., Kochan V.. The Effectiveness of Some Coal-Based Mineral Compositions in the Decontamination and Environmental Protection of the Small Urban Rivers' Watery // *Inzynieria Mineralna – Journal of the Polish Mineral Engineering Society* – 2023 – Lipiec – Grudzień 2023 July – December – P. 45 – 49.

3. Boruk S., Kulish V., Hrebenshchikov V.. Application of besfloc series coagulants for optimization of reagent purification processes of natural waters of the carpathian region. // 22<sup>th</sup> International Scientific-Practical Conference “Resources of natural waters in carpathian region”. Problems of protection and rational exploitation. – Львів 2024. – С. 188 – 191.

4. Kulish V., Boruk S., Winkler I.. Comparative analysis of effectiveness of polvak 15/72 as a coagulant for drinking water production. // *Journal of Chemical Technology and Metallurgy* – V. 59, №5. – 2024. – P. 1163–1168.

## ПЕРСПЕКТИВИ ВИКОРИСТАННЯ АЛЬТЕРНАТИВНИХ ВИДІВ ПАЛИВА ДЛЯ ТРАНСПОРТУ

*Дрехліс Є.Р.<sup>1</sup>, Власенко Н.Є.<sup>2</sup>, Коваленко І.В.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Навчального-наукового інституту матеріалознавства та зварювання ім. Є.О. Патона,  
[drehlisegor@gmail.com](mailto:drehlisegor@gmail.com)

<sup>2</sup>НТУ України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

Транспортна галузь є одним із ключових чинників розвитку сучасної цивілізації. Однак традиційні види пального, зокрема бензин і дизельне паливо, мають значний негативний вплив на довкілля через викиди парникових газів, що сприяють глобальному потеплінню. Крім того, залежність від викопних ресурсів призводить до економічної нестабільності та енергетичних криз. Доцільно та перспективно використання альтернативного палива (біопалива, водню, електроенергії, синтетичного пального тощо) з екологічної, економічної, технологічної точок зору [1,2].

В останні десятиліття вчені, інженери та виробники транспорту активно досліджують і впроваджують альтернативні види пального, які можуть стати екологічно чистішою та економічно вигіднішою заміною традиційним видам енергії [3,4]. Біопаливо, водень, електроенергія, синтетичні види пального та інші інноваційні рішення вже знаходять застосування у різних сферах транспорту.

Актуальність дослідження альтернативного пального зумовлена необхідністю зменшення залежності від нафти, мінімізації шкідливих викидів та забезпечення сталого розвитку транспортної системи [5,6,7]. Вивчення переваг, недоліків та перспектив розвитку таких видів енергії є важливим кроком до екологічно безпечного майбутнього.

### *Види альтернативного палива*

Біопаливо є одним із найбільш розповсюджених альтернативних джерел енергії. Воно виробляється з органічних матеріалів, таких як рослинні олії, сільськогосподарські відходи та біомаса. Основними видами біопалива є:

-Біодизель – отримується шляхом переробки рослинних олій або тваринних жирів. Він може використовуватися в традиційних дизельних двигунах без значних модифікацій.

-Біоетанол – виробляється з цукрових або крохмалистих культур (кукурудзи, цукрової тростини). Використовується як домішка до бензину або як самостійне пальне.

-Біогаз – утворюється в результаті анаеробного розкладання органічних відходів. Основним його компонентом є метан, який може застосовуватися в газових двигунах. Переваги біопалива включають зменшення викидів парникових газів та можливість використання відновлюваних ресурсів. Проте його виробництво може конкурувати з продовольчим сектором, що спричиняє етичні та економічні питання.

-Водень є одним із найперспективніших видів альтернативного палива завдяки своїй екологічній чистоті – під час його використання в паливних елементах утворюється лише вода. Основні способи отримання водню: електроліз води – розщеплення води на кисень і водень за допомогою електроенергії.

-Реакції з природним газом – виробництво водню шляхом перетворення метану, хоча цей процес супроводжується викидами CO<sub>2</sub>. Основними викликами впровадження водневого палива є високі витрати на виробництво, складність транспортування та необхідність розбудови інфраструктури заправних станцій.

-Електрична енергія є екологічно чистим джерелом енергії для транспорту. Електромобілі працюють на акумуляторних батареях, які накопичують заряд від електромережі або відновлюваних джерел енергії.

-Електротранспорт. Переваги: відсутність шкідливих викидів у процесі експлуатації, низька вартість обслуговування у порівнянні з традиційними двигунами, використання відновлюваних джерел енергії для зарядки батарей. Недоліки: висока вартість акумуляторних батарей, обмежений запас ходу та довготривалий процес зарядки, проблема утилізації відпрацьованих батарей.



-Синтетичне паливо виробляється шляхом хімічного синтезу з вуглекислого газу ( $\text{CO}_2$ ) і водню. Воно може використовуватися в традиційних двигунах внутрішнього згоряння без значних змін конструкції. Переваги: можливість використання існуючої інфраструктури для заправки транспорту, виробництво на основі  $\text{CO}_2$  сприяє зменшенню парникових викидів. Недоліки: високі витрати на виробництво, низька ефективність порівняно з електротранспортом.

-Аміачне паливо: аміак є ще одним перспективним видом пального, який може застосовуватися в судноплавстві, залізничному транспорті та, потенційно, у вантажних автомобілях. Він містить водень і може використовуватися в паливних елементах або двигунах внутрішнього згоряння. Основними перевагами є відносно просте транспортування та відсутність викидів  $\text{CO}_2$ . Проте аміак є токсичною речовиною, що створює додаткові ризики під час його використання.

Майбутнє автомобілів на альтернативному палеві: розвиток гібридних технологій - поєднання різних джерел енергії (наприклад, електрики та водню) для підвищення ефективності транспорту. Масове впровадження електротранспорту - збільшення кількості електромобілів, автобусів та навіть літаків на електричній тязі. Розширення інфраструктури - Будівництво водневих заправок, зарядних станцій та біопаливних заводів.

*Висновок:* Альтернативне паливо є ключовим напрямом розвитку транспортної галузі, який сприяє зменшенню викидів шкідливих речовин, зниженню залежності від викопного палива та впровадженню новітніх технологій. Хоча сучасні альтернативні види пального мають певні обмеження, активний розвиток інфраструктури та вдосконалення технологій роблять їх дедалі більш перспективними. У майбутньому транспорт на основі відновлюваних джерел енергії стане невід'ємною частиною сталого розвитку суспільства.

1. Власенко Н.Є. Перспективи використання альтернативних джерел енергії// *Вісник Хмельницького національного університету. Серія «Технічні науки»*. – Хмельницький. –2024. № 3 (2), –183-186.

2. Марченко М. В., Потаскалов В. А., Власенко Н. Є., Коваленко І. В. Дослідження перспектив очищення стічних вод від іонів металів./ VIII Міжнародна науково – практична конференція : «Хімічна технологія: наука, економіка та виробництво», – Шостка, 27-29 листопада 2024, – С.84-87

3. Махненко І. О., Потаскалов В. А., Власенко Н. Є., Коваленко І. В. Перспективи використання енергії вітру. VIII Міжнародна науково – практична конференція: «Хімічна технологія: наука, економіка та виробництво»– Шостка. – 27-29 листопада 2024. – С.131-134.

4. Гуменюк В. М., Савицький В. Є. Альтернативні види пального та перспективи їх використання в транспорті. – Київ: Наукова думка, 2018.

5. Карпенко Ю. О. Екологічні аспекти використання альтернативного палива в транспортній галузі. – Львів: Видавництво ЛНУ, – 2016.

6. Сидоренко В. П., Іванченко О. М. Водневе паливо: технології виробництва та застосування. – Дніпро: Університетська книга, 2021.

7. Рябченко А. І. Синтетичне паливо: перспективи розвитку та впровадження в автомобільній промисловості. – Одеса: Політехніка, 2020.

# РОЗРОБКА ТА ВАЛІДАЦІЯ МЕТОДИКИ ДЛЯ ПРОВЕДЕННЯ ПОРІВНЯЛЬНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ СТАБІЛЬНОСТІ ПРИ ВИВЧЕННІ ДОСТАВКИ ЛІКАРСЬКОГО ЗАСОБУ ТИКАГРЕЛОРУ ЧЕРЕЗ НАЗОГАСТРАЛЬНИЙ ЗОНД *IN VITRO*

*Єгорова А.В.<sup>1</sup>, Скрипинець Ю.В.<sup>1</sup>, Чеботарська І.І.<sup>1</sup>, Александрова Д.І.<sup>1</sup>,  
Сухоставська Н.М.<sup>2</sup>, Кіріяк Г.В.<sup>2</sup>, Кашицький С.М.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> Фізико-хімічний інститут ім. О.В. Богатського НАН України, [yegorovalla@gmail.com](mailto:yegorovalla@gmail.com)

<sup>2</sup> ТДВ «ІНТЕРХІМ»

Ентеральне введення ліків через зонд є кращим методом для пацієнтів, які не можуть безпечно ковтати. Слід враховувати фактори, які можуть призвести до закупорювання зондів, зниження ефективності препаратів. Тому необхідно продемонструвати, що генеричний лікарський засіб є терапевтично еквівалентним до референтного при введенні через назогастральний (НГ) зонд.

Для моніторингу стабільності лікарських засобів після суспендування розтертих таблеток у середовищі (деіонізований воді) та доставки через назогастральний зонд проводять визначення супровідних домішок. Умови проведення дослідження вказані у FDA Draft Guidance on Ticagrelor [1], інструкції для медичного застосування референтного препарату БРИЛНТА: кількість таблеток – 2 шт; дозування – 90 мг; середовище для суспендування – вода для хроматографії; об'єм – 50,0 мл; друга часова точка – час змочування 120 хв; пероральний шприц - трьохкомпонентний одноразовий стерильний з поліпропілену. Назогастральний зонд: матеріал полівінілхлорид, трубка розмір – 8; внутрішній діаметр – 2,7 мм; довжина 1200 мм.

Відповідно до вимог Керівництва ICH M9 [2] при тестуванні *in vitro* має бути продемонстровано адекватну стабільність лікарської речовини у середовищі розчинення. Порогове значення вмісту домішок встановлюється на рівні не більше 10 %.

Нормування вмісту ідентифікованих та неідентифікованих домішок встановлено згідно вимогами керівництва ICH Q3B [3]. В результаті валідації методики вивчали такі характеристики як: специфічність, лінійність, правильність, прецизійність, межа виявлення, межа кількісного визначення, робастність та стабільність розчинів.

Визначення супровідних домішок проводили методом рідинної хроматографії [4]. Хроматограми реєстрували на рідинному хроматографі 1260 Infinity з УФ-детектором (Agilent Technologies, США).

При розробці методики було враховано можливий вплив компонентів плацебо (натрію кроскармелоза, целюлоза мікрокристалічна, кремнію діоксид колоїдний безводний, магнію стеарат, гіпромелоза (гідроксипропілметилцелюлоза), триацетин, полісорбат). На хроматограмі плацебо відсутні піки, які заважають визначенню домішок основної речовини (рис. 1).

Випробовуваний розчин 1. Готують суспензію, подрібнивши 2 таблетки (по 90 мг) і суспендують їх в 50 мл води для хроматографії Р (подрібнюють таблетки протягом 60 секунд за допомогою ступки та товкача, додають середовище для суспендування в ступку та перемішують протягом 120 секунд за допомогою товкача); набирають та проштовхують суспензію через шприц в трубку НГ зонду до повного її заповнення, залишають на 120 хвилин в горизонтальному положенні у стані спокою. Промивні води (60 мл) наливають у ступку з товкачем та залишають на 120 хвилин. По закінченню часу ретельно струшують шприц з суспензією протягом 15 секунд, проштовхують її через шприц в трубку НГ зонду, далі в контейнер для збору (мірна колба місткістю 200,0 мл), промивні води зі ступки набирають у шприц, проштовхують через шприц в трубку НГ зонду для додаткового промивання, переносять промивні води в контейнер для збору (загальна кількість використаної води – 110 мл).

Методика визначення. Випробовуваний розчин. До випробовуваного розчину 1 додають 70 мл ацетонітрилу, перемішують протягом 25 хв на магнітній мішалці, доводять об'єм розчину водою для хроматографії до об'єму 200,0 мл та перемішують.

10,0 мл одержаного розчину доводять сумішшю розчинників до 20,0 мл та перемішують. Одержаний розчин фільтрують крізь мембранний фільтр (0,20 мкм; RC 25) (рис.2)

Розчин порівняння (а). 45,0 мг ФСЗ тикагрелору поміщають у мірну колбу місткістю 100,0 мл, розчиняють у суміші розчинників, доводять об'єм тим самим розчинником до позначки та перемішують.

Розчин порівняння (b). 1,0 мл випробованого розчину доводять сумішшю розчинників до 100,0 мл та перемішують.

2,0 мл одержаного розчину доводять сумішшю розчинників до 10,0 мл та перемішують.

Розчин порівняння (с). 4,5 мг ФСЗ тикагрелору для перевірки придатності хроматографічної системи (який містить домішки А, В і D) розчиняють у суміші розчинників і доводять до 10 мл тим самим розчинником та перемішують (рис. 3).

Суміш розчинників: ацетонітрил – вода (35:65 об/об).

Буферний розчин: розчин 156 г/л натрію дигідрофосфату, доведений до рН 3,0 фосфорною кислотою.

Розчини використовують свіжоприготованими.

Хроматографування проводили за таких умов: колонка з нержавіючої сталі розміром 0,15 м х 4,6 мм, заповнена силікагелем для хроматографії октадецилсилільним (1,8 мкм); рухома фаза А: змішують 1 об'єм буферного розчину та 89 об'ємів води для хроматографії та додають 10 об'ємів ацетонітрилу для хроматографії; рухома фаза В: змішують 1 об'єм буферного розчину та 29 об'ємів води для хроматографії Р та додають 70 об'ємів ацетонітрилу для хроматографії; використовували гадієнт; детектування за довжини хвилі 242 нм; температура колонки 55 °С; об'єм інжекції 5 мкл; час утримування піка тикагрелору близько 15 хв.

Ідентифікація домішок: використовують хроматограму ФСЗ тикагрелору для перевірки придатності системи та хроматограму розчину порівняння (с) для ідентифікації піків домішок А, В і D.

Відносний час утримування до тикагрелору (час утримування – близько 15 хвилин): домішка А – близько 0,5; домішка В – близько 1,1; домішка D – близько 1,5.

Придатність хроматографічної системи: розчин порівняння (с):

– ступінь розділення: не менше 4,0 між піками тикагрелору та домішки В.

Розрахунок вмісту домішок, у відсотках: для кожної домішки використовують концентрацію тикагрелору в розчині порівняння (b).

Нормування:

– неспецифіковані домішки: не більше 0,2 % кожної домішки;

– сума домішок: не більше 0,5 %;

– порогове значення: 0,1 %, не враховують піки домішок А, В і D.

Визначення супровідних домішок тикагрелору на виході із трубки НГ зонду час змочування – 120 хв) наведені в таблиці.

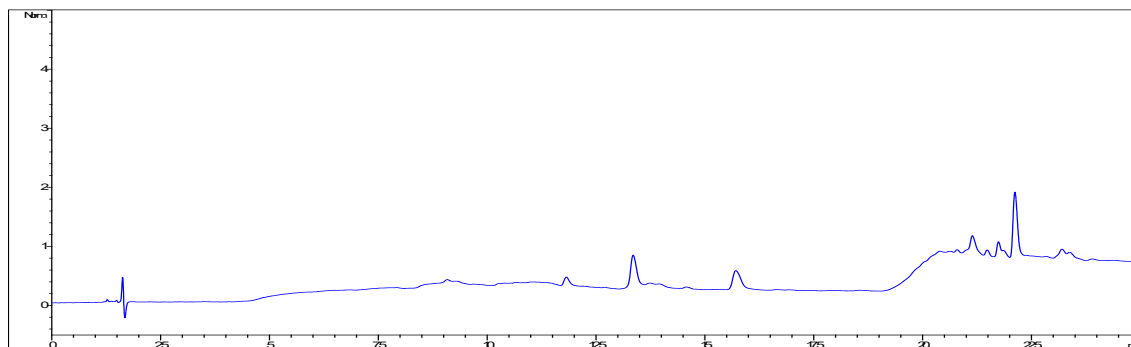


Рис. 1. Хроматограма розчину плацебо.

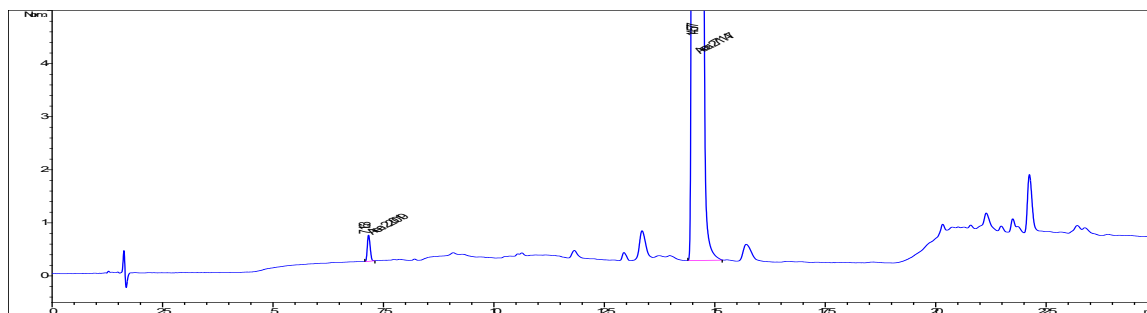


**Рис. 2.** Хроматограма випробовуваного розчину.

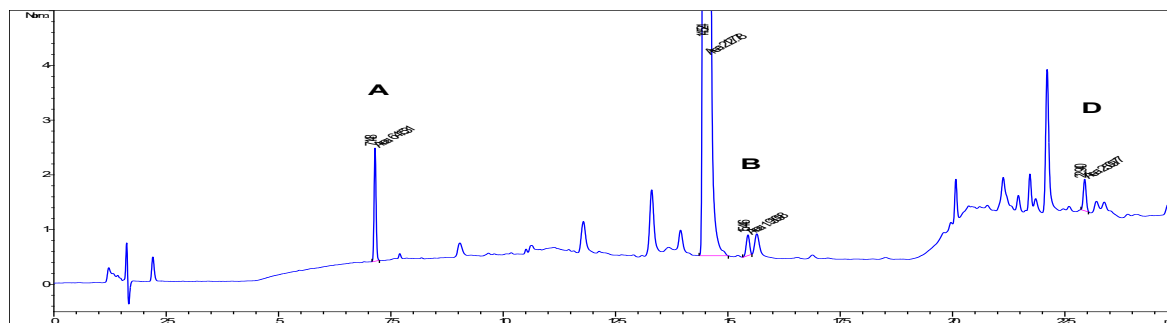


**Рис. 3.** Хроматограма розчину порівняння (с).

**Таблиця**

Визначення супровідних домішок тикагрелору на виході із трубки НГ зонду  
(час змочування – 120 хв)

| Препарат      | Номер проби | Неспецифіковані домішки, % | Сума домішок, % |
|---------------|-------------|----------------------------|-----------------|
| Досліджуваний | 1           | 0,105                      | 0,105           |
|               | 2           | 0,101                      | 0,101           |
|               | 3           | 0,098                      | 0,098           |
|               | 4           | 0,108                      | 0,108           |
|               | 5           | 0,094                      | 0,094           |
|               | 6           | 0,094                      | 0,094           |
| Референтний   | 1           | 0,061                      | 0,061           |
|               | 2           | 0,072                      | 0,072           |
|               | 3           | 0,068                      | 0,068           |
|               | 4           | 0,065                      | 0,065           |
|               | 5           | 0,065                      | 0,065           |
|               | 6           | 0,063                      | 0,063           |

Як видно з таблиці вміст супровідних домішок не перевищує нормування за ICH M9 (не більше 10 %) та регламентації: *неспецифіковані домішки* не більше 0,2 % кожної домішки; *сума домішок* не більше 0,5 %.

1. Oral drug products administered via enteral feeding tube: in vitro testing and labeling recommendations guidance for industry. DRAFT GUIDANCE. June 2021, Pharmaceutical Quality.
2. ICH Biopharmaceutics Classification System-based Biowaivers M9.
3. ICH guideline Q3B (R2) Impurities in New Drug Products. – 2006.
4. Державна Фармакопея України: в 3 т. / Державне підприємство "Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів". - 2-е вид. - Харків: ДП "Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів". – 2016.

## СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ЗАГАЛЬНОГО ВМІСТУ ПОЛІФЕНОЛІВ У КАВІ

*Замковий Н.О., Микитин І.М., Прокіпчук І.В.*

Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,  
[nikita.zamkovyi.21@pnu.edu.ua](mailto:nikita.zamkovyi.21@pnu.edu.ua)

Протягом багатьох років кава є дуже популярним напоєм – щодня у світі випивається близько 2,25 мільярда чашок кави. Цей напій відомий своїм багатим вмістом біологічно активних сполук, зокрема поліфенолів, які мають антиоксидантні властивості. Вміст поліфенолів у каві залежить від її сорту, методу обробки та умов обсмажування. Метою даного дослідження було кількісне визначення загального вмісту поліфенолів (ЗВП) у вибраних зразках кави арабіки, робусти, а також купажу арабіка/робуста.

ЗВП визначають спектрофотометричним методом із застосуванням реактиву Фоліна-Чокальтеу. Цей метод базується на реакції перенесення електронів, в якій антиоксидант виступає в ролі донора електронів, іон фосформолібдату – в ролі окислювача (рис. 1) [1]. Поліфеноли, які присутні в каві, реагують із реактивом Фоліна-Чокальтеу в лужному середовищі (рН 10, відрегульоване розчином карбонату натрію), оскільки реакція відбувається швидше з фенолятами порівняно з фенолами. Реакція призводить до синього забарвлення відновленого реактивом Фоліна-Чокальтеу, а інтенсивність поглинання при 760 нм корелює з вмістом фенольних сполук у зразку [2].

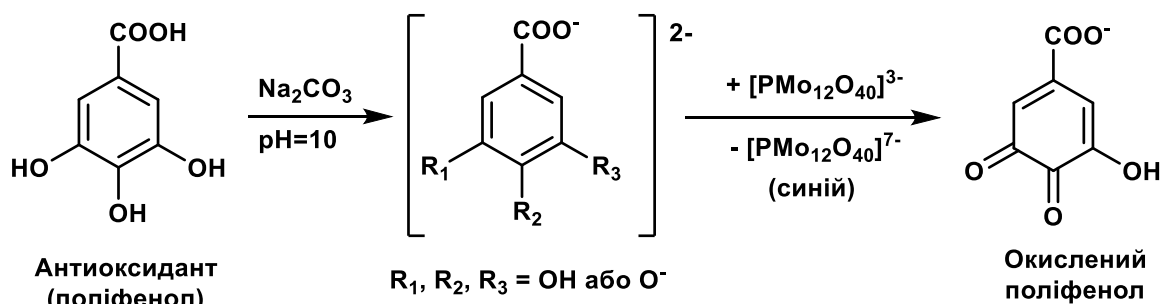


Рис. 1. Окислення поліфенолів в хінони [1].

Результати наших вимірювань показують, що зразки робусти мають ЗВП близько 3,1 мг/г, що лише трохи більше, ніж у зразках арабіки, де вміст становить 2,8 мг/г. Суміш арабіка/робуста неочікувано показала значення ЗВП нижчі, ніж у чистих зразках – 2,7 мг/г.

Згідно з літературними даними, вміст поліфенолів в кавових зернах очікується на рівні 8-9 мг/г [3]. Таким чином, наші результати свідчать про помітне зменшення вмісту поліфенолів у комерційних зразках порівняно з очікуваними значеннями. Це може бути наслідком втрат під час обсмажування або використання неякісної сировини. Необхідно провести подальші дослідження, щоб вивчити вплив інших факторів, таких як ступінь обсмажування та методи заварювання, на вміст поліфенолів та антиоксидантну здатність кави. Цей метод аналізу швидкий, не потребує складного обладнання чи вартісних реактивів і може застосовуватися для виявлення неоригінальних продуктів на ринку.

1. Pérez M., Dominguez-López I. The Chemistry Behind the Folin–Ciocalteu Method for the Estimation of (Poly)phenol Content in Food: Total Phenolic Intake in a Mediterranean Dietary Pattern. - *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. - 2023. - V. 71. I. 46. - P. 17543-17553.

2. Lawag I.L., Nolden E.S., Schaper A.A.M., Lim L.Y., Locher C. A Modified Folin-Ciocalteu Assay for the Determination of Total Phenolics Content in Honey. - *Applied Sciences*. - 2023. - Vol. 13, no. 4. - P. 2135.

3. Wierzejska R.E., Gielecińska I., Hallmann E., Wojda B. Polyphenols vs. Caffeine in Coffee from Franchise Coffee Shops: Which Serving of Coffee Provides the Optimal Amount of This Compounds to the Body. - *Molecules*. - 2024. - Vol. 29, no. 10. - P. 2231.

## СУЧАСНІ МЕТОДИ МОНІТОРИНГУ ЯКОСТІ АТМОСФЕРНОГО ПОВІТРЯ: ВИКЛИКИ ТА ПЕРСПЕКТИВИ

*Івченко М.М.*

Полтавський національний педагогічний університет імені В. К. Короленка,  
[maxym9290@gmail.com](mailto:maxym9290@gmail.com)

Атмосферне повітря є одним із найважливіших компонентів навколишнього середовища, які впливають на здоров'я людей, флору та фауну. У зв'язку з індустріалізацією, урбанізацією та змінами клімату питання контролю якості повітря набуває все більшої актуальності. Для ефективного оцінювання стану повітря застосовуються сучасні методи моніторингу, які дозволяють отримувати точні та оперативні дані.

### **Основні методи моніторингу:**

- **Стаціонарні станції моніторингу** повітря є основними засобами для довгострокового аналізу якості повітря. Вони обладнані спеціальними сенсорами та аналізаторами, які вимірюють концентрації шкідливих речовин, таких як діоксид сірки ( $\text{SO}_2$ ), оксиди азоту ( $\text{NO}_x$ ), озон ( $\text{O}_3$ ) та тверді частки ( $\text{PM}_{2.5}$ ,  $\text{PM}_{10}$ ). Ці станції забезпечують точні вимірювання, однак вони мають обмежену географічну охопленість і високу вартість утримання.

- **Мобільні лабораторії** дають змогу проводити вимірювання у різних локаціях, що особливо важливо для оцінки якості повітря у важкодоступних місцях або зонах екологічних катастроф. Вони оснащені газоаналізаторами, піломірами та іншими приладами, що дозволяють проводити комплексний аналіз забруднюючих речовин.

- **Дистанційні методи моніторингу** завдяки розвитку технологій дистанційного зондування, супутники та безпілотні літальні апарати (дрони) відіграють важливу роль у контролі якості повітря. Супутникові дані дозволяють відстежувати поширення забруднюючих речовин у глобальному масштабі, тоді як дрони забезпечують локальний аналіз в реальному часі.

- **Сенсорні мережі** завдяки розвитку Інтернету, широкого розповсюдження набули компактні сенсори, які встановлюються у міських районах та на промислових об'єктах. Вони працюють у складі розподілених мереж, збираючи дані про якість повітря та передаючи їх у хмарні сервіси для подальшого аналізу.

- **Громадський моніторинг** активну роль у контролі стану повітря відіграє громадський моніторинг, де мешканці міст використовують персональні датчики якості повітря. Такі ініціативи підвищують обізнаність населення та сприяють швидкому реагуванню на екологічні проблеми [1].

Попри значний прогрес у розвитку технологій моніторингу, існують певні виклики:

- **Недостатнє фінансування.** Встановлення та обслуговування високоточних станцій вимагає значних інвестицій.

- **Обмежена доступність даних.** У багатьох країнах екологічні дані не завжди відкриті для громадськості.

- **Різниця у методологіях.** Відмінності у підходах до вимірювання ускладнюють глобальне порівняння даних.

- **Вплив кліматичних факторів.** Погодні умови можуть спотворювати результати вимірювань, що потребує корекційних алгоритмів.

Подальший розвиток моніторингу якості повітря пов'язаний із такими напрямками:

- **Інтеграція штучного інтелекту та машинного навчання** для аналізу великих обсягів даних та прогнозування рівня забруднення.

- **Підвищення доступності мобільних додатків** для інформування населення про стан повітря в реальному часі.

- **Розширення глобальних моніторингових систем** за рахунок супутникових технологій.



• **Створення нових сенсорних матеріалів** для точніших і доступніших засобів контролю якості повітря [2].

Сучасні методи моніторингу якості атмосферного повітря відіграють ключову роль у збереженні екології та здоров'я людей. Попри наявні виклики, технологічний прогрес відкриває нові можливості для підвищення точності та доступності моніторингових систем. Ефективний контроль за якістю повітря є важливим кроком на шляху до сталого розвитку та створення комфортних умов для життя.

1. Моніторинг довкілля Аналітична записка щодо стану та перспектив розвитку державної системи моніторингу довкілля URL: <https://surl.li/qrnga> (дата звернення 10.03.2025р.)

2. Екологічний моніторинг. Навчальний посібник URL: <https://surl.li/cymybt> (дата звернення 12.03.2025 р.).

## ТЕСТ-ВИЗНАЧЕННЯ ЙОНІВ $\text{Cr}^{3+}$ , $\text{Pb}^{2+}$ У СКЛАДІ ОПАЛОГО ЛИСТЯ

*Кавалжи О.М., Кристат Н.О., Солдаткіна Л.М.*

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, [kavalzhy.oleh@stud.onu.edu.ua](mailto:kavalzhy.oleh@stud.onu.edu.ua)

Однією з важливих екологічних проблем є щорічна утилізація опалого листя. Науково обґрунтовані методи переробки опалого листя, зокрема компостування, біодеградація або виробництво паливних брикетів, мають враховувати вміст токсичних речовин [1]. В умовах урбанізованих територій листя дерев, що ростуть вздовж доріг, у промислових зонах або поблизу підприємств, діє як природний сорбент, поглинаючи шкідливі речовини з повітря, ґрунту та води. Особливу небезпеку становлять йони важких металів, які можуть мігрувати з листя у ґрунт або воду при розкладанні органічної маси [2]. Для швидкого та простого моніторингу вмісту йонів важких металів необхідно розробляти та вдосконалювати експресні методики їх визначення.

Розробка і застосування тест-методик базується на різних типах хімічних реакцій, які забезпечують певне забарвлення у невеликих об'ємах розчинів, або на різних носіях. Для визначення вмісту речовин будують калібрувальні тест-шкали, за якими порівнюють зразок.

Мета роботи – розробити та експериментально перевірити методики тест-визначення вмісту йонів важких металів ( $\text{Pb}^{2+}$  і  $\text{Cr}^{3+}$ ) в опалому листі (тополі, берези, акації), зібраного з різних територій Пересипського району м. Одеси (паркова зона (Кримський бульвар), селище Красносілка, територія біля Одеського ліцею № 49) для оцінки рівня техногенного забруднення довкілля.

В даній роботі при розробці методик тест-визначення вмісту йонів важких металів застосовано в якості носіїв фільтрувальний папір (червона стрічка), лляну тканину ( $\rho = 0,06 \text{ г/см}^2$ ) і силікагель (марка L5/40). Специфічними реагентами слугували для йонів  $\text{Pb}^{2+}$  - дитизон, а для йонів  $\text{Cr}^{3+}$  - дифенілкарбазид. Тест-метод визначення йонів  $\text{Pb}^{2+}$  і  $\text{Cr}^{3+}$  проведено на модельних розчинах з відомою концентрацією плюмбум нітрату і хром(III) сульфату. Проведені дослідження показали, що найменш ефективним носієм виявився фільтрувальний папір. Результати оброблено в програмі Adobe Photoshop шляхом аналізу RGB-координат кольорових зображень, що дозволило кількісно оцінити інтенсивність забарвлення. На основі отриманих даних розроблено візуально-колориметричні шкали, які дають змогу проводити напівкількісне визначення концентрації аналізованих компонентів.

Опале листя відмивали від пилу, сушили при  $25^\circ\text{C}$  до сталої маси, механічно подрібнювали до розміру приблизно 5 мм. Наважку підготовленого опалого листя витримували 7 діб в дистильованій воді (модуль 1:5), потім фільтрували і в отриманому фільтраті визначали вміст катіонів  $\text{Pb}^{2+}$  і  $\text{Cr}^{3+}$  за допомогою виготовлених тест-смужок.

Застосування розроблених тест-методик показало, що найвищий вміст йонів важких металів виявлено в опалому листі на території Одеського ліцею № 49. Вміст йонів  $\text{Cr}^{3+}$  на

цій ділянці перевищує в 15 разів, а йонів  $Pb^{2+}$  - у 2,5 рази щодо аналогічних показників у парковій зоні Кримського бульвару, що може бути зумовлено близькістю залізничної колії. Найменший вміст йонів важких металів зафіксовано в опалому листі, зібраному в селищі Красносілка.

Отже, розроблено методики тест-визначення вмісту катіонів  $Pb^{2+}$  і  $Cr^{3+}$  та апробовано методику тест-визначення вмісту цих йонів в опалому листі різних зон зелених насаджень території Пересипського району м. Одеси.

1. Differential effects of urbanization-induced heavy metal pollution on soil microbial communities under evergreen and deciduous trees / Hu H., Qu L., Tao S., Zhang N. *Pedobiologia*. 2024. Vol. 107. ID 15099.

2. Foliar heavy metal uptake, toxicity and detoxification in plants: A comparison of foliar and root metal uptake / Shahid M. et al. *J. Hazard. Mater.* 2017. Vol. 325. P. 36-58.

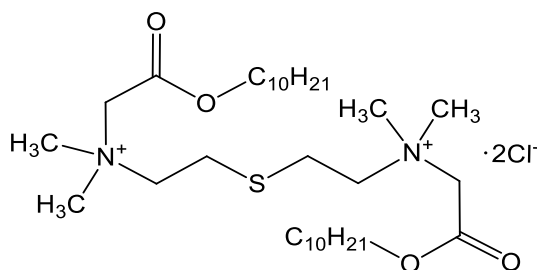
### КІЛЬКІСНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ЛОМАДЕНА КІНЕТИКО-СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНИМ БІОХІМІЧНИМ МЕТОДОМ

*Ковальська О.В., Блажеєвський М.Є.*

Національний фармацевтичний університет, [lena05021985@ukr.net](mailto:lena05021985@ukr.net)

Ломаден (*синім* Тіоній) – дихлорид біс-((N,N-диметил-N-карбодецоксиметил)-N-етиламонію сульфід, який продукує у вигляді порошку. Дослідне виробництво Інституту органічної хімії Національної академії наук України, належить до класу бісчвертинних амонійних солей (Рис. 1). Має широкий спектр протимікробної, фунгіцидної та протистозидної дії. До дії препарату високочутливі найпростіші, стафілококи, стрептококи, пастерели, сальмонели, збудники аспергільозу, кандидозів та дизентерії. Ломаден використовується у ветеринарній практиці для лікування колібактеріозу, сальмонельозу, гастроентеритів, токсичної диспепсії, аспергільозу, респіраторних захворювань, а також для профілактики шлунково-кишкових захворювань. Ефективність дії Ломадену на золотистий стафілокок у чотири рази, а на кишкову паличку у 10 разів вище, ніж у препарта «Етоній».

Ломаден запатентований у США, Великобританії, Німеччині, Франції та Японії [1].



біс-(N,N-диметил-N-карбодецоксиметил)-  
N-етиламоній сульфід дихлорид

**Рис. 1.** Хімічна формула Ломадена.

Запропоновано новий біохімічний кінетико-спектрофотометричний метод для кількісного визначення Ломадена у водних розчинах за ефектом пригнічення активності ферменту холінестерази, який оцінювали за залишком ацетилхолінового субстрату за допомогою індикаторної реакції окиснення 3,3',5,5'-тетраметилбензидину гідроген пероксидом при рН 8,3. Ступінь інгібування (Inh, %) розраховували за формулою:

$$\text{Inh, \%} = \frac{\text{tg } a_i - \text{tg } a_{\text{Ach+ChE}}}{\text{tg } a_{\text{Ach}} - \text{tg } a_{\text{Ach+ChE}}} \times 100\%$$

Де  $\text{tg } \alpha_{\text{Ach}}$  – тангенс кута нахилу лінійної ділянки кінетичної кривої у досліді з Ach за відсутності ChE та інгібітора;  $\text{tg } \alpha_{\text{Ach+ChE}}$  – тангенс кута нахилу лінійної ділянки кінетичної кривої у досліді з (Ach +ChE) за відсутності інгібітора;  $\text{tg } \alpha_i$  – тангенс кута нахилу лінійної ділянки кінетичної кривої у досліді з [Ach + (ChE+Inh)] в присутності інгібітора.

Вимірювання світлопоглинання розчинів виконували на спектрофотометрі при 422 нм у кварцовій кюветі з товщиною поглинаючого шару 1 см. Швидкість реакції оцінювали за тангенсом кута нахилу лінійних ділянок кінетичних кривих залежності А від часу, у хв.

Як видно з рис. 2, залежність ступеня інгібування від концентрації інгібітора зберігає лінійний характер в інтервалі 20 - 80%, що відповідає концентрації інгібітора 7,5 нг/мл - 200 нг/мл. Характеристики лінії регресії наведені в таблиці.

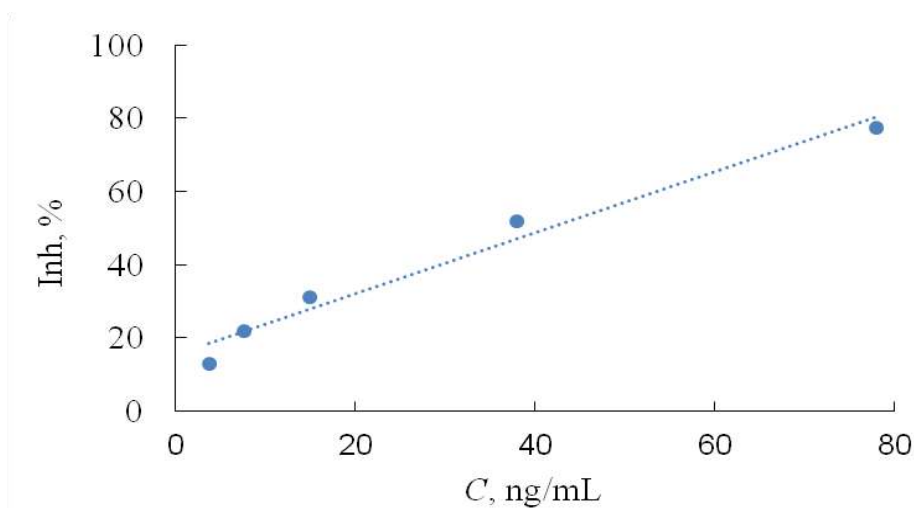


**Рис. 2.** Залежність ступеня інгібування від концентрації інгібітора.

**Таблиця**

Характеристики лінії регресії

| Характеристики              | Параметри                       |
|-----------------------------|---------------------------------|
| $Y=a+bx$                    | $y = 0.8327 x + 15.32$          |
| Correlation coefficient (r) | 0.986                           |
| Рівняння лінії регресії     | $\text{Inh} = 0.8327 C + 15.32$ |
| $b \pm \Delta b$            | $0.8327 \pm 0.2600$             |
| $a \pm \Delta a$            | $15.32 \pm 10.29$               |
| $S_b$                       | 0.08171                         |
| $S_a$                       | 3.2326                          |
| $LOD$ , нг/мл               | 11.65                           |
| $LOQ$ , нг/мл               | 38.82                           |

**Висновки.** Опрацьована методика та показана можливість кількісного визначення Ломадену у водних розчинах, виготовлених *ex tempore*, ферментно-кінетичним методом. *RSD* не перевищує 2,5% при правильності ( $\delta$ ) = -0,45...-2,00% ( $\delta < RSD$ ). *LOQ* становить 39 нг/мл.

1. Лозинський О.М., Геваза Ю.І., Махновський М.К., Дмитрук В.С. Стан розробок субстанцій лікарських препаратів в Інституті органічної хімії НАН України. *Фармац. журн.* - 2000. - №4.- С. 3-9.

# МОДИФІКУВАННЯ НАНОЧАСТИНОК ЦИНК ОКСИДУ ФЕНІЛСИЛІЛЬНИМИ ГРУПАМИ ДЛЯ ВИЛУЧЕННЯ МЕТИЛЕНОВОГО СИНЬОГО

*Козакевич Р.Б., Севостьянов С.В., Тьортих В.А.*

Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, [kozakevychl@gmail.com](mailto:kozakevychl@gmail.com)

Барвники є однією з найбільших груп забруднювачів навколишнього середовища через їхнє широке використання в текстильній, харчовій, поліграфічній, фармацевтичній та інших галузях промисловості. Метиленовий синій є найпоширенішим барвником, який застосовується для забарвлення паперу, бавовни, вовни і шовку в яскраво-синій колір [1]. Його надходження у водойми через промислові стічні води становить серйозну екологічну загрозу. Традиційні методи очищення часто неефективні, що стимулює пошук нових матеріалів. Наночастинки цинк оксиду (ZnO) привабливі для фотокаталітичної деградації метиленового синього завдяки розвиненій питомій поверхні та хімічній стабільності [2]. Проте використання наночастинок ускладнюється небажаною агрегацією та низькою адсорбційною ємністю по барвнику, що дуже важливо для першої стадії гетерогенного фотокаталізу. Ми припустили, що введення в поверхневий шар наночастинок ZnO фенільних груп може зменшити агрегацію та покращити адсорбційні властивості щодо молекул барвника за рахунок  $\pi$ -взаємодій з ароматичними структурами.

Дана робота присвячена дослідженню модифікування поверхні наночастинок ZnO фенілсилільними групами з метою підвищення їх адсорбційної здатності щодо метиленового синього у водних розчинах.

Для одержання нанопорошку цинк оксиду з прищепленими фенілсилільними групами проводили реакцію поверхневих груп ZnO з фенілтриметоксисиланом. Для цього 30 г порошку цинк оксиду поміщали в реактор і потім поступово додавали 6,23 мл фенілтриметоксисилану (0,2 мл на 1 г ZnO). Процес модифікування проводили при температурі 60°C протягом 1 години. Отриманий продукт сушили при 90°C. Модифікування проводили без використання розчинників у реакторі з псевдорозрідженим шаром.

ІЧ-спектри вихідного порошку ZnO та продукту після його модифікування представлено на рис. 1.

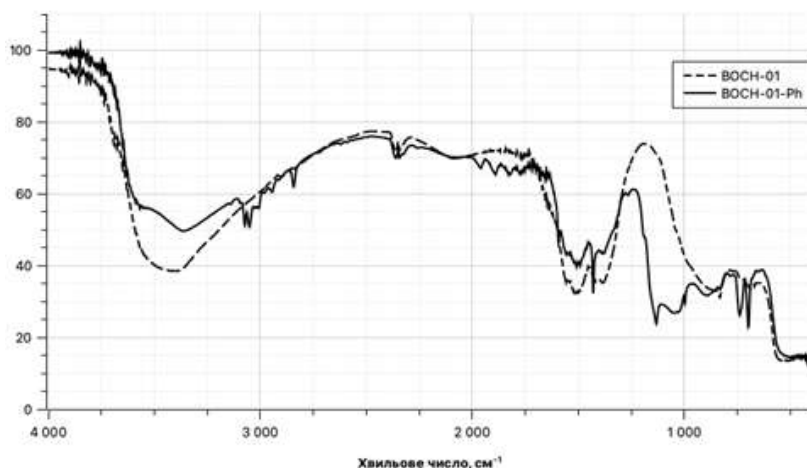


**Рис 1.** ІЧ спектри вихідного та модифікованого фенілсилільними групами ZnO.

В ІЧ-спектрах вихідного нанопорошку ZnO наявне широке поглинання в діапазоні 3100-3600  $\text{cm}^{-1}$  в результаті накладення смуг валентних коливань структурних гідроксильних груп і адсорбованих молекул води. Смуга при 1600  $\text{cm}^{-1}$  відповідає деформаційним коливанням Н-О-Н і свідчить про наявність в досліджуваних зразках води в незв'язаному стані. Поглинання, що є характерним безпосередньо для ZnO, є смуга при 500  $\text{cm}^{-1}$  і вузька

смуга поглинання при  $675\text{ см}^{-1}$ , що спостерігаються для деформаційних решітчастих коливаннях зв'язків Zn-O. В ІЧ-спектрі зразку наопорошку оксиду цинку з прищепленими фенілсилільними групами присутні вузькі, характерні для фенільних груп смуги в області  $1400\text{--}1600\text{ см}^{-1}$  (рис. 1). Крім цього, присутні смуги поглинання Si-O. За характером смуг поглинання можемо стверджувати, що на поверхні наночастинок формується поліфенілсилоксановий шар.

Для вивчення кристалічної структури вихідного нанопорошку оксиду цинку та після модифікування фенілтриметоксисиланом застосовувався метод рентгенівської дифракції. На рис. 2 наведені дифрактограми відповідних зразків. Присутність чітких дифракційних піків вказує на наявність кристалічної структури для обох матеріалів.

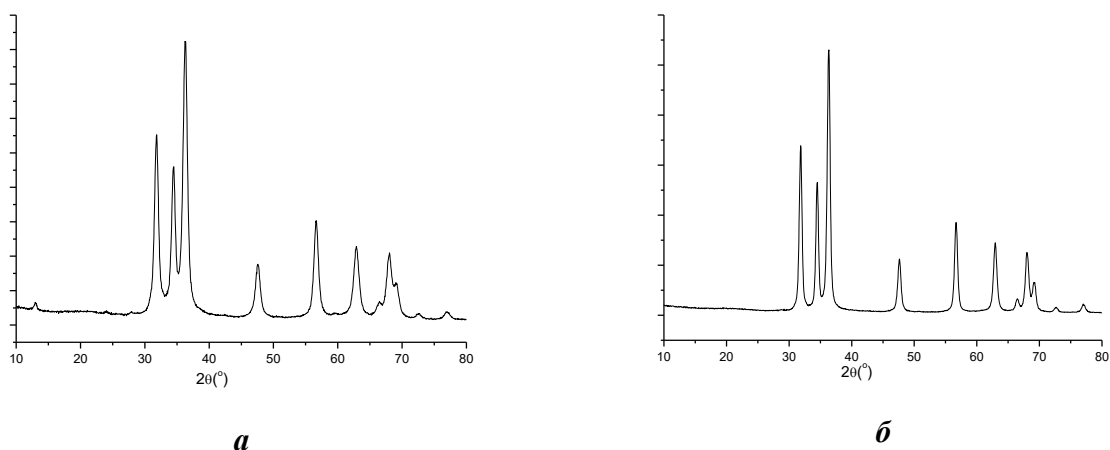


**Рис 2.** Рентгенівські дифрактограми нанопорошку вихідного (а) та модифікованого фенілсилільними групами цинк оксиду (б).

Порівнюючи інтенсивності піків та їх положення щодо кутів дифракції  $2\theta$  зі значеннями, наведеними в JCPDS для рентгенівської дифракції оксиду цинку, було виявлено, що дані матеріали мають гексагональну решітку [3]. Крім того, за допомогою формули Дебая–Шерера було визначено середній розмір кристалітів. Для вихідного зразка та цинк оксиду, модифікованого фенілсилільними групами, розмір кристалітів становить 30-50 нм.

СЕМ-мікрофотографії вихідного та модифікованого матеріалу представлено на рис. 3. СЕМ зображення свідчать про збереження розмірів та форми частинок вихідного зразка.

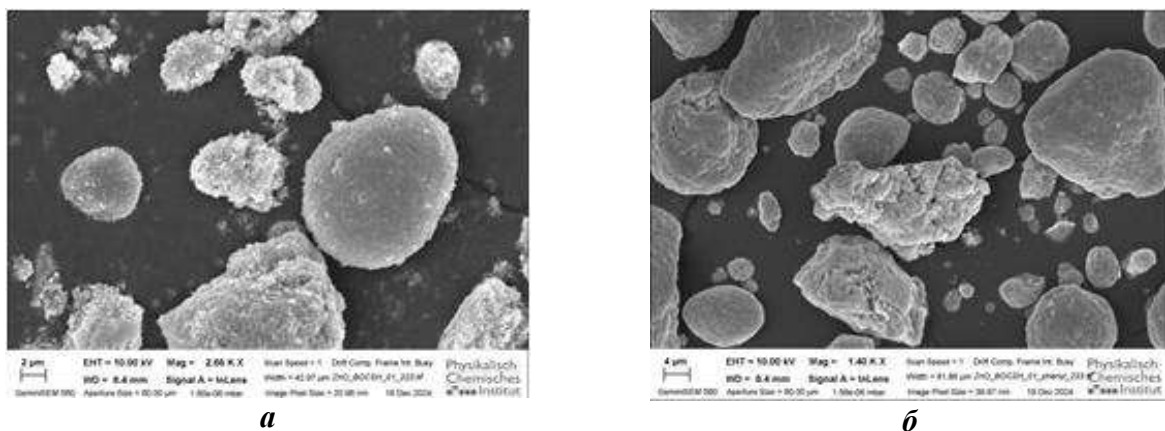


**Рис 3.** СЕМ-зображення вихідного (а) та модифікованого фенілсилільними групами ZnO (б).

Наступним етапом було дослідження сорбційних властивостей вихідного та модифікованого зразку щодо метиленового синього (рис. 4). Дослідження проводили у статичному режимі при періодичному перемішуванні. Для цього використовували 0,1 г адсорбенту на 100 мл розчину з концентрацією барвника 5 мг/л. Концентрацію метиленового синього в розчині визначали спектрофотометричним методом при довжині хвилі 664 нм.

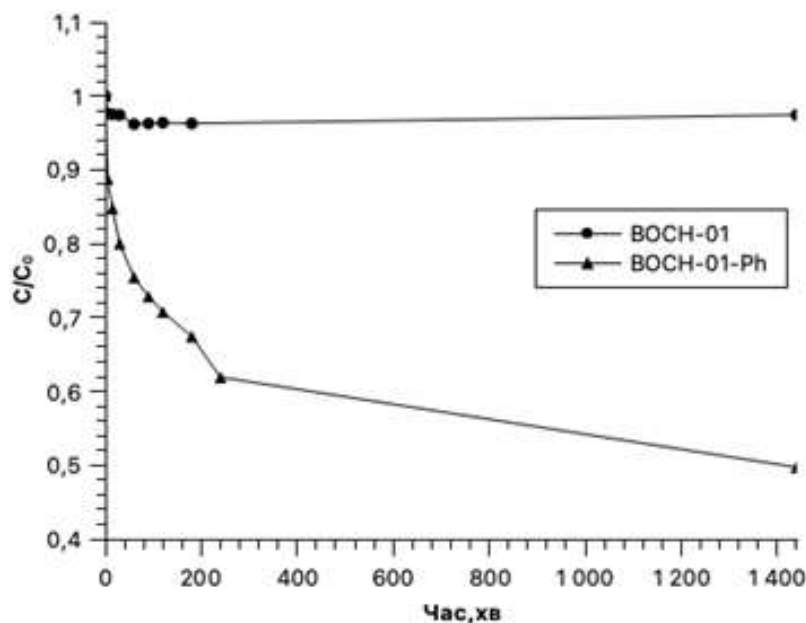


**Рис 4.** Кінетика адсорбції метиленового синього на поверхні вихідного та модифікованого фенілсилільними групами ZnO ( $C_0$  – початкова концентрація барвника 5 мг/л,  $C$  – концентрація в певний момент часу).

Представлені результати свідчать про перспективність застосування алкоксисиланів з фенільними групами для дизайну на поверхні активних центрів концентрування молекул метиленового синього при створенні ефективних наноматеріалів у сфері водоочистки.

1. Oladoye P., Ajiboye T., Omotola E., Oyewola O. Methylene blue dye: Toxicity and potential elimination technology from wastewater. - *Results in Engineering*. - 2022. - V.16. 100678- P.1-17.
2. Halim O. M. A., Mustapha N. H., Mohd Fudzi S. N., Azhar R., Zanal N. I. N., Nazua N. F., *et al.* A review on modified ZnO for the effective degradation of methylene blue and rhodamine B - *Results in Surfaces and Interfaces*. - 2025. - V.18.- P. 100408.
3. Ananthu C. Mohan, B. Renjanadevi, Preparation of zinc oxide nanoparticles and its characterization using scanning electron microscopy (SEM) and X-Ray diffraction (XRD), *Procedia Technology*, - 2016. - V. 24. - P. 761-766.



## КОМПЛЕКСИ ТРИХЛОРАЦЕТАТІВ ЛАНТАНОЇДІВ З КРАУН-ЕТЕРАМИ ТА ЇХ ЕКСТРАКЦІЯ ОРГАНІЧНИМИ РОЗЧИННИКАМИ

*Кроніковський О.І.<sup>1</sup>, Михалюк А.П.<sup>1</sup>, Стаднічук Н.О.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Національний університет харчових технологій, , Україна, [oleg.kronikovsky@gmail.com](mailto:oleg.kronikovsky@gmail.com)

<sup>2</sup>ДП «Науковий центр превентивної токсикології, харчової та хімічної безпеки імені академіка Л. І. Медведя Міністерства охорони здоров'я України», Україна

Необхідно відзначити, що для рідкісноземельних елементів неможливо побудувати такі ряди вибірковості, які відомі для екстракційних систем краун-етер – катіон лужного або лужно-земельного металу. В випадку лантаноїдів ряд вибірковості залежить не лише від будови краун-етера, а й від природи розчинника та протийона. Так найкраща екстракція хлороформом пікратів рідкісноземельних елементів спостерігалась для Pr і Nd для 15-краун-5, 18-краун-6 і дибензо-18-краун-6, в той же час як у хлористому метилені спостерігалась висока екстракція пікрату Sm для бензо-краун-етерів і La – для дициклогексил-18-краун-6. При екстракції нітратів РЗЕ бенzenом в присутності 18-краун-6 і дициклогексил-18-краун-6 залежність коефіцієнтів розподілу відповідних комплексів від атомного номера РЗ-йонів має два максимуми – для Ce – Nd і для Gd – Dy, а при вилученні трихлорацетатів лантаноїдів 1,2-дихлоретаном спостерігається монотонне зниження коефіцієнтів розподілу зі збільшенням атомного номера.

Нам виявилось цікавим отримати дані про склад та константи екстракції трихлорацетатів лантаноїдів в присутності краун-етерів. В якості розчинника нами був вибраний хлороформ, для якого отримані значення констант екстракції для значної кількості трихлорацетатних комплексів.

Тризарядні катіони Лантану, Церію, Празеодиму і Неодиму в присутності краун-етерів 18-краун-6, 15-краун-5 і дициклогексил-18-краун-6 та трихлорацетату літію в різній мірі екстрагуються хлороформом. Склад екстрагованих комплексів визначено методом зміщення рівноваги. Комплекси містять одну молекулу краун-етеру та три трихлорацетат-йони. Таким чином, процес екстракції можна відобразити слідуєчим рівнянням:  $M^{3+}_{(в.)} + 3 CCl_3COO^{-}_{(в.)} + L_{(орг.)} \leftrightarrow ML(CCl_3COO)_{3(орг.)}$ . Виходячи із даних методу зміщення рівноваги, нами розраховані концентраційні константи екстракції комплексів РЗЕ з краун-етерами та трихлорацетат-йоном (табл. 1).

При розрахунках враховували, що введення в водну фазу трихлорацетату літію веде до зниження коефіцієнта розподілу краун-етера між хлороформом та водою в відповідності рівнянню Сеченова  $lgD/P_o = k$  (для 18-краун-6  $k = -0,75$ ). Стійкість бінарних комплексів РЗЕ з 18-краун-6 в воді незначна, тому утворенням їх в умовах нашого експеримента можна знехтувати. Асоціація трихлороцтової кислоти з краун-етерами при  $pH > 3$  також незначна. Вплив йонної сили на активність йонів РЗЕ та трихлорацетат-йонів враховували з допомогою рівняння Девіс.

Відкореговані таким чином значення констант являють собою термодинамічні константи екстракції (табл. 2).

Отримані значення  $K_{ex}$  свідчать, що екстракційна здатність в трихлорацетатній системі знижується в ряду 18-краун-6 > дициклогексил-18-краун-6 >> дибензо-18-краун-6 для 18-членних макроциклів. Не зважаючи на те, що за радіусом йони  $Ln^{3+}$ , ближчі до 15-краун-5, ніж до 18-краун-6, однак екстракція 15-членними макроциклами значно менш ефективна.

Звертає на себе увагу відмінність складу і констант екстракції трихлорацетатних і пікратних комплексів РЗЕ з 18-краун-6. Причиною цього може бути суттєво інша сольватація трихлорацетат-йона в хлороформі. В випадку РЗЕ вплив розчинника та протийона на екстракцію навіть більший, ніж розмір порожнини краун-етера.

Таблиця 1

Визначення константи екстракції комплексу  $\text{La18C6}(\text{CCl}_3\text{COO})_3$ ; ( $C_{\text{La}} = 5 \cdot 10^{-5}$  моль/л)

| $C_{\text{ССВЗСОО-}}$<br>моль/л | $C_{18\text{C6}}$<br>моль/л | $D_{18\text{C6}}$ | R, % | $\lg K_{\text{ex}}$ |                |
|---------------------------------|-----------------------------|-------------------|------|---------------------|----------------|
|                                 |                             |                   |      | концентраційна      | термодинамічна |
| 0,4                             | 0,020                       | 2,91              | 20   | 2,42                | 4,31           |
| 0,5                             | 0,020                       | 2,46              | 30   | 2,38                | 4,30           |
| 0,6                             | 0,020                       | 2,07              | 42   | 2,40                | 4,33           |
| 0,7                             | 0,020                       | 1,75              | 52   | 2,39                | 4,32           |
| 0,8                             | 0,020                       | 1,47              | 64   | 2,47                | 4,38           |
| 0,9                             | 0,020                       | 1,24              | 69   | 2,44                | 4,32           |
| 1,0                             | 0,020                       | 1,05              | 76   | 2,49                | 4,33           |
| 1,0                             | 0,002                       | 1,05              | 26   | 2,54                | 4,38           |
| 1,0                             | 0,006                       | 1,05              | 48   | 2,48                | 4,32           |
| 1,0                             | 0,010                       | 1,05              | 63   | 2,52                | 4,36           |
| 1,0                             | 0,014                       | 1,05              | 71   | 2,53                | 4,37           |
| 1,0                             | 0,020                       | 1,05              | 76   | 2,49                | 4,33           |
| 1,0                             | 0,030                       | 1,05              | 82   | 2,47                | 4,31           |

$$\lg K_{\text{ex}}(\text{конц.}) = 2,33 \pm 0,04$$

$$\lg K_{\text{ex}}(\text{терм.}) = 4,34 \pm 0,02$$

Таблиця 2

Константи екстракції трихлорацетатних комплексів тризарядних йонів металів  
з краун-естерами хлороформом

| Краун-<br>естер | Йон<br>металу    | Радіус<br>йона; Å | $\lg K_{\text{ex}}$<br>(трихлорацетат) |                 | $\lg K_{\text{ex}}$<br>(пiкрат) |
|-----------------|------------------|-------------------|----------------------------------------|-----------------|---------------------------------|
|                 |                  |                   | концентраційна                         | термодинамічна  |                                 |
| 18C6            | $\text{La}^{3+}$ | 1,061             | $2,33 \pm 0,04$                        | $4,34 \pm 0,02$ | 7,18                            |
|                 | $\text{Ce}^{3+}$ | 1,034             | $1,96 \pm 0,02$                        | $3,83 \pm 0,01$ | -                               |
|                 | $\text{Pr}^{3+}$ | 1,013             | $1,46 \pm 0,03$                        | $3,34 \pm 0,01$ | 7,72                            |
|                 | $\text{Nd}^{3+}$ | 0,995             | $0,71 \pm 0,03$                        | $2,60 \pm 0,02$ | 7,62                            |
| 15C5            | $\text{La}^{3+}$ |                   | $0,16 \pm 0,01$                        | $2,01 \pm 0,01$ | 5,78                            |
|                 | $\text{Nd}^{3+}$ |                   | $-0,80 \pm 0,01$                       | $1,04 \pm 0,01$ | 6,84                            |
| DC18C6          | $\text{La}^{3+}$ |                   | $1,66 \pm 0,01$                        | $3,51 \pm 0,01$ | -                               |
| DB18C6          | $\text{La}^{3+}$ |                   | < -1                                   |                 | 4,85                            |

## МАС-СПЕКТРОМЕТРИЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ЗМІН СКЛАДУ БІОДИЗЕЛЮ В РЕЗУЛЬТАТІ ОКИСНЕННЯ

*Кузема П.О., Ставинська О.М., Фесенко Т.В., Лагута І.В.*

Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, [coralchance@gmail.com](mailto:coralchance@gmail.com)

Біодизельне паливо - перспективне альтернативне джерело енергії завдяки його екологічним, економічним та енергетичним перевагам. Нестабільність при зберіганні є основним недоліком використання біодизелю, а отже, важливим науковим завданням являється пошук інгібіторів процесів його окиснення, а також пошук методів дослідження змін складу ефірів ненасичених жирних кислот (основних компонентів біодизелю), які схильні до автооксидзації, що і приводить до їх деградації, зменшення терміну зберігання та погіршення якості біопалива.

Метою даної роботи було дослідити зміни компонентів біодизелю за допомогою методу мас-спектрометрії з лазерною десорбцією/іонізацією.

В роботі досліджували 2 види біодизелю, які були одержані з олії ріпаку (B1) та олії ріжю сійного (B2) відповідно. Бюкси з наважкою 10 г біодизелю витримували за кімнатної температури впродовж 9 місяців, а також при температурі 43°C з доступом повітря протягом 12 тижнів; кожен тиждень витримування при температурі 43°C відповідає 1 місяцю зберігання палива в звичайних умовах. Зразки біодизелю було одержано в Інституті біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря НАН України.

Якісний та напівкількісний аналіз зразків біодизелю проводили за допомогою метода часопротіної мас-спектрометрії з лазерною десорбцією/іонізацією (ЛДІ МС). Мас-спектри фіксували у режимі реєстрації позитивних іонів з використанням мас-спектрометра Autoflex II (Bruker Daltonics Inc., Німеччина). Підготовка проб для аналізу проводилась наступним чином. На сталеву мішень наносили 0,5 мкл зразка по всій площі лунки. Залишок відбирали таким чином, щоб у результаті на поверхні мішені залишалась тонка плівка олії. Зразки піддавали лазерній десорбції/іонізації в імпульсному режимі: тривалість імпульсу лазера складала 3 нс, частота – 20 Гц. Спектри позитивних йонів реєстрували в лінійному режимі з затримкою екстракції іонів 10 нс та прискорюючою напругою 20 кВ. Результуючі спектри являли собою суму 20 індивідуальних спектрів, одержаних у результаті опромінення 25 імпульсами в кожній окремій точці мішені з нанесеним зразком. Величину потужності лазера визначали за оптимальним співвідношенням сигнал/шум. Обробку мас-спектрів проводили з використанням програмного забезпечення FlexAnalysis, Bruker Daltonics, Німеччина.

Приклад ЛДІ мас-спектрів зразків біодизелю (вихідних та після 12 тижнів витримки на повітрі у термостаті за температури 43°C) наведено на рисунку нижче. Як видно з мас-спектрів, для вихідних зразків B1 і B2 характерними є піки, що віднесено до молекулярних іонів-аддуктів етилових ефірів карбонових кислот з лужними металами ( $[M+Na]^+$  та  $[M+K]^+$ ): олеїнової ( $m/z$  333 і 349), лінолевої ( $m/z$  331 і 347) та ліноленової ( $m/z$  329 і 345) кислот. Також у спектрах спостерігаються піки, що можна віднести до молекулярних іонів-аддуктів ( $[M+Na]^+$ ) окиснених форм кислотних залишків у вищевказаних ефірах ( $m/z$  358-368). Величина співвідношення інтенсивностей піків, що відповідають ефірам з двома та трьома подвійними  $-C=C-$  зв'язками ( $m/z$  329 і 331) та ефірів з одним подвійним зв'язком ( $m/z$  333) є набагато вищою для зразка B2. Відповідно, є підстави вважати, що зразок B2 є більш схильним до подальшого окиснення.

Після тривалої витримки зразків B1 і B2 при температурі 43°C, співвідношення інтенсивностей піків  $I_{329}/I_{333}$  та  $I_{331}/I_{333}$  різко спадає в обох випадках, що підтверджує більш швидке окиснення по ненасичених  $-C=C-$  зв'язках ефірів (див. рис.). До того ж, для зразка B2, як і у випадку тривалої витримки за кімнатної температури (мас-спектри не наведено), спостерігається поява сполук з більшим вмістом кисню ( $m/z$  390-396), демонструючи механізм окиснення шляхом подальшого приєднання кисню по решті ненасичених зв'язків окиснених кислотних залишків. Також, у мас-спектрах окиснених при 43°C зразків B1 і B2 з'являється інтенсивний пік з  $m/z$  336, віднесений до катіон-радикалу окисненого етилового

ефіру ліноленової кислоти. Якщо вважати, що швидкість окиснення киснем повітря ефірів олеїнової кислоти набагато менша, ніж ефірів лінолевої та ліноленової кислоти, то з різниці співвідношень інтенсивностей піків ефірів лінолевої та ліноленової кислот до піків ефірів олеїнової кислоти можна напівкількісно оцінити ступінь окиснення зразків. У таблиці наведено співвідношення інтенсивностей для досліджених зразків, а також оцінено величини ступеня окиснення зразків ( $\alpha$ ), виражені через окиснення ефірів лінолевої та ліноленової кислот по відношенню до ефіру олеїнової кислоти.

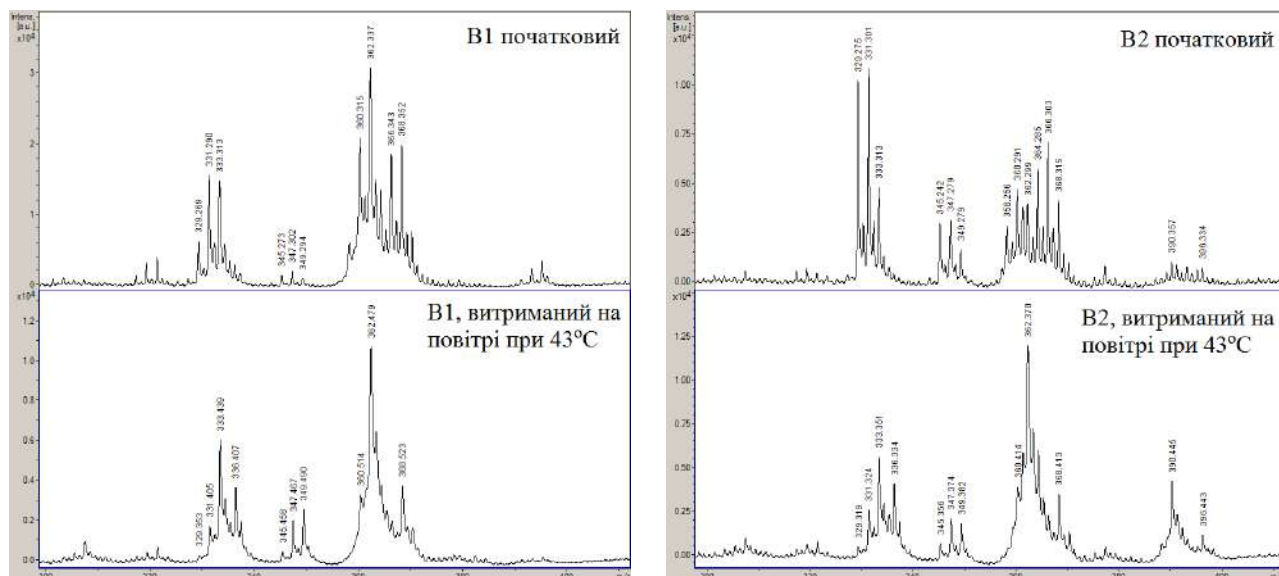


**Рис.** ЛДІ мас-спектри зразків біодизелю В1 та В2 до та після 12-тижневої витримки на повітрі при 43°C.

**Таблиця**

Величини співвідношення інтенсивностей піків з  $m/z$  331 і 329 до інтенсивності піку з  $m/z$  333, ступеня окиснення  $\alpha$  ефірів лінолевих та ліноленових кислот по відношенню до ефірів олеїнових кислот

| Зразок                                      | $I_{331}/I_{333}$ | $I_{329}/I_{333}$ | $\alpha_{331}$ | $\alpha_{329}$ |
|---------------------------------------------|-------------------|-------------------|----------------|----------------|
| В1 вихідний                                 | 1,064             | 0,415             |                |                |
| В1, витриманий на повітрі (9 місяців, 25°C) | 0,411             | 0,084             | 0,614          | 0,797          |
| В1, витриманий на повітрі (12 тижнів, 43°C) | 0,277             | 0,032             | 0,740          | 0,922          |
| В2 вихідний                                 | 2,285             | 2,160             |                |                |
| В2, витриманий на повітрі (9 місяців, 25°C) | 0,742             | 0,210             | 0,675          | 0,903          |
| В2, витриманий на повітрі (12 тижнів, 43°C) | 0,453             | 0,069             | 0,802          | 0,968          |

Примітка.  $\alpha_{331} = (I_{331}/I_{333} (\text{вих.}) - I_{331}/I_{333} (\text{окисл.})) / I_{331}/I_{333} (\text{вих.});$

$\alpha_{329} = (I_{329}/I_{333} (\text{вих.}) - I_{329}/I_{333} (\text{окисл.})) / I_{329}/I_{333} (\text{вих.});$

Як видно з таблиці, при тривалому окисненні (9 місяців) за кімнатної температури розхід ефірів лінолевої ( $\alpha_{331}$ ) та ліноленової ( $\alpha_{329}$ ) кислот по відношенню до ефірів олеїнової кислоти у процесах окиснення зразка В1 (біодизель з ріпаку) склав відповідно 0,614 та 0,797. У випадку ж зразка В2 (біодизель з ріжю) ці показники становили 0,675 і 0,903 відповідно, що свідчить про його більшу вразливість до окиснення повітрям. У режимі прискореного окиснення (температура 43°C) за 12-тижневий період відбулось більш глибоке окиснення обох біодизелів у порівнянні з таким у режимі тривалого окиснення за кімнатної температури (див. відповідні значення  $\alpha_{331}$  і  $\alpha_{329}$  у табл.).

Таким чином, метод мас-спектрометрії з лазерною десорбцією/іонізацією може бути ефективно застосований для вивчення змін складу біодизелю в процесі його окиснення.

## ХРОМАТОГРАФІЧНИЙ АНАЛІЗ ЖОВЧНИХ КИСЛОТ

*Литвин Н.С., Коновалова О.Ю.*

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, [nadiyalityryn2002@gmail.com](mailto:nadiyalityryn2002@gmail.com)

**Вступ та загальна характеристика жовчних кислот.** Жовчні кислоти відіграють важливу роль у метаболізмі людини, оскільки сприяють травленню та всмоктуванню ліпідів. Вони є стероїдними сполуками, що утворюються з холестеролу під час біохімічних реакцій в печінці та можуть існувати у вигляді первинних (холева кислота, хенодезоксихолева кислота) і вторинних жовчних кислот (дезоксихолева кислота, літохолева кислота, урсодезоксихолева кислота), а також у формі кон'югованих жовчних кислот, які утворюють жовчні солі при поєднанні з гліцином або таурином [1,2].

Жовчні кислоти є важливими для емульгування ліпідів, підтримки гомеостазу холестеролу та мікробного метаболізму в кишечнику. Аномальні профілі жовчних кислот асоціюються з різними захворюваннями, такими як холестаз, утворення жовчних каменів і рак товстої кишки. Саме тому точне виявлення та кількісне визначення жовчних кислот є важливими як для клінічної діагностики, так і для фармацевтичних досліджень [3].

Розвиток аналітичних методів для аналізу жовчних кислот зумовлений необхідністю отримання точних профілів цих сполук. Серед використовуваних методів виділяють ензиматичні аналізи та імуноаналізи, однак саме хроматографічні методи забезпечують найвищу специфічність, чутливість і роздільну здатність, що дозволяє отримувати детальні характеристики жовчних кислот у біологічних та харчових зразках. Високоєфективна рідинна хроматографія (ВЕРХ) та газова хроматографія (ГХ) стали стандартними інструментами в клінічних та дослідницьких лабораторіях [1-3].

Метою дослідження є аналіз сучасного стану хроматографічних методів, що використовуються для визначення жовчних кислот, з акцентом на їх принципи, застосування та перспективи розвитку.

**Хроматографічні методи для аналізу.** Жовчні кислоти розділяють трьома основними методами: тонкошарова хроматографія, газова хроматографія і високоефективна рідинна хроматографія. ТШХ, як один з найперших методів, здебільшого використовується для якісного аналізу через свою простоту та низьку вартість [2]. Однак вона має обмежену чутливість і роздільну здатність порівняно з іншими хроматографічними методами. ГХ, особливо в поєднанні з мас-спектрометрією (ГХ-МС) [3], є високоефективною для розділення жовчних кислот з високою роздільною здатністю та специфічністю. Оскільки жовчні кислоти є не леткими, їх необхідно піддавати дериватизації перед аналізом, що ускладнює процедуру. ВЕРХ, особливо в поєднанні з різними детекторами, такими як ультрафіолетовий (УФ), флуоресцентний або мас-спектрометрія (ВЕРХ-МС) [3,4], є найбільш використовуваним методом на сьогодні. ВЕРХ-МС, зокрема, забезпечує високу чутливість, структурну специфічність і здатність виявляти жовчні кислоти на слідових рівнях. Вибір хроматографічного методу залежить від необхідної чутливості, специфічності та матриці зразка, з ВЕРХ-МС, що є переважним методом для комплексного профілювання жовчних кислот [2-4].

**Перспективи розвитку.** Одним із перспективних напрямів аналізу жовчних кислот є поєднання хроматографії з мас-спектрометрією, такою як ВЕРХ-МС і ГХ-МС, що покращує чутливість і специфічність виявлення жовчних кислот. Ще одним перспективним підходом є використання наноматеріалів у стаціонарних фазах, що забезпечує краще розділення сполук та зменшує час аналізу. Завдяки високій питомій поверхні наночастинок, вони покращують ефективність сорбції та розподілу жовчних кислот у колонці [5]. Крім того, активно розвиваються методи мікрохроматографії, які дозволяють здійснювати аналіз у мікрошкалі, використовуючи мінімальні об'єми зразків [1]. Це особливо важливо для клінічної діагностики, де кількість доступного біологічного матеріалу може бути обмеженою. Подальші дослідження також зосереджені на автоматизації та мініатюризації хроматографічних систем, що сприятиме розвитку портативних приладів для швидкого



визначення жовчних кислот у точках діагностики [5]. Це відкриває нові можливості для неінвазивного моніторингу метаболічних порушень, зокрема в гастроентерології та гепатології.

**Висновки.** Хроматографічні методи відіграють важливу роль у аналізі жовчних кислот, пропонують високу чутливість аналізу, селективність та здатність відрізняти структурно схожі жовчні кислоти. Хоча традиційні методи, такі як ТШХ і ГХ, залишаються актуальними для певних застосувань, ВЕРХ і ВЕРХ-МС стали золотим стандартом завдяки своїй високій роздільній здатності та можливостям детекції. Триває дослідження, спрямоване на підвищення ефективності хроматографії за допомогою новітніх матеріалів, мініатюризації та інтеграції мас-спектрометрії. Ці інновації будуть сприяти розвитку досліджень жовчних кислот, поліпшуючи клінічну діагностику, фармацевтичне застосування та оцінку безпеки харчових продуктів.

1. Zhao X., Liu Z., Sun F., Yao L., Yang G., Wang K. Bile Acid Detection Techniques and Bile Acid-Related Diseases. – *Front. Physiol.* – 2022. – V.13. – P.826740.
2. Dutta M., Cai J., Gui W., Patterson A. D. A Review of Analytical Platforms for Accurate Bile Acid Measurement. – *Anal. Bioanal. Chem.* – 2019. – V.411. – I.19. – P.4541–4549.
3. Street J. M., Setchell K. D. R. Chromatographic Methods for Bile Acid Analysis. – *Biomed. Chromatogr.* – 1987. – V.2. – I.6.
4. Saliy O. O., Nikitina O. O., Kovalevska O. I., Lyashenko V. O. Study of the Validation Characteristics of the Method of Quantitative Determination of Ursodeoxycholic Acid in Solid Gelatin Capsules When Assessing the Uniformity of Dosage Units. – *Pharmaceutical Journal.* – 2024. – I.2. – P.22–33. Griffiths W. J., Sjövall J. Bile Acids: Analysis in Biological Fluids and Tissues. – *J. Lipid Res.* – 2010. – V.51. – I.1. – P.23–41.

#### **ЧУТЛИВІ ЕЛЕМЕНТИ ОПТИЧНИХ СЕНСОРІВ ОРГАНІЧНИХ АМІНІВ**

*Марків Ю.Б.<sup>1</sup>, Аксіментьєва О. І.<sup>1</sup>, Конопельник О. І.<sup>1</sup>, Журіна Н.Ю.<sup>1</sup>, Мартинюк Г. В.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Львівський національний університет імені Івана Франка, [markivula@gmail.com](mailto:markivula@gmail.com)

<sup>2</sup>Рівненський державний гуманітарний університет

Органічні аміни широко використовують у промисловості як хімікати для нафтопромислів, добавки для модифікації асфальту, епоксидні затверджувачі та інше. Проте ці речовини є дуже токсичними та вибухонебезпечними, і щоб захистити здоров'я людей та довкілля необхідно розробити чутливі елементи сенсорів для моніторингу цих речовин. Серед великого розмаїття сенсорних речовин велика увага приділяється спряженим полімерним системам. Спряжені полімери продемонстрували великий потенціал у датчиках хімічних газів при кімнатній температурі [1]. Як чутливі елементи в основному досліджуються поліанілін (ПАН), поліпірол, полі(3,4-етилendioксифен) та їх похідні.

Метою роботи стало встановлення закономірностей зміни оптичного поглинання тонких шарів ПАН під дією аміновмісних речовин – аміаку та органічних амінів, а саме диетилентриаміну (ДЕТА) та поліетиленполіаміну (ПЕПА).

Тонкі плівки ПАН отримували окисною полімеризацією аніліну під дією окисників на поверхні скла. Дослідження проводили за допомогою оптичної (спектрофотометр inSpect-105UV) в області 400-1000 нм та ІЧ-спектроскопії (Thermo Scientific Nicolet iZ10 Smart ITR) в діапазоні 4000-500 см<sup>-1</sup>.

Якщо вплив аміаку на оптичні спектри ПАН достатньо добре описаний в літературі [2], то про дію органічних амінів відомостей недостатньо. Встановлено, що під дією всіх досліджених аміновмісних сполук відбуваються суттєві зміни в спектрах оптичного поглинання ПАН, які посилюються зі збільшенням часу контакту з газом (рис. 1 ).



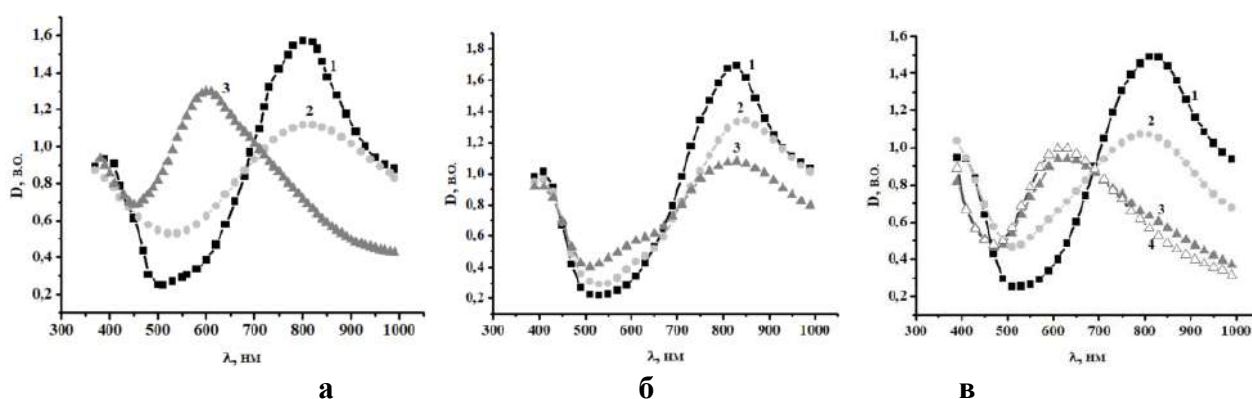


**Рис. 1.** Спектри оптичного поглинання ПАН під дією:  
*а* –  $\text{NH}_3$  (1 – 0 с, 2 – 180 с, 3 – 360 с); *б* – ДЕТА (1 – 0 с, 2 – 360 с, 3 – 540 с);  
*в* – ПЕПА (1 – 0 с, 2 – 180 с, 3 – 360 с, 4 – 600 с).

Дія аміаку та ароматичних амінів зменшує оптичну густину смуги поглинання ПАН при  $\lambda = 820$  нм, що ймовірно пов'язано зі зменшенням концентрації носіїв заряду поляронного типу внаслідок часткової нейтралізації протонованої форми ПАН [3]. При більш тривалих часах дії газу відбувається значний зсув цієї смуги майже на 200 нм і формується нова смуга з максимумом при 590 нм, яка притаманна аміно-хіноїдним структурам нейтралізованої форми полімеру. При цьому колір плівки змінюється з яскраво зеленого, характерного для емеральдинової солі ПАН, на темно-синій, властивий емеральдиновій основі. Для ароматичних амінів швидкість зміни оптичних характеристик дещо нижча порівняно з аміаком, імовірно внаслідок меншої активності аміногрупи, зв'язаної з вуглеводневим ланцюгом ДЕТА і ПЕПА (рис. 1, *б*, *в*).

Згідно даних ІЧ-спектроскопії отриманий ПАН має характеристичні смуги в області  $3500\text{--}3100\text{ см}^{-1}$ , які притаманні для валентних коливань груп –NH і  $\text{NH}_2$ . Характерні піки валентних коливань  $\text{C}=\text{N}$  і  $\text{C}=\text{N}$  хіноїдних (Q) і бензоїдних (B) кілець на  $1539$  та  $1406\text{ см}^{-1}$ , відповідно. Пік при  $1278\text{ см}^{-1}$  – асиметричні деформаційні  $\text{C}-\text{N}$  вторинного ароматичного аміну. Смуга на  $1075\text{ см}^{-1}$  належить  $\text{N}=\text{Q}=\text{N}$  структур.

Під дією аміновмісних речовин вигляд ІЧ-спектрів теж має свої особливості. Суттєві зміни поглинання ПАН спостерігаються у парах ДЕТА. Зростання інтенсивності поглинання смуги в діапазоні  $3500\text{--}3100\text{ см}^{-1}$  свідчить про збільшення вмісту аміновмісних фрагментів в плівці ПАН, внаслідок адсорбції ДЕТА. Водночас смуги, які відповідають бензо-хіноїдним фрагментам також мають більшу інтенсивність при  $1539$  та  $1406\text{ см}^{-1}$ . Все це підтверджує припущення про часткову нейтралізацію емеральдинової форми і збільшення вмісту непровідної основної форми емеральдину.

Чутливість плівок поліаніліну до дії аміновмісних речовин визначено як відносну зміну оптичної густини ( $D$ ) на певній довжині хвилі  $|\Delta D|/D_0$ , а швидкодію як  $|\Delta D|/\tau$ , де  $\tau$  – час зміни оптичної густини (таблиця).

Отримані результати показують, що при довжині хвилі 600 нм сенсорна чутливість плівки ПАН є максимальною для всіх досліджуваних газів. Проте реакція зразків на аміак та ПЕПА є більш вираженою, ніж на ДЕТА. При 600 нм значення чутливості на аміак майже у 3 разів більше, а при 820 нм – у 2 рази більше, ніж для ДЕТА.

Таблиця

Чутливість та швидкодія плівок ПАН до дії аміновмісних речовин

| Довжина хвилі, нм | Чутливість, %   |      |      | Швидкодія, с <sup>-1</sup> |        |        |
|-------------------|-----------------|------|------|----------------------------|--------|--------|
|                   | НН <sub>3</sub> | ДЕТА | ПЕПА | НН <sub>3</sub>            | ДЕТА   | ПЕПА   |
| 600               | 225             | 71,4 | 233  | 0,0025                     | 0,0005 | 0,0012 |
| 820               | 56,7            | 35,3 | 60   | 0,0024                     | 0,0011 | 0,0015 |

Швидкодія плівок ПАН на аміак є найбільшою при довжині хвилі 600 нм, а під дією органічних амінів – при 820 нм. Особливості поведінки оптичних спектрів ПАН під дією ДЕТА і ПЕПА зумовлюється як хімічною будовою цих речовин, так і здатністю до адсорбції на поверхні плівки. Цим фактором також обумовлена різна сенсорна чутливість до парів органічних амінів та швидкодія сенсора.

Отримані результати стануть основою розробки чутливих елементів оптичних сенсорів для виявлення токсичних амінів на забруднених територіях, у виробничих приміщеннях хімічних підприємств, складів та ін.

**Подяка:** Дослідження виконані за грантового фінансування НФД України в рамках конкурсу «Наука для зміцнення обороноздатності України» за проектом 2023.04/0133 (0124U003799) «Розробка детекторів для експрес-контролю токсичних речовин на забруднених територіях» (2024-2025).

1. Tirfie L., A. Tegegne N., Gashaw F. Recent progress in hybrid conducting polymers and metal oxide nanocomposite for room-temperature gas sensor applications: A review. – *Sensors and Actuators A: Physical*. – 2023. – V. 359.

2. Tsizh B.R., Aksimentyeva O.I. Organic HighSensitive Elements of Gas Sensors Based on Conducting Polymer Films, *Molec. Cryst. Liq. Cryst.* – 2016. – V.639. – P. 33–38.

3. Ціж Б.Р., Аксіментьєва О.І., Ольхова М.Р., Горбенко Ю.Ю. Сенсорні властивості плівок поліаніліну, отриманих на оптично-прозорих носіях. – *Науковий вісник ЛНУВМБТ імені С.З. Гжицького*. – 2016. – Т.18 №2 (68). С. 121-125.

## АДСОРБЦІЙНЕ ВИЛУЧЕННЯ ТАРТРАЗИНУ З МОДЕЛЬНИХ ВОДНИХ РОЗЧИНІВ ПОЛІАНІЛІНОМ

Марчук І.Є.<sup>1</sup>, Буклів Р.Л.<sup>2</sup>, Засадна В.Т.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Львівський національний університет ім. Івана Франка, [i.marchuk@yahoo.com](mailto:i.marchuk@yahoo.com)

<sup>2</sup>Національний університет "Львівська політехніка"

Водні ресурси кожної країни є, передусім, джерелами постачання питної води населенню. Тому забруднення води негативно впливає не лише на навколишнє середовище а й становить потенційний ризик для всіх живих організмів [1]. Скидання неочищених як промислових так і побутових стоків становить велику проблему. Серед органічних забруднювачів небезпечними є вуглеводні, хлороорганічні сполуки, розчинники, органічні барвники та інші. Використання барвників для естетичного сприйняття має давню традицію, і з кожним роком кількість різнокольорових предметів лише зростає. Разом з тим дорогі природні барвники замінюють синтетичними. Синтетичні органічні азобарвники характеризуються наявністю однієї або кількох азогруп ( $-N=N-$ ) приєднаних до ароматичного кільця, мають різну хімічну будову і є стійкими до дії світла, кисню. Багато азобарвників і речовин, які утворюються внаслідок їхнього розпаду є токсичними та проявляють канцерогенну дію.

Одним з перспективних методів очистки стічних вод залишається адсорбційний метод, який має ряд переваг. Дослідники спрямовують свої зусилля на пошук й дослідження ефективних матеріалів-адсорбентів, серед яких чільне місце посідають провідні полімери на основі поліаніліну (ПАН) та їх композити [2].

Ця робота спрямована на дослідження сорбції харчового аніонного азобарвника – тартразину (TZ) (рис. 1) з його модельних водних розчинів на поліаніліні. Поліанілін отримано методом окиснювальної поліконденсації аніліну (Sigma-Aldrich) в 1 М розчині HCl і охарактеризовано методом інфрачервоної Фур'є-спектроскопії (FT-IR) (рис. 2).

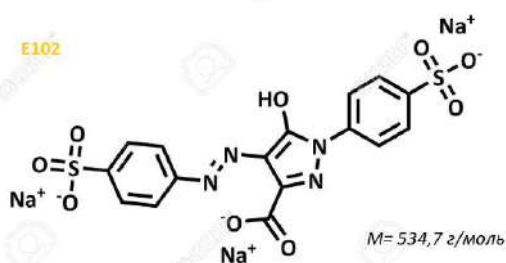


Рис. 1. Будова молекули тартразину.

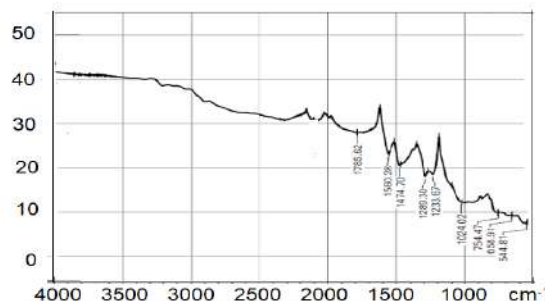


Рис. 2. FT-IR синтезованого ПАН.

Адсорбційні дослідження проводили використовуючи різні наважки ПАН (від 0,01 до 0,04 г) з модельних водних розчинів тартразину (20 мл) за різних його концентрацій (5–100 мг/л) (кімнатна температура, швидкість перемішування 250 об/хв). Концентрації тартразину у розчинах до та після адсорбції визначали фотоколориметричним методом (КФК-3,  $\lambda = 427$  нм).

Отримані результати показують, що адсорбційна ємність ПАН знижується зі збільшенням його маси (рис. 3) що можна пояснити збільшенням кількості активних центрів адсорбції при незмінній вихідній концентрації барвника. Зі збільшенням вмісту барвника (концентрації) спостерігається зростання сорбційної ємності сорбента (рис. 4) оскільки висока початкова концентрація барвника забезпечує необхідну рушійну силу для подолання опору в процесі масопередачі між водною та твердою фазами під час адсорбції. А отже й посиленню процесу адсорбції. Так для концентрації TZ 50 мг/л значення сорбційної ємності становило 99,5 мг/г, відсоток вилучення – 99,5 % (рис. 4, б), отримані показники є кращими порівняно з наведеними в праці [3], де як адсорбент використовували ПАН допований щавлевою кислотою.

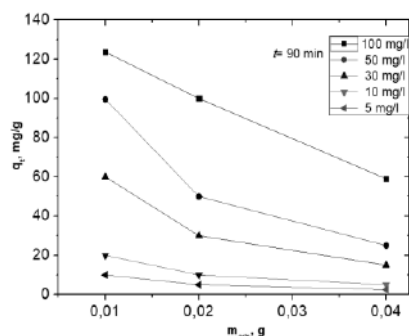


**Рис. 3.** Залежність адсорбційної ємності ПАН стосовно тартразину з його водних розчинів від маси адсорбенту (0,01-0,04 г).

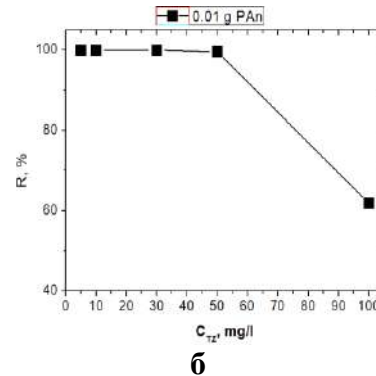
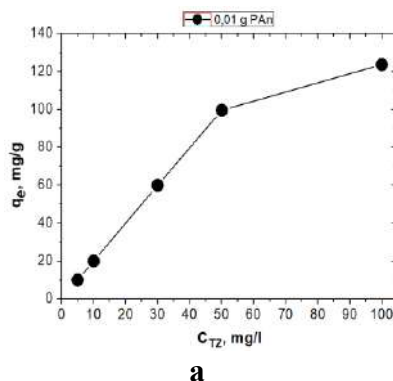


**Рис. 4.** Залежність адсорбційної ємності ПАН (а) та ступеня вилучення (б) від початкової концентрації барвника.

Кінетичні дослідження видалення тартразину з його модельних водних розчинів вказують на те, що адсорбція барвника впродовж перших 20–30 хв є швидкою, а згодом сповільнюється та досягає рівноваги практично через 60 хв для вищих концентрацій TZ (рис. 5). Таку поведінку можна пояснити великою кількістю доступних активних центрів адсорбції на початку та їх поступовим зменшенням в процесі адсорбції.

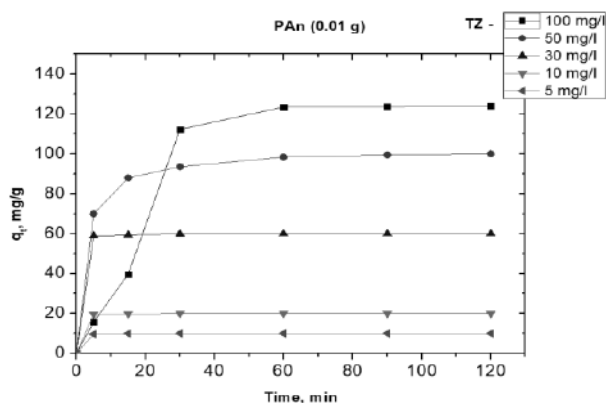


**Рис. 5.** Кінетика адсорбції TZ з модельних водних розчинів на ПАН ( $m_{\text{адс}} = 0,01$  г).

Кінетичні параметри адсорбції тартразину поліаніліном проводили використовуючи кінетичні рівняння псевдопершого та псевдодругого порядку. Встановлено, що механізм адсорбції досліджуваного барвника з модельних розчинів відповідає псевдодругому порядку (коефіцієнт кореляції є близькими до 1 ( $R^2 = 0,99998$ )) та моделі ізотерми Ленгмюра.

**Подяка.** Результати досліджень отримано частково за фінансової підтримки Міністерства освіти і науки України (№ державної реєстрації 0123U101857).

1. <https://firtka.if.ua/blog/view/vpliv-voienikh-diyi-v-ukrayini-na-vodni-resursi-ta-stan-dovkillia>
2. Stejskal J. Recent Advances in the removal of organic dyes from aqueous media with conducting polymers, polyaniline and polypyrrole, and their composites. – *Polymers*. – 2022. – Vol. 14. I. 19. – Art. 4243.
3. Jadhav S., Jaspal D. Adsorptive eradication of tartrazine from aqueous solutions onto doped polyaniline. – *J. Serb. Chem. Soc.* – 2020. – Vol. 85. I. 2. – P. 251–263.

## ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДУ ІНВЕРСІЙНОЇ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРІЇ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ІОНІВ $\text{Cd}^{2+}$ В РІДИНАХ

*Медик І.А., Воробець В.С., Колбасов Г.Я.*

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

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

Токсичність кадмію, як важкого металу, обумовлена його біологічною активністю, стійкістю у природному середовищі та здатністю викликати значні негативні ефекти навіть при низьких концентраціях. Гранично допустима концентрація для кадмію у водних об'єктах становить 0,01 мг/л [1]. Накопичення  $\text{Cd}^{2+}$  у кістках може заміщувати кальцій, знижувати мінеральну щільність кісткової тканини та спричиняти її ламкість [2]. Тривалий вплив кадмію також спричиняє нейротоксичні ефекти, включаючи когнітивні порушення, втрату пам'яті, зниження інтелектуальних здібностей і розвиток нейродегенеративних захворювань, таких як хвороба Паркінсона та Альцгеймера [3].

Тому моніторинг вмісту іонів кадмію є необхідним та актуальним. Контроль концентрації  $\text{Cd}^{2+}$  у водних об'єктах та інших екосистемах дозволить запобігти негативному впливу на здоров'я людини та навколишнє середовище. Перспективними є електрохімічні методи аналізу, які мають значні переваги завдяки їх високій чутливості, вибірковості та можливості проведення аналізу в реальному часі. Одним із ефективних електрохімічних методів є інверсійна вольтамперометрія (ІВАМ), яка забезпечує низьку межу визначення та високу точність аналізу. Типовими електродними матеріалами для ІВАМ є електроди із твердих інертних (золота, платини) чи рідких (ртуть) металів або різних форм вуглецю (скловуглець, піролітичний графіт, а також вугільні пастові електроди). Однак висока вартість, складність синтезу, вірогідність протікання на цих електродах побічних реакцій, які створюють перешкоди для аналітичних сигналів елементів, що визначаються, а також токсичність парів ртуті вимагають пошуку нових недорогих, нетоксичних, хімічно інертних матеріалів із стабільними характеристиками. Перспективним матеріалом для цього є модифікований діоксид титану, каталітична активність якого зростає при його модифікуванні рідкоземельними елементами [4].

Метою даної роботи є дослідження можливостей використання електродів на основі нанокристалічних плівок діоксиду титану, модифікованого рідкоземельними елементами, а саме лантаном, для визначення  $\text{Cd}^{2+}$  у рідинах методом ІВАМ. У роботі розглянуто чутливість і точність методу, а також оцінено можливість застосування даних електродів у аналітиці для екологічного моніторингу.

Нанокристалічні плівки  $\text{TiO}_2$  на підкладці з титанової фольги, модифікованого лантаном ( $\text{La-TiO}_2$ ) було синтезовано золь-гель методом, як прекурсор використано тетраізопропоксид титану. Синтезовані матеріали охарактеризовано методом рентгенівської дифракції. Середній розмір нанокристалітів, розрахований за рівнянням Шеррера, не перевищував 12 нм. Результати РФА показали, що плівки  $\text{TiO}_2$  та  $\text{La-TiO}_2$ , кальциновані при 500°C, у своєму складі мали єдину кристалічну фазу – анатаз.

Суть методу інверсійної вольтамперометрії полягає у попередньому електроконцентруванні іонів кадмію на робочому електроді в катодній області потенціалів з подальшим окисненням продуктів концентрування при анодній розгортці потенціалів, після чого відбувається реєстрація вольтамперограм. На вольтамперограмах (рис.1) для електродів 1%  $\text{La-TiO}_2$  у розчинах з вмістом іонів  $\text{Cd}^{2+}$  після попереднього електроконцентрування спостерігалась хвиля анодного струму, висота якої була пропорційна концентрації  $\text{Cd}^{2+}$ , що є підставою вважати її аналітичним сигналом (АС). Досліджено залежність АС кадмію на електродах від умов визначення: фоновий електроліт – ацетатний буфер з  $\text{pH} = 3.8, 4.5, 5.0, 5.5$ ; потенціал електроконцентрування  $E_c = - (0.8 \div 1.6)$  В; час електролізу  $t_c = (60 \div 300)$  с.; швидкість сканування потенціалу 50  $\text{mV} \cdot \text{s}^{-1}$ .

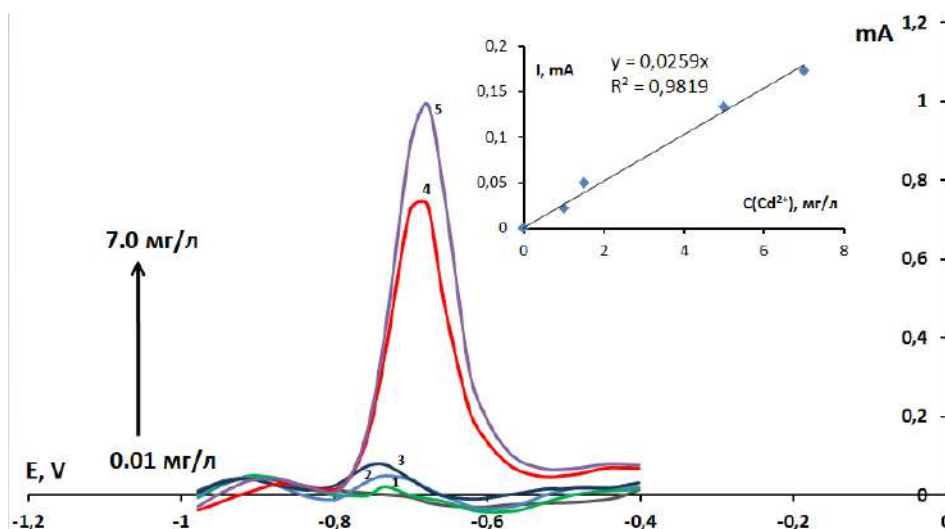


**Рис. 1.** Вольтамперограми на електроді 1% La-TiO<sub>2</sub> в ацетатному буфері pH 5.0 з концентрацією іонів Cd<sup>2+</sup> (мг/л): 1 – 0,01; 2 – 1,0; 3 – 1,5; 4 – 1,0; 5 – 5,0; 6 – 7,0. Потенціал електроконцентрування -1.4 В (відносно Ag/AgCl); час електроконцентрування 180 с.

Встановлено, що селективне визначення Cd<sup>2+</sup> методом ІВАМ на досліджених електродах можна проводити в електролітах на основі ацетатного буферу з pH=5,0. Встановлено оптимальні умови: потенціал електроконцентрування -1,4 В; час електролізу 180 с. Досліджені La-TiO<sub>2</sub> електроди дозволяють визначати концентрацію іонів кадмію у діапазоні 0,01-7,0 мг/л, точність вимірювань 4÷5%. Межа кількісного визначення кадмію на даних електродах становить 0,01 мг/л і є кращим показником порівняно з вугільним електродом, модифікованим ртуттю (0,06 мг/л) [4]; Крім того, La-TiO<sub>2</sub> електроди є нетоксичними, що робить їх безпечнішими для використання у порівнянні з електродами, що містять ртуть [5].

Таким чином, електроди на основі нанокompозитних плівок діоксиду титану, модифікованого лантаном, перспективні для використання в електрохімічних мультисенсорах токсичних елементів для аналізу вмісту Cd<sup>2+</sup>.

1. Наказ МОЗ України No 721 від 02.05.2022 «Про затвердження Гігієнічних нормативів якості води водних об'єктів для задоволення питних, господарсько-побутових та інших потреб населення».

2. Roos P. Osteoporosis in neurodegeneration / P. Roos // *Journal of Trace Elements in Medicine and Biology*. – 2014. – Vol. 28, No. 4. – P. 418-421.

3. Luo H. Cadmium exposure induces osteoporosis through cellular senescence, associated with activation of NF-κB pathway and mitochondrial dysfunction / H. Luo, R. Gu, H. Ouyang, et al. // *Environmental Pollution*. – 2021. – Vol. 290. – P. 118043.

4. Vorobets V.S. Synthesis, Photo- and Electrocatalytic Properties of Nanostructured Y-TiO<sub>2</sub> Films / V.S.Vorobets, G.Y.Kolbasov, I.A.Medyk, et al // *Surface Engineering and Applied Electrochemistry*. – 2021.–Vol. 57, No.5.– P.535–541.

5. Kudr J. Simultaneous automatic electrochemical detection of zinc, cadmium, copper and lead ions a thin-film mercury electrode / J. Kudr, H. V. Nguyen, J. Gumulec, et al // *Sensors*. – 2015.–Vol. 15, No.1.– P.592–610.



## ФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ БЕРВНИКА ЕОЗИН Б А У РОЗЧИНІ

*Олексюк О.Ю.<sup>1</sup>, Камінський О.М.<sup>1</sup>, Денисюк Р.О.<sup>1</sup>, Кучерук С.В.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup> Житомирський державний університет імені Івана Франка, [alexkamin@ukr.net](mailto:alexkamin@ukr.net)

На сьогодні однією з глобальних проблем людства, яка у зв'язку з подіями у світі, набуває все більшого значення – це проблема якості та чистоти питної води. Серед забруднювачів, які потрапляють до водойм унаслідок викидів відходів промисловості, особливе місце можна виділити для барвників.

Як зазначають автори [1-2], щороку у світі синтезують понад  $7 \cdot 10^5$  тон барвників і приблизно 10-15 % різних видів з них викидається у стічні води під час їх синтезу та процесу фарбування. Тому моніторинг вмісту барвників у промислових водах залишається актуальною задачею сьогодення.

Метою даної роботи є фотометричне визначення барвника еозин Б А у розчині.

Оптичну густину барвника з концентрацією 6 мг/л за різних довжин хвиль визначено фотометрично за допомогою фотоколориметра КФК 2 з товщиною кварцової кювети 2 см. У якості розчину для порівняння використано дистильовану воду.

Для експериментального визначення максимальної довжини хвилі поглинання світла розчином барвника еозинового Б А побудовано залежність оптичної густини від довжини хвилі (рис.).

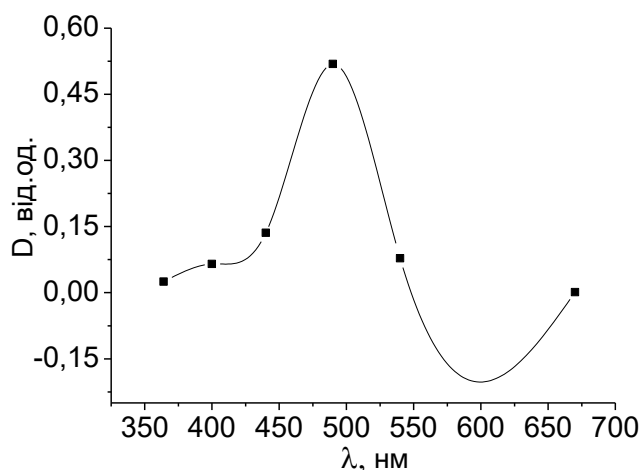


**Рис.** Залежність оптичної густини розчину еозину Б А від довжини хвилі.

Встановлено, що оптимальна довжина хвилі поглинання розчином становить 490 нм, тому для фотометричного визначення цього барвника у розчині можна використовувати дану довжину хвилі.

1. Chatterjee S., Chatterjee S., Chatterjee B., Das A., Guha A. Adsorption of a model anionic dye, eosin Y, from aqueous solution by chitosan hydrobeads. *Journal of colloid and interface science*. - 2005. V. 288. P. 30-35.

2. Ivanets A., Prozorovich V., Roshchina M., et. al. Methylene blue adsorption on magnesium ferrite: Optimization study, kinetics and reusability. *Materials Today Communications*. - 2022. V. 31. 103594.

## ПОШУК ТА ДОСЛІДЖЕННЯ «ЗЕЛЕНИХ» ІНГІБІТОРІВ КОРОЗІЇ МЕТАЛІВ

Петруша Ю.Ю.

НУ «Запорізька політехніка», [yulia.znu@ukr.net](mailto:yulia.znu@ukr.net)

Процес корозії можна характеризувати як руйнування металів і сплавів у результаті їх взаємодії з навколишнім середовищем. В результаті утворюються корозійні продукти, такі як сульфіді, оксиди та інші. Корозія завдає значних економічних збитків виробництву та є глобальною проблемою. Через корозію втрачається багато корисних властивостей металу, відповідно, обладнання, яке містить кородовані ділянки, вже не здатне якісно виконувати свої функції.

Існують різні методи запобігання процесу корозії, одним з яких є додавання хімічних сполук, які називаються інгібіторами. За своїм складом це, зазвичай, органічні або неорганічні сполуки, що дуже часто є токсичними та шкідливими для навколишнього середовища та здоров'я людини. Через такі можливі небезпечні ефекти науковці зосереджують свою увагу на пошуку більш дешевих, нетоксичних, біорозкладних та екологічно чистих інгібіторів корозії, зокрема на основі рослинних екстрактів. Дослідниками вивчено величезну кількість різноманітних рослин, які можуть слугувати основою для створення таких екологічно безпечних інгібіторів корозії. Зокрема, є публікації, де описано інгібувальний вплив дикорослих та культурних рослин: лаванди зубчастої, мирту звичайного, календули, оливи, гінкго білоба, кульбаби лікарської, часнику городнього, кавуна, моркви, перцю довгого, гранату, меліси лікарської, лопуха, солодки, глоду, цибулі, льону звичайного, базиліку, гороху посівного, м'яти круглолистої, борщівника, ромашки золотистої, ясеню звичайного, імбиру гіркого, тирличу, клена гостролистого, подорожника овального тощо [1, 2]. Таким чином, пошук та створення нових «зелених» інгібіторів корозії металів залишається актуальним завданням.

Тому метою нашої роботи було дослідження інгібувального ефекту водних вилучень на основі кори дубу, супліддя вільхи, кореневища калгану, пагонів чорниці та їх сумішей у розповсюджених корозійноактивних середовищах: 10%-вому розчині сульфатної кислоти та 3%-вому розчині натрій хлориду. Швидкість процесу корозії сталевих зразків оцінювали гравіметричним методом за стандартними показниками.

За результатами дослідження найкращий антикорозійний ефект у розчині натрій хлориду показала суміш витяжок з кори дубу і пагонів чорниці у співвідношенні 1:1, а в сульфатнокислому середовищі – суміш витяжок з кори дубу та супліддя вільхи [3]. Основним діючим компонентом у вилученнях використаних рослин є дубильні речовини, тобто суміш природних поліфенольних сполук (танінів), які відомі своїми інгібіторними властивостями. Молекули дубильних речовин заповнюють мікротріщини та інші дефекти поверхні, що підвищує корозійну стійкість металів [4].

Отже, отримані результати демонструють, що інгібітори на основі рослинної сировини мають гарний протикорозійний ефект в певних агресивних середовищах, тому подальший пошук, вивчення та дослідження «зелених» інгібіторів є перспективним та необхідним. Їх використання сприятиме зменшенню обсягів відходів сільського господарства та зниженню економічних витрат, а також зменшить негативний вплив на довкілля.

1. Žbulj K., Bilić G., Hrnčević L., Simon K. The Potential of Using Plant Extracts as Green Corrosion Inhibitors in the Petroleum Industry. – *Rudarsko-geološko-naftni zbornik i autori* (The Mining-Geology-Petroleum Engineering Bulletin and the authors). – 2021. – P. 131-139.

2. Zakeri A., Bahmani E., Sabour A., Aghdam R. Plant extracts as sustainable and green corrosion inhibitors for protection of ferrous metals in corrosive media: a mini review. – *Corrosion Communications*. – 2022. – Vol. 5. – P. 25-38.

3. Петруша Ю.Ю., Пушкарьова Є.Р. Дослідження антикорозійних властивостей водних вилучень з рослинної сировини. – *Екологічні науки*. – 2024. – № 4 (55). – С. 207-210.

4. Гулай О., Шемет В., Жилко В., Клімович О. Інгібіторна ефективність і склад екстракту кори дуба. – *Праці НТШ. Хім. науки*. – 2020. – Т. LX. – С. 107–117.

# ХІМІЧНА МОДИФІКАЦІЯ ГУМОВОЇ КРИХТИ З ШИН ДЛЯ ВИКОРИСТАННЯ В АСФАЛЬТОБЕТОННИХ СУМІШАХ

Поліщук Д.В.

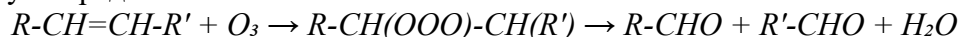
Філія Класичного приватного університету в місті Кременчук, [kpudmytro@gmail.com](mailto:kpudmytro@gmail.com)

Хімічна модифікація гумової крихти з шин для використання в асфальтобетонних сумішах – це процес, спрямований на покращення властивостей гумової крихти для її ефективного використання в дорожньому будівництві. Використання відпрацьованих шин у дорожньому будівництві не тільки вирішує екологічну проблему утилізації відходів, але й покращує якість дорожнього покриття. Однак, немодифікована гума крихта має ряд недоліків, які обмежують її застосування в асфальтобетонних сумішах.

Низька адгезія гумової крихти до бітуму є однією з основних проблем. Це призводить до розшарування асфальтобетонної суміші, що знижує її міцність і довговічність. Гідрофобність гумової крихти також ускладнює її дисперсію в бітумі, що негативно впливає на однорідність суміші та її стійкість до вологи. Крім того, низька термостійкість гумової крихти може призвести до деформації асфальтобетонного покриття при високих температурах, особливо в умовах інтенсивного руху транспорту.

Для подолання цих проблем застосовують різні методи хімічної модифікації гумової крихти. Десульфуризація – це процес видалення сірки з гумової крихти, що покращує її адгезію до бітуму. Сірка, що міститься в гумі, знижує її полярність, що ускладнює взаємодію з полярним бітумом. Видалення сірки підвищує полярність гумової крихти, що сприяє її кращому зчепленню з бітумом. Хімічно, це може бути досягнуто за допомогою реакцій з лужними металами або їх сполуками, наприклад, з гідроксидом натрію (NaOH) у присутності каталізаторів. Десульфуризація часто проводиться при підвищених температурах, зазвичай в діапазоні від 100°C до 200°C, для прискорення реакції [1].

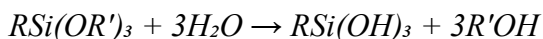
Окислення гумової крихти за допомогою окислювачів, таких як пероксиди (наприклад, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>) або озон (O<sub>3</sub>), також збільшує її полярність і покращує адгезію. Окислення призводить до утворення полярних функціональних груп (наприклад, карбоксильних -COOH) на поверхні гумової крихти, що покращує її взаємодію з бітумом. Наприклад, реакція окислення озоном може бути представлена так:



Окислення озоном може проводитися при кімнатній температурі, але для прискорення реакції може використовуватися підвищена температура [2].

Хлорування гумової крихти хлором (Cl<sub>2</sub>) також збільшує її полярність і покращує адгезію. Хлор реагує з гумою, утворюючи полярні хлоровмісні групи на її поверхні. Реакція хлорування може відбуватися за механізмом електрофільного приєднання або заміщення. Хлорування часто проводиться при помірних температурах, зазвичай в діапазоні від 50°C до 100°C [3].

Обробка силанами – це метод, який полягає в нанесенні силанних сполук (наприклад, алкоксисиланів RSi(OR')<sub>3</sub>) на поверхню гумової крихти. Силани утворюють хімічні зв'язки між гумовою крихтою та бітумом, що значно покращує адгезію. Силани гідролізуються, утворюючи силанольні групи (Si-OH), які реагують з гідроксильними групами на поверхні гумової крихти та з функціональними групами бітуму. Наприклад, реакція гідролізу алкоксисилану:



Гідроліз силанів може відбуватися при кімнатній температурі, але для прискорення реакції може використовуватися підвищена температура, зазвичай в діапазоні від 50°C до 80°C [4].

Обробка епоксидними смолами також покращує адгезію та термостійкість гумової крихти. Епоксидні смоли утворюють міцну плівку на поверхні гумової крихти, яка захищає її від впливу високих температур і покращує її зчеплення з бітумом. Епоксидні смоли, як правило, мають структуру, що включає епоксидні групи (циклічні ефіри), які реагують з

амінами або іншими затверджувачами, утворюючи міцні полімерні сітки. Наприклад, реакція полімеризації епоксидної смоли з аміном:



Реакція полімеризації епоксидних смол часто проводиться при підвищених температурах, зазвичай в діапазоні від 80°C до 150°C, для прискорення затвердіння [5].

Обробка пластифікаторами – це метод, який полягає в додаванні пластифікаторів до гумової крихти. Пластифікатори покращують еластичність гумової крихти та її дисперсію в бітумі. Це дозволяє отримати більш однорідну асфальтобетонну суміш з покращеними властивостями. Пластифікатори, як правило, є органічними сполуками з низькою молекулярною масою, які знижують міжмолекулярні сили в полімері. Процес обробки пластифікаторами зазвичай проводиться при температурах, що забезпечують достатню плинність пластифікатора, зазвичай в діапазоні від 50°C до 100°C [6].

Використання хімічно модифікованої гумової крихти в асфальтобетонних сумішах має ряд переваг. По-перше, покращується адгезія гумової крихти до бітуму, що збільшує міцність і довговічність асфальтобетонного покриття. Також збільшується стійкість асфальтобетону до деформації та розтріскування, що особливо важливо в умовах інтенсивного руху транспорту. Крім того, підвищується стійкість асфальтобетону до впливу вологи та температурних змін, що дозволяє використовувати його в різних кліматичних умовах. В рівній мірі збільшується термін служби асфальтобетонного покриття, що знижує витрати на його ремонт і обслуговування. Так само, зменшується утворення колії на дорогах, що підвищує безпеку руху. До того ж, знижується рівень шуму від руху транспорту, що покращує комфортність життя в прилеглих районах. Нарешті, використання модифікованої гумової крихти сприяє утилізації відпрацьованих шин, що покращує екологічну ситуацію.

Модифікована гумова крихта може бути додана до асфальтобетонних сумішей у кількості від 5% до 20% від маси бітуму. Додавання гумової крихти дозволяє покращити властивості асфальтобетону, такі як еластичність, міцність і стійкість до деформації. Асфальтобетонні суміші з модифікованою гумовою крихтою можуть використовуватися для будівництва та ремонту доріг з різним рівнем навантаження, включаючи автомагістралі, міські дороги та аеродроми.

Хімічна модифікація гумової крихти з шин є перспективним напрямком утилізації відпрацьованих шин та покращення якості асфальтобетонних покриттів. Подальші дослідження в цій галузі дозволять розробити нові ефективні методи модифікації гумової крихти та розширити її застосування в дорожньому будівництві.

1. "Devulcanization of Waste Rubber" - S. Abdou, A. El-Nemr, M. El-Sabbah, *Journal of Applied Polymer Science*, Vol. 102, Issue 5, 2006.
2. "Surface Modification of Waste Tire Rubber Powder by Ozone Treatment" - S. Wang, X. Zhang, Y. Wang, *Journal of Hazardous Materials*, Vol. 169, Issues 1-3, 2009.
3. "Chlorination of Waste Tire Rubber Powder" - A. Ismail, *Polymer-Plastics Technology and Engineering*, Vol. 43, Issue 5, 2004.
4. "Silane Modification of Rubber Particles for Use in Thermoplastic Elastomers" - E. Borsig, *Progress in Polymer Science*, Vol. 24, Issue 1, 1999.
5. "Epoxy-Modified Waste Tire Rubber as Reinforcement in Asphalt Mixtures" - R. Siddique, J. Khatib, I. Kaur, *Construction and Building Materials*, Vol. 22, Issue 11, 2008.
6. "Plasticizers in Polymers" - D. F. Cadogan, Van Nostrand Reinhold, 1971.

# АДСОРБЦІЙНЕ ВИДАЛЕННЯ ОКСІАНІОНІВ Cr(VI) ІЗ МОДЕЛЬНИХ ВОДНИХ РОЗЧИНІВ КОМПОЗИТАМИ ТЕРМІЧНО АКТИВОВАНИЙ ГЛАУКОНІТ/ПОЛІАНІЛІН

Сидорко М.С., Стеців Ю.А., Яцишин М.М., Зелінський А.В., Решетняк О.В.

Львівський національний університет імені Івана Франка, [sydorkomaria98@gmail.com](mailto:sydorkomaria98@gmail.com)

Забруднення вод важкими металами, зокрема сполуками хрому, є серйозною екологічною проблемою, яка посилюється зменшенням водних ресурсів прісної води. Сполуки Cr(VI) є високотоксичними та мобільними у водному середовищі, що потребує ефективних методів їхнього видалення. Одним з перспективних методів видалення є адсорбція за допомогою якої досягають як зменшення концентрації Cr(VI) до безпечного рівня, так і повного очищення вод. Одними з важливих адсорбентів можуть бути композити на основі природних глинистих мінералів (ПГМ) та аміновмісних природних та синтетичних полімерів [1].

Природні глинисті мінерали є шаруватими силікатами, побудованими з нанорозмірних платівок, зазвичай зв'язаних між собою протиіонами (катіони I та II групи). Їхніми основними будівельними блоками є тетраедричні листки (Т), в яких атом Si, оточений чотирма атомами кисню  $[\text{SiO}_4]^{4-}$ , та октаедричні листки (О), утворені атомами Al, оточеними чотирма атомами кисню  $[\text{AlO}_4]^{5-}$ . До числа ПГМ відносять і глауконіт (Гл), який, побудований з двох тетраедрів  $[\text{SiO}_4]^{4-}$ , сплавлених зі спільним октаедричним листом  $[\text{AlO}_4]^{5-}$ . Умовне позначення (Т–О–Т) [2]. Структурна формула глауконіту:  $\text{K}_{(x=y)}(\text{Si}_{4-x}\text{Al}_x)_{-4}(\text{Fe}^{3+}, \text{Al}, \text{Mg}, \text{Fe}^{2+})_{-2}\text{O}_{10}(\text{OH})_2$ . До складу Гл входить ферум у виді  $\text{Fe}^{2+}$  і  $\text{Fe}^{3+}$ . Наявність феруму у складі Гл є цікавим фактором, який може впливати на властивості композитів Гл з різними синтетичними полімерами, як наприклад поліанілін (ПАН).

Поліанілін один із найбільш досліджених представників класу електропровідних полімерів, а його композити з різними речовинами демонструють високу адсорбційну здатність стосовно важких металів і Cr(VI) зокрема. Адсорбційні властивості ПАН зумовлені унікальними його властивостями – наявністю багатьох форм-станів і можливості швидкого окисно-відновного перемикавання між ними і наявністю реакційно здатних аміно- ( $-\text{NH}-$ ) та іміно- ( $-\text{N}=\text{}$ ) груп [3].

Синтез та підготовку зразків Гл/ПАН до досліджень детально описано в праці [4]. Отримані зразки Гл/ПАН, були допованими  $\text{H}_2\text{SO}_4$  в процесі синтезу. Адсорбційні дослідження проводили з розчинів Cr(VI) з початковими концентраціями, мг/л: 100; 200; 300; 400 і 500 за методикою [4]. Маса адсорбента становила 0,1 г, а об'єм розчину 10 мл.

На рис. 1 зображено, як приклад, кінетичні криві видалення Cr(VI) із водних розчинів, зразками Гл/ПАН, прожареними за температур 300 і 600 °С. Масове співвідношення Гл:ПАН в зразках адсорбентів становило ~1:1 і ~2:1.

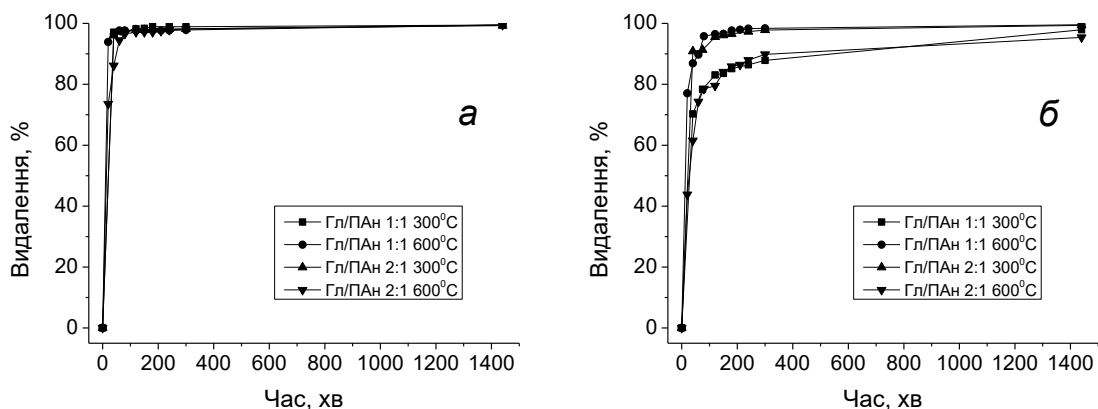


**Рис. 1.** Кінетика видалення оксіаніонів Cr(VI) із водних розчинів зразками Гл/ПАН., прожареними за температур 300 і 600 °С Концентрація Cr(VI), мг/л: а – 100; б – 200. Співвідношення Гл:ПАН вказано у вставках на полі рисунків.

На рис. 2 зображено кінетичні криві видалення Cr(VI) із водних розчинів з концентраціями 100÷500 мг/л зразками Гл/ПАН, прожареними за температур 300 і 600 °С.

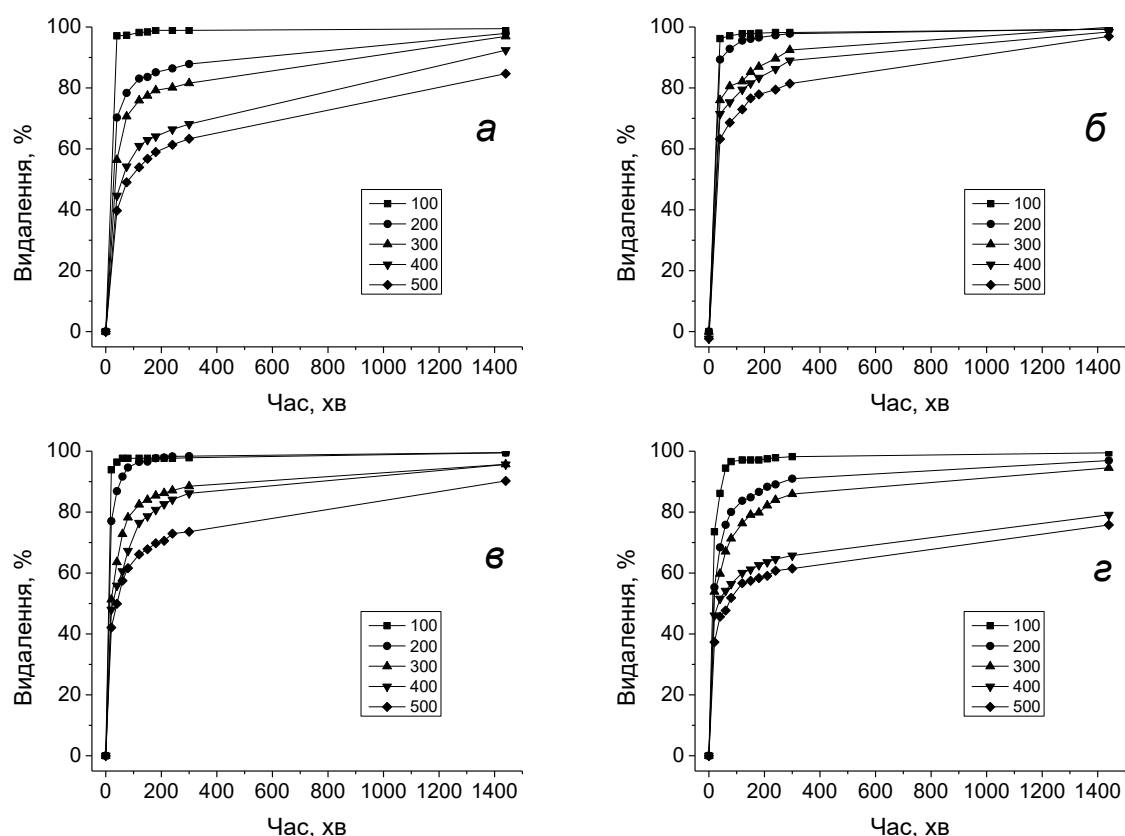


**Рис. 2.** Кінетика видалення Cr(VI) із водних розчинів, прожареними за температур 300 і 600 °С, зразками Гл/ПАН. Співвідношення Гл:ПАН: а, в – 1:1; б, г – 2:1. Концентрація Cr(VI) в мг/л, вказана у вставках на полі рисунків.

Як бачимо з рис. 1, час видалення 100 % Cr(VI) за концентрації поллютанта 100 мг/л становить ~20-30 хв. Зі збільшенням концентрації Cr(VI) в розчинах час видалення збільшується (рис. 2). Видалення Cr(VI) є багатостадійним процесом, який залежить від концентрації поллютанта в розчині.

Ефективність видалення Cr(VI) є вищою за менших концентрацій розчинів Cr(VI). За концентрацій розчинів 400–500 мг/л простежується зменшення відсотків видалення на першій і заключній стадіях процесу зразками Гл/ПАН за різного співвідношення Гл:ПАН.

1. Kiliaris P. Papaspyrides C.D. Polymer/layered silicate (clay) nanocomposites: An overview of flame retardancy. *Progress in Polymer Science*. - 2010. - V. 35(7). - P. 902-958.

2. Nieto F., Abad I., Bauluz B., Reolid M. Textural and genetic relationships between glauconite and celadonite at the nanoscale: two different structural-compositional fields. *Minerals*. - 2021. - V. 33. - P. 503-517.

3. Samadi A., Xie M., Li J., Shon H., Zheng C., Zhao S. Polyaniline-based adsorbents for aqueous pollutants removal: A review. *Chemical Engineering Journal*. - 2021. - V. 418. - P. 129425.

4. Sydorko M.S., Yatsyshyn M.M., Marchuk I.E., Zelinskiy A.V., Reshetnyak O.V. Zeolite/polyaniline composite: synthesis and adsorptive properties regarding Cr(VI) from aqueous solutions. *Polymer Journal*. - 2023. - V. 45, No. 1. - P. 69-78.

*This work was partly supported by the Simons Foundation (Award Number: 00014574)*



## МІКРОГРІН І ПРОРОСТКИ- ЗЕЛЕНІ СУПЕРФУДИ ДЛЯ ЗБАГАЧЕННЯ РАЦІОНУ ЛЮДИНИ КОРИСНИМИ МІКРОЕЛЕМЕНТАМИ

*Смітюк Н.М., Васильєв А.М.*

Комунальний заклад освіти “Науковий медичний ліцей” Дніпро”, [artvasilev2009@gmail.com](mailto:artvasilev2009@gmail.com)

На сьогодні нестача мікро- та макроелементів в організмі людини може бути спричинена поєднанням незбалансованого харчування, шкідливих звичок (як-от куріння, алкоголь або надмірне споживання кофеїну), а також стресу чи хронічної втоми. Неправильний раціон не забезпечує організм достатньою кількістю потрібних речовин, шкідливі звички заважають їх засвоєнню, а стрес виснажує наявні запаси, що разом створює серйозний дефіцит.

Для підтримання організму людини в здоровому стані та для покращення самопочуття лікарями рекомендовано споживати досить багато макро- та мікронутрієнтів. Вміст важливих та корисних елементів в продуктах харчування значно зменшився останнім часом, а потреба в поживних елементах для людини зростає. Тому на допомогу в збереженні балансу в організмі людей таких важливих елементів як Ca, Na, K, Fe, Mn, Cu та інші може прийти споживання проростків і мікрозелені (мікрогрину), які можна вважати своєрідним концентратом вітамінів та мікроелементів. При цьому, чим менший розмір зелені, тим більше в ній корисних речовин. Найбільше їх міститься в рослині саме на старті росту — в перші 7-14 днів. Крім того, цінність цього продукту полягає й в тому, що за короткий проміжок росту паростки не встигають всмоктати шкідливі речовини з навколишнього середовища. Вони є екологічно чистими, а отже, позитивна дія на організм максимальна. Основна властивість мікрозелені - антиоксидантна. Речовини, що містяться в таких рослинах, виводять із організму вільні радикали, які пошкоджують оболонку клітин, ДНК та складових хряща. Крім того, маючи високий вміст поліфенолів, вони запобігають розвитку серцево-судинних захворювань. Проте, кожен вид мікрозелені має свої особливості і корисні властивості. Проведено атомно-абсорбційне визначення елементів в зразках мікрозелені, проростках та посівному матеріалі. Повну мінералізацію досліджуваних зразків проводили в концентрованій нітратній кислоті. В результаті проведення експерименту отримані данні вмісту важких металів (Ni, Cu, Pb, Cd, Zn) та біогенних елементів (Na, K, Ca) Для визначення зазначених елементів в досліджуваних розчинах використовували атомно-абсорбційний спектрофотометр С-115 ПКС з полум'яним варіантом атомізації в суміші ацетилен-повітря.

Доведено можливість вирощування мікрокрину редису в домашніх умовах для споживання та отримання багатьох корисних нутрієнтів і покращення стану здоров'я. Підібрано умови для отримання максимально корисного продукту: хімічні речовини для знезараження зразків посівного матеріалу від бактеріальної інфекції, можливість використання добрив для покращення росту рослин. Показано, що при використанні добрив впливає не лише на процес росту рослини, а й на кількісний вміст багатьох елементів порівняно з вирощуванням на воді та перекису водню

Порівняно вміст деяких макро-та мікроелементів в зразках проростках машу, гороху і пшениці (табл. 1). Показано, вміст майже всіх елементів в проростках машу вищий ніж в інших зразках. Це вказує на доцільність споживання проростків машу та внесення їх до щоденного раціону для покращення роботи серцево-судинної системи через високий вміст калію та натрію.

Таблиця

Результати атомно-абсорбційного визначення елементів в зразках мікрогрін у та проростках

| ОБ.    |    | С, мг/кг         |                  |                |                   |                |                  | Добова норма в організмі                 | Засвоєння мікро/макроелементів організмом людини |
|--------|----|------------------|------------------|----------------|-------------------|----------------|------------------|------------------------------------------|--------------------------------------------------|
|        |    | Мікрогрін редису | Мікрогрін гороху | Мікрогрін машу | Проростки пшениці | Проростки машу | Проростки гороху |                                          |                                                  |
| Метали | Cu | 35,9             | 46,0             | 34,3           | 12,4              | 19,8           | 18,6             | 2-3 мг                                   | 30-50%                                           |
|        | Mn | 14,3             | 18,8             | 19,9           | 27,7              | 12,1           | 8,4              | 5-10 мг                                  | 3-5%                                             |
|        | Fe | 77,6             | 20,4             | 142,2          | 120,2             | 169,1          | 98,6             | 2,3 г                                    | гемове 15-35%<br>негемове 2-20%                  |
|        | Zn | 39,1             | 1,7              | 17,0           | 5,5               | 13,3           | 11,2             | 10-15 мг                                 | 20-40%                                           |
|        | Sr | 51,6             | 7,5              | 22,0           | 53,0              | 20,8           | 55,8             | 3,3 мг                                   | 5-20%                                            |
|        | Ni | 9,3              | 6,4              | 11,5           | 10,7              | 3,9            | 15,4             | 0,1-0,6 мг.                              | -                                                |
|        | Pb | < 0,01           | < 0,01           | < 0,01         | < 0,01            | < 0,01         | < 0,01           | >10 мкг/дл                               | -                                                |
|        | Cr | 18,6             | 1,2              | 17,7           | 22,6              | 18,0           | 22,1             | у чоловіків 30-35мкг<br>у жінок 20-25мкг | 1-10%                                            |
|        | Na | 1926,3           | 1026,9           | 241,7          | 102,8             | 258,9          | 201,0            | 1 г,                                     | 90-95%                                           |
|        | K  | 3086,6           | 2063,9           | 2849,5         | 2230,1            | 2993,6         | 2911,4           | 2-3 г                                    | 85-90%                                           |
|        | Ca | 2302,8           | 2994,3           | 2876,6         | 1277,1            | 3782,3         | 2043,6           | 1,5-2 г                                  | 30-40%                                           |

Порівнюючи мікрогрін гороху та проростки машу, показано, що вміст майже всіх елементів в мікрогріні редису вищий ніж в інших зразках. Це вказує на доцільність споживання мікрогріну редису для збагачення раціону людини корисними мікроелементами.

Мікрогрін та проростки машу, гороху, пшениці та редиси є чудовими продуктами для збагачення раціону людини корисними мікро- і макроелементами. Також ці продукти є альтернативою соєвих бобів. Це дозволяє урізноманітнити раціон вегетаріанців. Мікрогрін і проростки містять мало калорій, що робить їх відмінним додатком до страв без значного підвищення калорійності раціону. В процесі зниження ваги, включаючи мікрогрін і проростки в свій раціон, важливо дотримуватися збалансованого харчування та здорового способу життя, щоб досягти максимального ефекту для зниження ваги.

## ЕКОЛОГІЧНИЙ СТАН ВОДНИХ РЕСУРСІВ ПРИФРОНТОВИХ МІСТ ДОНЕЧЧИНИ НА ПРИКЛАДІ ШАХТАРСЬКОГО МІСТА МИРНОГРАДА

*Смітюк Н.М., Супрун Е.Ю.*

Комунальний заклад освіти «Науковий медичний ліцей «Дніпро», [elisuprun@gmail.com](mailto:elisuprun@gmail.com)

На сьогодні ситуація по забезпеченню населення Донецької області якісною водою, особливо питною, стає критичною. На забруднення водних ресурсів цього регіону впливають викиди працюючих підприємств, сільськогосподарська діяльність, стічні води та тверді відходи. За час російської агресії вплив збільшився через руйнування дамб та очисних станцій, мінування водойм на територіях, де ведуться активні бойові дії. Забруднена вода істотно впливає на здоров'я людини. Вона може викликати розлади шлунково-кишкового тракту, порушення роботи ендокринної системи, гепатит А, захворювання нирок, тощо. Саме тому було вирішено дослідити стан води у прифронтовій зоні на прикладі невеликого шахтарського міста Мирнограда.

**Вода** є фактором передачі багатьох інфекцій бактеріального та вірусного походження. Однак, небезпеку для здоров'я становлять ще й різноманітні хімічні сполуки, що можуть бути у питній воді. Дотримання санітарно-хімічних норм є критично важливим для запобігання негативним впливам на здоров'я населення. Високий вміст шкідливих речовин у воді може призводити до гострих отруєнь, хронічних захворювань та інших патологічних станів. Регулярний моніторинг якості питної води та впровадження сучасних методів очищення води є необхідними заходами для забезпечення її безпечності та якості.

Метою дослідження роботи було оцінити можливість використання населенням

прифронтових міст Донецької області на прикладі Мирнограда різних джерел води для питних та господарських потреб, а саме свердловин глибиною 40 м, 50 м, 75 м, колодязів глибиною 12 м, 26 м, технічної води, що подається у централізовано, воду з шахти глибиною 830 м, що є джерелом для технічної води міста.

У ході дослідження для визначення якісного та кількісного складу джерел питної води були використані такі методи: атомно-абсорбційний аналіз, фотометрія полум'я, комплексонометричне, меркуриметричне та кислотно-основне титрування, потенціометрія. Для оцінки якості обраних зразків проведено кількісне визначення наступних показників: лужність та жорсткість води, водневий показник, вміст біогенних речовин та важких металів, вміст хлоридів та сульфатів. За результатами дослідження встановлено, що безпечною у використанні населенням міста Мирнограда в якості питної і води для господарських потреб виявились проби води зі Св 40 (відповідають усім нормам), Св 50 (дещо перевищують норми за вмістом марганцю і сульфатів) (табл. 1). Порівняння отриманих результатів проведено з Державними санітарними нормами та правилами "Гігієнічні вимоги до води питної, призначеної для споживання людиною". Вода з інших джерел може бути придатною для використання в господарських цілях за умови її додаткової очистки.

**Таблиця**

**Результати дослідження водних джерел Мирнограда**

| <b>Показники</b>  | <b>Джерела, що відповідають нормам питної води</b> | <b>Джерела, що відповідають нормам води для господарських потреб</b> |
|-------------------|----------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------|
| Водневий показник | Св 40, Св 50, Св 75,<br>К 12, К 26, Тех            | Св 40, Св 50, Св 75,<br>К 12, К 26, Тех                              |
| Загальна лужність | Св 40, Св 50                                       | Св 40, Св 50, К 12, К 26, Тех                                        |
| Кальцій           | Св 40, Св 50, К 12, К 26, Тех                      | Св 40, Св 50, К 12, К 26, Тех                                        |
| Магній            | Св 40, Св 50, К 12, К 26, Тех                      | Св 40, Св 50, К 12, К 26, Тех                                        |
| Нікель            | Св 40, Св 50                                       | Св 40, Св 50                                                         |
| Стронцій          | усі                                                | усі                                                                  |
| Купрум            | усі                                                | усі                                                                  |
| Цинк              | усі                                                | усі                                                                  |
| Марганець         | Св 40, К 12, К 26, Тех, Шах                        | усі                                                                  |
| Залізо            | Св 40, Св 50, Св 75, К 12, К 26,<br>Тех            | Св 40, Св 50, Св 75, К 12, К 26,<br>Тех                              |
| Хром              | усі                                                | усі                                                                  |
| Свинець           | усі                                                | усі                                                                  |
| Кадмій            | усі                                                | усі                                                                  |
| Хлориди           | Св 40, Св 50                                       | Св 40, Св 50                                                         |
| Сульфати          | Св 40, К 26                                        | Св 40, К 26                                                          |

Місто Мирноград знаходиться в скрутному становищі щодо якості питної води, яку подають населенню централізовано. Тому для забезпечення потреб мешканців щодо збереження якості життя та певного рівня здоров'я рекомендовано споживати більш екологічну воду з свердловин або самостійно проводити доочищення водопровідної.

## РОЛЬ МІНЕРАЛЬНИХ РЕЧОВИН В ОРГАНІЗМІ ЛЮДИНИ

*Тимошук О.О., Авдеева О.Ю., Авдеев С.В.*

Житомирський державний університет імені Івана Франка, [timoshchuk1244@gmail.com](mailto:timoshchuk1244@gmail.com)

Мінеральні речовини є невід'ємною частиною раціонального харчування, так само, як і білки, ліпіди, вуглеводи, вітаміни тощо. Їх нестача або надлишок може спричинити порушення в організмі, що призводять до розвитку хвороб. Мінеральні речовини забезпечують важливу роль у багатьох життєво важливих процесах. Вони необхідні для нормального функціонування всіх систем організму, забезпечують баланс води та кислотно-лужну рівновагу, беруть участь в обміні речовин, в утворенні кісток і зубів.

Ці речовини становлять значну частину маси людського тіла (приблизно 3 кг золи). У кістках вони знаходяться у формі кристалів, а в м'яких тканинах – у формі розчинів, що здебільшого поєднуються з білками.

Мінеральні речовини потрапляють в організм людини зазвичай із їжею та водою, їх концентрація в організмі не є сталою і змінюється залежно від пори року, способу харчування та й, у цілому, від способу життя. Для деяких хімічних елементів вміст у тканинах можна виміряти в грамах, тоді як концентрація інших елементів становить 1:100000 або навіть менше. Елементи, вміст яких в організмі людини вимірюється грамами називають макроелементами, а елементи, що присутні в дуже малих кількостях – мікроелементами.

**Таблиця**

Мінеральний склад тіла дорослої людини вагою 70 кг

| Елемент | г    | %    | Елемент | г    | %       |
|---------|------|------|---------|------|---------|
| Кальцій | 1510 | 2,2  | Натрій  | 105  | 0,15    |
| Фосфор  | 840  | 1,2  | Магній  | 70   | 0,1     |
| Калій   | 245  | 0,35 | Ферум   | 3,5  | 0,005   |
| Сульфур | 105  | 0,15 | Цинк    | 1,75 | 0,0025  |
| Хлор    | 105  | 0,15 | Купрум  | 0,07 | 0,00011 |

Варто зазначити, що з віком вміст мінеральних речовин у тканинах людини зазнає суттєвих змін. Під час активного росту та розвитку організму, відзначається значне збільшення кількості мікроелементів, проте цей процес поступово сповільнюється або зупиняється до віку 20 років. У таблиці 1 представлено основні макро- та мікроелементи, що становлять мінеральний склад тіла дорослої людини.

Що ж до дії на організм усіх елементів, то важливим є те, що у мікрокількостях мінеральні речовини стимулюють біохімічні процеси, але в більших дозах можуть мати токсичний ефект на організм людини. Тому вміст деяких неорганічних сполук у харчових продуктах регулюється медико-біологічними вимогами та санітарними нормами якості. Вміст традиційних мінеральних речовин у харчових продуктах становить 0,5–0,7% їстівної частини. Під час складних процесів перетворення в організмі людини продукти, багаті на кальцій (Ca), магній (Mg), натрій (Na) або калій (K), можуть утворювати лужні сполуки, що позитивно впливають на стійкість організму до захворювань. До джерел лужних елементів належать плоди, овочі, бобові, молоко та молочні продукти. Інші продукти, такі як м'ясо, риба, яйця, хліб, крупи та макарони, під час метаболізму утворюють кислі сполуки.

Отже мінеральні речовини є важливою складовою раціонального харчування, які виконують ключові функції в організмі, зокрема в процесах життєдіяльності та формуванні кісткової та м'язової тканин. Зміни в їх вмісті в організмі, що відбуваються з віком, впливають на здоров'я людини. Хоча мінерали необхідні в малих кількостях для нормального функціонування, їх надлишок або дефіцит може призвести до порушень функцій організму та захворювань.

## МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ СУКРАЛОЗИ ТА СУКРОНООВОЇ КИСЛОТИ КАТОДНИМ ШЛЯХОМ

*Ткач В.В.<sup>1,2</sup>, Кушнір М.В.<sup>1</sup>, де Машикареньяш Гайвау І.О.<sup>3</sup>, де Барруш А.І.<sup>3</sup>, Іванушко Я.Г.<sup>4</sup>,  
Морозова Т.В.<sup>5</sup>, да Пайва Мартініс Ж.І.<sup>2</sup>, Ягодинець П.І.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, Україна

<sup>2</sup>Факультет Інженерії університету Порту, Португалія

<sup>3</sup>Університет Траз-уж-Монтіш і Алту-Доуру, Португалія

<sup>4</sup>Буковинський державний медичний університет, Україна

<sup>5</sup>Національний транспортний університет, Україна

Сукралоза (трихлоргалактосахароза, Рис. 1 зліва) – синтетична хлороорганічна сполука на основі вуглеводів, що застосовується як цукрозамінник та коректор смаку, якому відповідає код Е955. Вважається, що вона втричі солодша за аспартам, вдвічі за сахарин і в 1000 разів за звичайний цукор. На відміну від інших синтетичних цукрозамінників, більшість яких відносяться до інших класів органічних сполук, сукралоза є вуглеводним похідним, кількість внутрішньомолекулярних водневих зв'язків менша, ніж у стандартному дисахариді, і саме тому вона має підкреслено солодкий смак, однак з огляду на екотоксичність та потенційну генотоксичність сукралози та речовин, з яких вона одержується, розробка методу її визначення – дійсно актуальне завдання.

З іншого боку, сукрононова кислота – підсолоджувач іншої природи. Будучи гуанідиновим похідним, сукрононова кислота в двісті разів солодша від сукралози і входить (поряд із бернардамом, карелаом, сукрооктатом та лугдунамом) у п'ятірку відомих найсолодших речовин небілкової природи. На відміну від сукралози сукрононова кислота дозволена до використання в харчовій продукції тільки в обмеженій кількості країн і обмеженій кількості харчових продуктів, з огляду на недостатнє знання щодо токсичності цієї сполуки. Мало того, психотропний препарат ВІМУ-8 – структурний ізомер сукрононової кислоти – також солодкий на смак. Таким чином, розробка методу визначення обох речовин – дійсно актуальне завдання

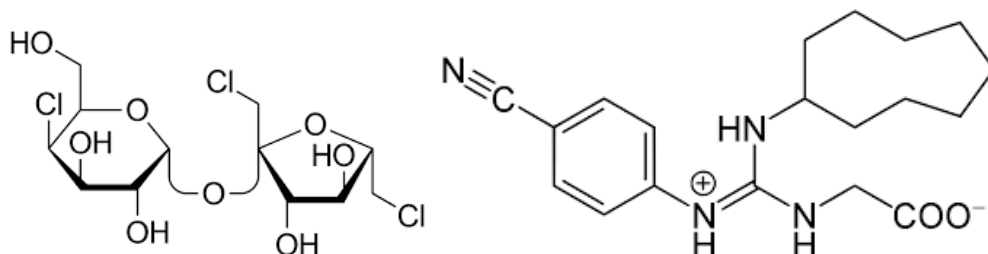


**Рис. 1.** Сукралоза і сукрононова кислота.

У даній роботі розглядається можливість катодного визначення сукралози та сукрононової кислоти у слабкокислому та нейтральному середовищі на електроді, модифікованому Ванадій (III) оксигідроксидом. Аналіз відповідної триваріантної системи балансових рівнянь підтверджує, що  $\text{CoO}(\text{OH})$  може бути ефективним модифікатором електроду для електрохімічного визначення обох цукрозамінників, причому для сукралози процес супроводжуватиметься катодним дехлоруванням.

Що ж до осциляторної поведінки, то вона більш імовірна в даній системі, ніж для визначення тільки сукралози за даних умов, але менш імовірна, ніж за легкоїонізованих модифікаторів катоду. Таким чином, катодний процес дозволяє точне визначення обох речовин.

**МАТЕМАТИЧНИЙ ОПИС ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ  
АНТИГЕЛЬМІНТНОГО ПРЕПАРАТУ ТІАБЕНДАЗОЛ НА АНОДІ,  
МОДИФІКОВАНОМУ НАНОЧАСТИНКАМИ КУПРУМ (II) СУЛЬФІДУ**

*Ткач В.В.<sup>1,9</sup>, Кушнір М.В.<sup>1</sup>, Морозова Т.В.<sup>2</sup> Монтейру М.Ж.<sup>4</sup> О'Ніл І.<sup>3</sup>, де Маїшкареньяш Гайвау І.О.<sup>3</sup>, Іванушко Я.Г.<sup>4</sup> да Сілва А.О.<sup>5</sup> Ягодинець П.І.<sup>1</sup> Кормош Ж.О.<sup>6</sup>, Луганська О.В.<sup>7</sup>, Гарсія Ж.Р.<sup>8</sup>, да Пайва Мартіни Ж.І.<sup>9</sup>*

<sup>1</sup>Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, Україна

<sup>2</sup>Національний транспортний університет, Україна

<sup>3</sup>Університет Траз-уж-Монтіш і Алту-Доуру, Португалія

<sup>4</sup>Буковинський державний медичний університет, Україна

<sup>5</sup>Федеральний університет Заходу штату Пара, Бразилія

<sup>6</sup>Волинський національний університет ім. Лесі Українки, Україна

<sup>7</sup>Запорізький національний університет, Україна

<sup>8</sup>Штатний університет м. Понта-Гросса, Бразилія

<sup>9</sup>Факультет інженерії університету Порту, Португалія

Тіабендазол (Рис. 1) – один із небагатьох антигельмінтних препаратів, зареєстрованих як консервант та харчова добавка. Вона зареєстрована під номером E233 і застосовується для захисту овочів та фруктів від грибків, черв'їв та личинок комах.

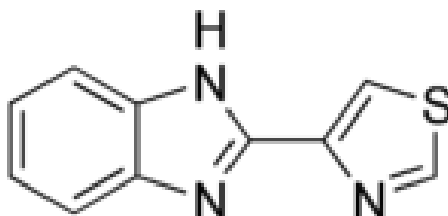


**Рис. 1.** Тіабендазол

Окрім використання як антигельмінтний та протигрибковий засіб тіабендазол застосовується як антидот при отруєнні сполуками важких металів – Меркурію, Плюмбуму, Кадмію та інших – за рахунок комплексоутворення. Таким чином його визначення може бути важливим не тільки для безпеки харчування, а й для фармацевтичної та токсикологічної безпеки.

В даній роботі описується електрохімічне визначення тіабендазолу у бананах на аноді, модифікованому Купрум (II) сульфідом у лужному середовищі. Відтак піридинові атоми Нітрогену не йонізуються, а Купрум (II) утворює *in situ* похідне Купруму (III), яке окиснює тіабендазол за розгалуженим механізмом, що також включає електрополімеризацію.

Аналіз системи диференціальних рівнянь, що описує поведінку даної системи, підтверджує ефективність анодного окиснення для визначення тіабендазолу, незважаючи на високе значення прикладеного потенціалу. В залежності від концентрації лікарського засобу система переходить у дифузійний або кінетичний режим. В будь-якому випадку стаціонарний стан встановлюється легко, що дозволяє ефективно інтерпретувати аналітичний сигнал. Полімер тіабендазолу також може застосовуватися в електроаналітиці та циркулярній економіці, для утилізації та рекуперації зливів йонів важких металів зі стічних вод.



# ТЕОРЕТИЧНИЙ ОПИС ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ТА ЕЛЕКТРОПОЛІМЕРИЗАЦІЇ БУФОТЕНІНУ НА ЕЛЕКТРОДІ, МОДИФІКОВАНОМУ КОБАЛЬТ (III) ОКСИГІДРОКСИДОМ

Ткач В.В.<sup>1,9</sup>, Кушнір М.В.<sup>1</sup>, Морозова Т.В.<sup>2</sup> Монтейру М.Ж.<sup>4</sup> О'Ніл І.<sup>3</sup>, де Машикареньяш Гайвау І.О.<sup>3</sup>, Іванушко Я.Г.<sup>4</sup> да Сілва А.О.<sup>5</sup> Ягодинець П.І.<sup>1</sup> Кормош Ж.О.<sup>6</sup>, Луганська О.В.<sup>7</sup>, Гарсія Ж.Р.<sup>8</sup>, да Пайва Мартіни Ж.І.<sup>9</sup>

<sup>1</sup>Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, [nightwatcher2401@gmail.com](mailto:nightwatcher2401@gmail.com)

<sup>2</sup>Національний транспортний університет, Україна

<sup>3</sup>Університет Траз-уж-Монтіш і Алту-Доуру, Португалія

<sup>4</sup>Буковинський державний медичний університет, Україна

<sup>5</sup>Федеральний університет Заходу штату Пара, Бразилія

<sup>6</sup>Волинський національний університет ім. Лесі Українки, Україна

<sup>7</sup>Запорізький національний університет, Україна

<sup>8</sup>Штатний університет м. Понта-Гросса, Бразилія

<sup>9</sup>Факультет інженерії університету Порту, Португалія

Дереволаз є найвідомішою групою отруйних видів жаб. Що ж до ропух, то серед них також є отруйні види – такі як жерлянка. Її підшкірні залози виділяють білкову отруту, підсилену деякими речовинами збуджуючої дії, наприклад буфотеніном (Рис. 1), назва якого походить від видової назви ропухи (*bufo bufo*):

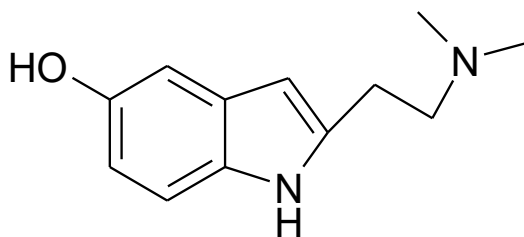


Рис. 1. Буфотенін

Окрім отрути ропух буфотенін міститься також і у деяких видів грибів – таких, як мухомор поганковидний, мухомор сірий, де також підсилює дію основних компонентів отрути – іботенової кислоти та її похідних (включно з мускарином – її декарбоксилатом).

В даній роботі описується електрохімічне визначення тіабендазолу у бананах на аноді, модифікованому Кобальт (III) оксигідроксидом. У даній роботі розібрані дві моделі – по одній для кожної з ролей Кобальт (III) оксигідроксиду – окисника та відновника. В залежності від концентрації лікарського засобу та ролі, з якою в системі бере участь Кобальт (III) оксигідроксид, система переходить у дифузійний або кінетичний режим. В будь-якому випадку стаціонарний стан встановлюється легко, що дозволяє ефективно інтерпретувати аналітичний сигнал. Електрополімеризація буфотеніну відбуватиметься у положення 3 та 6 індольного циклу з утворенням альтернантного полімеру, який може бути ефективно використаним для отримання сонячних батарей та суперконденсаторів, що може бути використаним для реутилізації конфіскаату препаратів наркотичних засобів в якості вторинної сировини.

**ТЕОРЕТИЧНИЙ ОПИС ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ  
АНТИГЕЛЬМІНТНОГО ПРЕПАРАТУ МЕБЕНДАЗОЛ НА ЕЛЕКТРОДІ,  
МОДИФІКОВАНОМУ ПОЛІ(НІНГАЛІНОМ А)**

*Ткач В.В.<sup>1,2</sup>, Кушнір М.В.<sup>1</sup>, де Олівейра С.С.<sup>2</sup>, Листван В.В.<sup>3</sup>, Дитинченко І.М.<sup>3</sup>, да Сілва А.О.<sup>4</sup>, Акинай Ю.<sup>5</sup>, Ягодинець П.І.<sup>1</sup>, Кормош Ж.О.<sup>6</sup>*

<sup>1</sup>Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, [nightwatcher2401@gmail.com](mailto:nightwatcher2401@gmail.com)

<sup>2</sup>Федеральний університет штату Мату-Гроссу-ду-Сул, Бразилія

<sup>3</sup>Житомирський державний університет ім. І. Франка, Україна

<sup>4</sup>Федеральний університет Заходу штату Пара, Бразилія

<sup>5</sup>Університет «Юзюнджю Йил», м. Ван, Туреччина

<sup>6</sup>Східноєвропейський національний університет ім. Лесі Українки, Луцьк, Україна

Ехінокок – паразитичний вид стьожкових червів, що може передатися людині від псів, а також великої та малої рогатої худоби. Ехінокок спричиняє складний патологічний стан, відомий як ехінококоз. Повного лікування ехінококозу не існує. Для симптоматичного лікування та видалення кист застосовують мебендазол (Рис. 1):

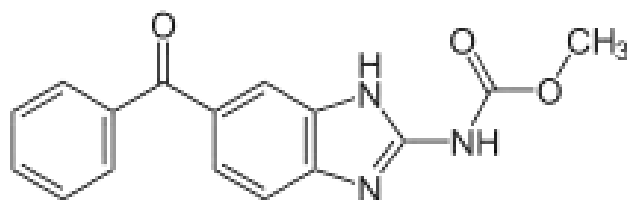


**Рис. 1.** Мебендазол

Мебендазол протипоказаний при підвищеній чутливості до похідних бензімідазолу, хворобі Крона, неспецифічному виразковому коліті, вагітності, печінковій недостатності, дітям до 2 років. Під час лікування мебендазолом рекомендується припинити годування грудьми. Таким чином розробка методів експрес-визначення концентрації мебендазолу – дійсно актуальне завдання.

В даній роботі описується електрохімічне визначення мебендазолу на електроді, модифікованому полі(нінгаліном А) – полімером природного піроло-кумаринового барвника нінгаліну А із черепашок молюсків деяких черевоногих молюсків. Окиснення препарату відбувається за карбамідним та пірольним фрагментами. Для окиснення через циклізацію ароматичних ядер необхідний сильніший окисник.

Аналіз системи диференціальних рівнянь, що описує поведінку даної системи, підтверджує ефективність полі (нінгаліну А) для анодного окиснення мебендазолу. Лінійна залежність концентрації спостерігається у широкому діапазоні концентрацій, а сам процес перебігає у дифузійно-кінетичному режимі з можливістю переходу у дифузійний. Стаціонарний стан системи встановлюється легко, що дозволяє ефективно інтерпретувати аналітичний сигнал.

## ТЕОРЕТИЧНИЙ ОПИС ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ АПОМОРФІНУ

Ткач В.В.<sup>1,9</sup>, Кушнір М.В.<sup>1</sup>, Морозова Т.В.<sup>2</sup> Монтейру М.Ж.<sup>4</sup>, О'Ніл І.<sup>3</sup>, де Машкареньяш Гайвау І.О.<sup>3</sup>, ІванушкоЯ.Г.<sup>4</sup> да Сілва А.О.<sup>5</sup> Ягодинець П.І.<sup>1</sup> Кормош Ж.О.<sup>6</sup>, Луганська О.В.<sup>7</sup>, Гарсія Ж.Р.<sup>8</sup>, да Пайва Мартіни Ж.І.<sup>9</sup>

<sup>1</sup>Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, [nightwatcher2401@gmail.com](mailto:nightwatcher2401@gmail.com)

<sup>2</sup>Національний транспортний університет, Україна

<sup>3</sup>Університет Траз-уж-Монтіш і Алту-Доуру, Португалія

<sup>4</sup>Буковинський державний медичний університет, Україна

<sup>5</sup>Федеральний університет Заходу штату Пара, Бразилія

<sup>6</sup>Волинський національний університет ім. Лесі Українки, Україна

<sup>7</sup>Запорізький національний університет, Україна

<sup>8</sup>Штатний університет м. Понта-Гросса, Бразилія

<sup>9</sup>Факультет інженерії університету Порту, Португалія

Апоморфін (Рис. 1) – напівсинтетичний алкалоїд. Знеболюючий, заспокійливий та психоміметичний препарат, розроблений Інститутом Органічного Синтезу АН ЛатРСР. Його було отримано при дії на морфін хлоридною кислотою. При цьому *ендо*-Оксиген було вилучено зі складу молекули, що посприяло утворенню молекули, схожої за складом на морфін та допамін одночасно:

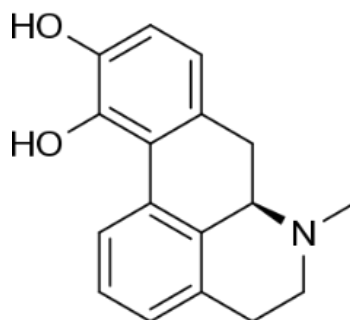


Рис. 1. Апоморфін

Апоморфін використовується в медицині як знеболювальне, блювотне, відхаркуюче, а також як засіб для лікування алкоголізму і вироблення стійкої негативної реакції на алкоголь. Як БОР використовують у підвищених дозах, за яких проявляються побічні ефекти – колапс, галюцинації та енцефалопатія.

В даній роботі описується можливість електрохімічного визначення апоморфіну. Його електрохімічна поведінка проявляється аналогічно до двохатомних фенолів – декарбоксилятів похідних тирозину. Сполука, поведінка якої проявляється по-різному на немодифікованому та модифікованому електроді. Для кожного із таких процесів розроблено та проаналізовано дві математичні моделі і показано, що модифікований електрод є ефективнішим для визначення апоморфіну, ніж немодифікований. Запропоновано три ефективні модифікатори електроду для швидкого, точного та селективного визначення концентрації апоморфіну.

## ДОСЛІДЖЕННЯ ПЕРСПЕКТИВИ ВПРОВАДЖЕННЯ «ЗЕЛЕНИХ ТЕХНОЛОГІЙ»

*Шкварун І.<sup>1</sup>, Власенко Н.Є.<sup>2</sup>, Коваленко І.В.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Навчального-наукового інституту матеріалознавства та зварювання ім. Є.О. Патона,  
[drehlisegor@gmail.com](mailto:drehlisegor@gmail.com)

<sup>2</sup>НТУ України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

Зелена хімія — це науковий підхід, спрямований на розробку безпечних хімічних продуктів та процесів, які мінімізують використання небезпечних речовин [1]. Основні принципи включають використання відновлюваних сировин, зменшення відходів та токсичності, а також енергоефективність [2]. Важливою складовою є використання біоресурсів, таких як рослинні матеріали, дозволяє створювати екологічно чисті продукти, наприклад, біопластики. Біопластики – це види пластмас, які виробляються з відновлюваних біологічних ресурсів, таких як кукурудзяний крохмаль, картопляний крохмаль, цукрова тростина, целюлоза або навіть водорості. Вони є альтернативою традиційним пластикам на основі нафти та можуть бути біорозкладними або компостованими. Окрім того, заміна традиційних органічних розчинників на безпечні альтернативи знижує токсичність і забруднення. Альтернативні традиційним розчинникам є вода – один із найкращих безпечних розчинників для багатьох процесів у хімічній та фармацевтичній промисловості, суперкритичний CO<sub>2</sub> – використання для екологічного екстрагування кави, ароматичних речовин, фарбування тканин тощо. Іонні рідини – низьколітні, нетоксичні рідини, які можуть замінити органічні розчинники в каталізі та екстрагуванні. [3]. Використання каталізаторів підвищує ефективність реакцій і зменшує кількість відходів. Впровадження енергозберігаючих технологій знижує викиди CO<sub>2</sub> та економить ресурси. Це стосується як промислових, так і побутових сфер, оскільки ефективне використання енергії зменшує споживання викопного палива, яке є основним джерелом парникових газів.

Зелена хімія акцентує увагу на розробці процесів, які генерують мінімальну кількість відходів. Цілі зеленої хімії включають підтримку сталого розвитку через екологічно чисті технології. Основні напрямки екологічних технологій: 1.) Відновлена енергетика - сонячна енергетика (сонячні панелі), вітрова енергетика (вітряки), гідроенергетика (гідроелектростанції), геотермальний, біопаливо та біогаз; 2.) Екологічний транспорт – електромобілі, водневі двигуни; 3.) Біотехнології та біорозкладні матеріали – біопластик.

Використання вторинних сировин, а саме переробка та повторне використання сировини зменшує потребу в нових ресурсах. Повторно використовують: пластик, папір, скло, метали. Розробка продуктів з низькою токсичністю покращує безпеку для здоров'я людини та навколишнього середовища. Низькотоксичні продукти — це речовини або матеріали, які мають мінімальну шкоду для здоров'я людини та навколишнього середовища. Вони часто використовуються в побуті, медицині, харчовій промисловості та інших галузях. Ось кілька прикладів низькотоксичних продуктів: мийні засоби на основі рослинних компонентів, неотруйні засоби для чищення поверхонь (на основі оцту, соди, лимонної кислоти). Впровадження нових технологій у виробництво підвищує ефективність і безпечність процесів.

Інтеграція сонячної енергії в хімічні процеси може значно знизити вуглецевий слід. Використання відновлювальних джерел енергії в промисловості є важливим аспектом зеленої хімії. Оптимізація водоспоживання в хімічних процесах є важливим кроком до сталого виробництва. Природні каталізатори можуть замінити синтетичні у багатьох процесах, знижуючи екологічний вплив. Зелена хімія активно працює над зменшенням викидів парникових газів у промисловості. Нанотехнології можуть бути застосовані для підвищення ефективності каталізаторів і зменшення відходів. Дослідження альтернативних джерел сировини допомагає знизити залежність від традиційних ресурсів.

Участь у глобальних ініціативах щодо сталого розвитку підвищує значущість зеленої хімії на міжнародному рівні.

Таким чином, використання альтернативних зелених технологій є перспективними та доцільними як з екологічної так і з економічної точки зору. Порівнянням властивостей екологічно чистих видів біопалива встановлено, що їх використання як альтернативу існуючим є перспективними.

1. Власенко Н.Є. Перспективи використання альтернативних джерел енергії// *Вісник Хмельницького національного університету. Серія «Технічні науки»*. – Хмельницький, 2024. № 3 (2), 183-186.

2. Марченко М. В., Потаскалов В. А., Власенко Н. Є., Коваленко І. В. Дослідження перспектив очищення стічних вод від іонів металів./ VIII Міжнародна науково – практична конференція : «Хімічна технологія: наука, економіка та виробництво», м. Шостка, 27-29 листопада 2024, с.84-87

3. Махненко І. О., Потаскалов В. А., Власенко Н. Є., Коваленко І. В. Перспективи використання енергії вітру./ VIII Міжнародна науково – практична конференція : «Хімічна технологія: наука, економіка та виробництво», м. Шостка, 27-29 листопада 2024, с.131-134.

# **МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО ТА НАНОТЕХНОЛОГІЇ**



# S- AND N-DOPED MICROPOROUS CARBON SUPPORTED BY MgO AND ZnO FOR HIGHLY SELECTIVE CO<sub>2</sub> CAPTURE

*Galaburda M.<sup>1</sup>, Dyachenko A.<sup>2</sup>, Deryło-Marczewska A.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Faculty of Chemistry, Maria Curie-Skłodowska University, Poland, [mariia.galaburda@gmail.com](mailto:mariia.galaburda@gmail.com)

<sup>2</sup>Chuiko Institute of Surface Chemistry, NAS of Ukraine, Ukraine

Global climate change has become a pressing issue of international concern, with human-generated CO<sub>2</sub> emissions being one of the main causes of this critical challenge. This emphasizes the urgent need to reduce the carbon footprint and remove it from the atmosphere.

This research presents a simple method to synthesize an innovative hierarchical porous carbon material doped with sulphur and nitrogen and/or additionally supported by MgO and ZnO, obtained from modified resorcinol-formaldehyde resin by pyrolysis (N<sub>2</sub> atmosphere, 800 °C). Melamine or thiourea were used as nitrogen or sulphur dopants, while zinc and Mg acetates served as sources for the ZnO and MgO nanostructures.

The effects of the dopants on porosity, morphology and adsorption performance were investigated. XRD, Raman and XPS analyses show the transformation of amorphous or poorly crystalline carbon into doped graphitic carbon, depending on the type of dopant, indicating the formation of complex composite structures. Nitrogen adsorption-desorption measurements show that the materials possess a hierarchical porous structure with a combined micro- and mesoporous texture, which has a high specific surface area (200–480 m<sup>2</sup>/g) and a total pore volume of 0.1 to 0.5 cm<sup>3</sup>/g. In addition, the materials show excellent CO<sub>2</sub> adsorption capacity at room temperature, reaching a maximum uptake of 2.1 mmol/g (Figure), with stable performance over at least four adsorption-desorption cycles. The results indicate that CO<sub>2</sub> binding occurs via both physisorption and chemisorption mechanisms, which are influenced by the type of dopants incorporated. XPS indicate the formation of N-containing functional groups and show peaks at ~398.3 eV (pyridinic N), ~399.8 eV (pyrrolic N) and ~401.2 eV (graphitic/quaternary N), with the intensity correlating with the melamine content. In the thiourea-based composites, both S-N-C and Zn-S-N-C show a pair of peaks centered at 164.0 and 165.2 eV, which can be assigned to thiophene-S 2p<sub>3/2</sub> and thiophene-S 2p<sub>1/2</sub>, respectively.

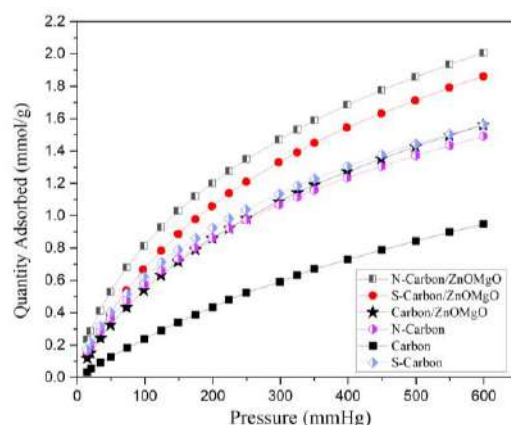


**Fig.** CO<sub>2</sub> adsorption isotherms of the preparation samples.

Thus, ZnO and MgO embedded within the carbon matrix enhance CO<sub>2</sub> adsorption by introducing basic sites that facilitate strong interactions with CO<sub>2</sub> molecules. These metal oxides not only contribute to increased surface area and porosity but also promote CO<sub>2</sub> capture through mechanisms such as acid-base interactions and electrostatic forces. Additionally, nitrogen-containing functional groups — including pyridinic-N, pyrrolic-N, and graphitic-N — play a pivotal role in CO<sub>2</sub> adsorption by providing active sites for strong binding interactions, such as Lewis acid-base interactions,  $\pi$ - $\pi$  stacking, and hydrogen bonding, thereby enhancing both selectivity and adsorption capacity.

**Acknowledgment:** This work was carried out within the framework of the Visegrad Scholarship (#52410504).

## INVESTIGATION OF NANOCOMPOSITE SYSTEMS PECTIN/SILICA AND THEIR PROPERTIES

*Krupska T.V.<sup>1,2</sup>, Klymenko N.Yu.<sup>1,2</sup>, Wei Q.<sup>1</sup>, Zheng J.<sup>1</sup>, Yang W.<sup>1</sup>, Turov V.V.<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Institute of Micro/Nano Materials and Devices, Ningbo University of Technology, China

<sup>2</sup>Chuiko Institute of Surface Chemistry, NAS of Ukraine, Ukraine,

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

The construction of composite systems containing pectins and silica materials can serve as a promising direction in the creation of nanomaterials with high adsorption characteristics in relation to molecules of medium and large molecular weight.

The purpose of this work was the construction of composite systems based on pectin and silicas (hydrophobic and hydrophilic and their mixtures), the study of their adsorption parameters in relation to the cationic dye methylene blue, and the effect of pectin on the hydration characteristics of silica sorbents.

For testing most medical sorbents, pharmacopoeial standards recommend marker substances [1]. They include differently charged dyes with different molecular weights. The sorption properties of the created composite systems were studied for their ability to bind the cationic dye methylene blue, which has a hydrophobic aromatic fragment and is used to study the adsorption of positively charged substances with a low molecular weight on surfaces that, like silica A-300, has a negative charge.

Composite systems based on pectins and silica materials are investigated in the paper. It was found that the maximum adsorption of methylene blue occurs from the model solution at pH 5.5 on the surface of all the studied samples. The A-300/AM-1/pectin composite system proved to be the best, regardless of the amount of pectin in the composite (5 or 10%) at different pH values (1.5 and 5.5), compared to other adsorbents.

The peculiarities of the formation of water layers in hydrated nanocomposite systems were investigated by the method of low-temperature <sup>1</sup>H NMR spectroscopy. It has been shown that by changing the concentration ratio of pectin and hydrophobic silica, the structure of the interfacial water and the energy of water interaction with the surface can be controlled. Due to this, new types of functionalized materials can be created for use in medical composites.

It has been shown that composite systems containing AM-1 hydrophobic silica are characterized by a decrease in interfacial energy in a weakly polar environment, which is due to the thickening of interfacial water clusters, and the size of surface water clusters decreases during the process of defrosting the system. It was found that the amount and binding energy of water in heterogeneous systems based on pectin are influenced by the processes of interparticle interactions between heterogeneous components, which likely determine the degree of association of molecules in the water layer.

1. State Pharmacopoeia of Ukraine: State Enterprise "Scientific and Expert Pharmacopoeial Center". – Kharkiv: RIREG, 2001. – 556 p.

# THE EFFECT OF PHYTOREDUCTANT ON THE STRUCTURE, MORPHOLOGY AND ADSORPTION-CATALYTIC PROPERTIES OF COBALT FERRITE

Liaskovska M.R.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry, Vasyl Stefanyk Precarpathian National University, Ukraine

<sup>2</sup>Department of Biological and Medical Chemistry named after academician Babenko H.O., Ivano-Frankivsk National Medical University, Ukraine, [mlaskovska@ifnmu.edu.ua](mailto:mlaskovska@ifnmu.edu.ua)

The peculiarities of the structure of nanoparticles with a spinel structure have been of interest to scientists for a long time. Their chemical stability, catalytic activity, and wide scope of applications are the reason why research is still relevant today. The properties of spinel nanoparticles can be regulated by chemical composition, synthesis method, and reducing agents. It is known that the “green” synthesis of nanoparticles makes nanoparticles biocompatible [1]. Namely, the presence of such components as carbohydrates, polyphenols, organic acids, flavonoids, tannins, and vitamins in the phytoextracts lets to use them as reducing agents for nanoparticle synthesis [2].

In this research, the green chemistry method has been used for cobalt ferrite synthesis. This is an eco-friendly method for the synthesis of nanoparticles with predetermined properties. Cobalt ferrite nanoparticles were synthesized by the modified sol-gel autocombustion method using extracts of *Physalis* fruit and husk. The effect of plant extract on the structure, morphology, and adsorption capacity of spinel ferrites was investigated. The NPs were characterized using X-ray, SEM, EDS, IR and Mossbauer spectroscopy. Crystallite sizes of the samples were calculated by Scherrer and Williamson-Hall methods and are in the range from 12 to 23 nm. The particle sizes and Mössbauer spectra for the samples №1 and №2 correspond to the transition from magnetically ordered state to superparamagnetic. Mössbauer spectra of the sample №3 consist of doublet only so there is no particle fraction in which a magnetically ordered state is possible at room temperature that have good agreement with the results of the particle size estimation from X-ray data. IR spectra indicate the presence of bonds characteristic of spinel, as well as the presence of functional groups of plant residues. The element composition, experimentally obtained from EDS analysis, corresponds to theoretical calculations. SEM photos of the samples demonstrates a lower degree of agglomeration for sample №1 and more distinct lamellar structures for samples №2 and №3. The adsorption capacity towards the model organic pollutant increases in the order №1 < №3 < №2. The decomposition of hydrogen peroxide in the wet catalytic oxidation of Congo Red dye for all samples is about 99%.

1. S. Gómez-Graña, M. Perez-Ameneiro, X. Vecino, I. Pastoriza-Santos, J. Perez-Juste, J.M. Cruz, A.B. Moldes, Biogenic synthesis of metal nanoparticles using a biosurfactant extracted from corn and their antimicrobial properties. - *Nanomaterials*.- 2017. - 7.

2. N. Shreyash, S. Bajpai, M.A. Khan, Y. Vijay, S.K. Tiwary, M. Sonker, Green Synthesis of Nanoparticles and Their Biomedical Applications: A Review. - *ACS Appl. Nano Mater.* – 2021. - 11428–11457.

# STRUCTURAL AND ENERGY TRANSFORMATIONS IN $\text{TiNi}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Sn}$

*Romaka L.<sup>1</sup>, Stadnyk Yu.<sup>1</sup>, Romaka V.A.<sup>2</sup>, Horyn A.<sup>1</sup>, Demchenko P.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Ivan Franko National University of Lviv, Ukraine, [lyubov.romaka@gmail.com](mailto:lyubov.romaka@gmail.com)

<sup>2</sup>National University "Lvivska Politechnika", Ukraine,

Thermoelectric materials based on half-Heusler phases (structure type  $\text{MgAgAs}$ ) have a high efficiency of converting thermal energy into electrical energy [1]. To optimize the characteristics of the thermoelectric material, the structural, electrokinetic, and energy properties of the intermetallic semiconductor  $n$ - $\text{TiNiSn}$  doped with Ag atoms were studied at concentrations  $x=0-0.04$ . Structural studies have shown that Ag atoms ( $r_{\text{Ag}}=0.145$  nm) occupy different crystallographic positions. At concentrations  $x=0.005-0.02$ , the lattice parameter  $a(x)$  of the  $\text{TiNi}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Sn}$  samples decreases, which is due to the substitution of Ti atoms ( $r_{\text{Ti}}=0.146$  nm) in position  $4a$  and the generation of donor states, and in the range  $x=0.02-0.04$ , the lattice parameter  $a(x)$  increases, due to the substitution of Ni atoms ( $r_{\text{Ni}}=0.125$  nm), which leads to the generation of acceptors. Doping  $n$ - $\text{TiNiSn}$  with the lowest concentration of Ag atoms,  $x=0.005$ , leads to an increase in the resistivity  $\rho(x, T)$ , which is maximum at  $x \approx 0.015$  and then decreases (Fig. 1a). At the same time, the sign of the thermopower coefficient  $\alpha(x, T)$  at all concentrations and temperatures is negative (Fig. 1b). Such behavior of the resistivity is possible only under the condition of the appearance and increase in the concentration of acceptor states in  $\text{TiNi}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Sn}$ , which compensate donor states.

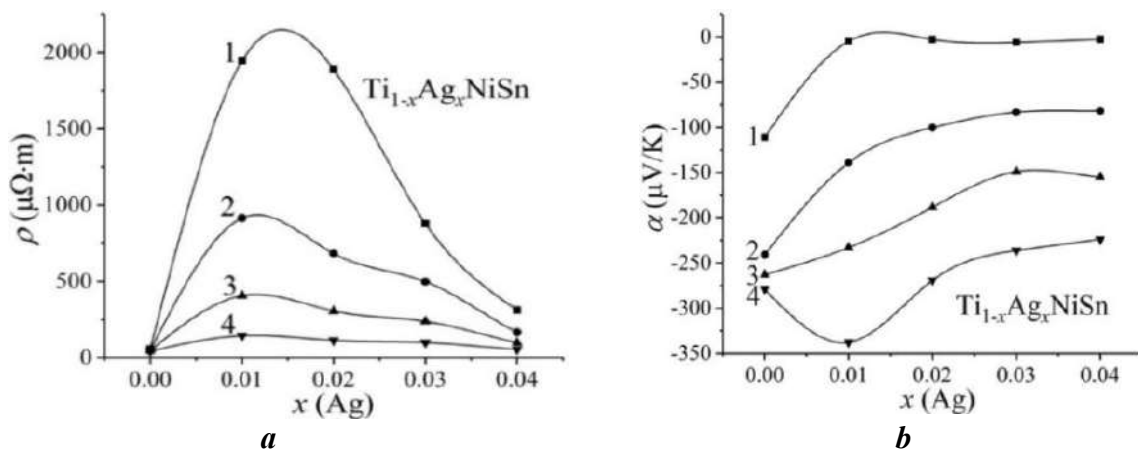


**Fig. 1.** Change in resistivity  $\rho(x, T)$  (a) and thermopower coefficient  $\alpha(x, T)$  (b) for  $\text{Ti}_{1-x}\text{Ag}_x\text{NiSn}$  at different temperatures: 1 –  $T=80$  K; 2 –  $T=250$  K; 3 –  $T=300$  K; 4 –  $T=380$  K.

Thus, studies of the structural, electrokinetic and energy properties of samples  $\text{TiNi}_{1-x}\text{Ag}_x\text{Sn}$  showed that defects and energy states of donor and acceptor nature are simultaneously generated in the semiconductor, depending on the impurity concentration. It was found that electrons are the main current carriers at all temperatures and concentrations. Studies have shown that at concentrations of impurity atoms Ag,  $x=0-0.01$ , the rate of generation of acceptor states is higher than that of donor states, which led to an increase in the resistivity  $\rho(x, T)$ , and at concentrations  $x=0.02-0.04$  the rate of generation of donors is higher. Studies have shown that this semiconductor is a promising thermoelectric material.

## Acknowledgements:

We would like to acknowledge financial support of the Ministry of Education and Science of Ukraine under Grants No. 0124U000989 and No 0124U001146. Romaka L., Stadnyk Yu., Horyn A., Demchenko P. also thank the Simons Foundation (PD-Ukraine-00014574) for financial support.

1. Romaka V.A., Stadnyk Yu.V., Krayovskyy V.Ya., Romaka L.P., Guk O.P., Romaka V.V., Mykyychuk M.M., Horyn A.M. The latest heat-sensitive materials and temperature transducers. – Lviv, Lviv Polytechnic Publishing House, 2020. – 612 p.

## SWELLING BEHAVIOR OF MIXED ALGINATE-PECTIN GELS

*Samchenko K.<sup>1,2</sup>, Goncharuk O.<sup>1,3</sup>, Samchenko Y.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>F.D.Ovcharenko Institute of Biocolloidal Chemistry of NAS of Ukraine,

<sup>2</sup>National Technical University of Ukraine “Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute”

<sup>3</sup>Institute of Agrophysics, Polish Academy of Sciences

[samchenko.kateryna@lil.kpi.ua](mailto:samchenko.kateryna@lil.kpi.ua)

Biopolymers, particularly polysaccharides like pectin and alginate, offer significant potential in addressing various environmental and health challenges. These biopolymers have demonstrated effectiveness in biomedical fields, such as drug encapsulation and delivery, wound healing, tissue engineering, and the development of natural packaging films that help reduce the reliance on non-biodegradable plastics [1]. When combined, pectin and alginate enhance each other's functional properties, leading to synergistic improvements in their physical and mechanical characteristics [2]. These biopolymers are widely recognized for their thickening and gelling properties, making them ideal for food systems and the creation of biodegradable biofilms for packaging purposes.

Pectins are composed mainly of an  $\alpha$ -1,4-D-galacturonic acid residue (>65% (w/w)) either as a free acid, methyl ester, or amides. The main structural component of alginate is considered a linear polysaccharide consisting of (1 $\rightarrow$ 4)  $\beta$ -D-mannuronic acid (M blocks) and  $\alpha$ -L-guluronic acid (G blocks) residues.

The synthesis of mixed polysaccharide gels based on alginate and pectin was carried out by ionotropic gelation, namely, by pumping a 2 % polysaccharide solution (or their mixture with a variable content of components) into a 0.5 %  $\text{CaCl}_2$  solution using a peristaltic pump [3].

Electron microscopy (SEM) analysis revealed distinct surface features for both gels (Fig. 1). The pure alginate granules exhibited a smooth, almost spherical shape with a uniform size distribution of approximately 5 mm in diameter. In contrast, the mixed alginate-pectin gel displayed a broader granule size range, from 1.5 to 2.5 mm, with reduced sphericity, suggesting that pectin granules are less stable and more prone to erosion, which could influence the swelling behavior of the gel. Both types of gels had rough, wrinkled surfaces, but the pure alginate gel was considerably smoother compared to the Alg-Pec gel, which had a more irregular surface texture with visible near-spherical white objects. These objects are likely related to the crystallization of NaCl and  $\text{CaCl}_2$  during ionotropic crosslinking.

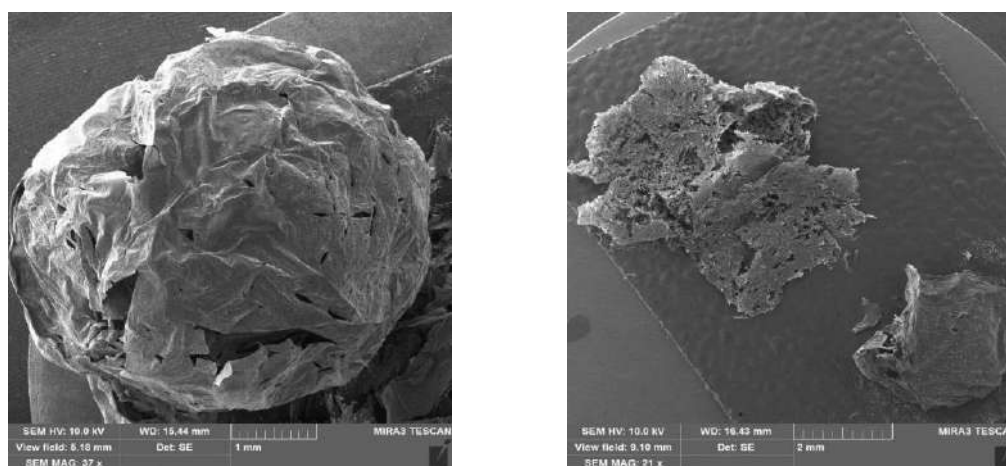


**Fig. 1.** SEM micrographs of (a): Alg gel ( $C_{\text{Alg}} = 2$  wt %,  $C_{\text{CaCl}_2} = 0.5$  wt % in the reaction mixture; zoom 37x) and (b): Alg-pec gel ( $C_{\text{Alg}} = 0.4$  wt %,  $C_{\text{Pec}} = 1.6$  wt %,  $C_{\text{CaCl}_2} = 0.5$  wt % in the reaction mixture; zoom 21x).

The swelling of granules based on pectin A and alginate, as well as pectin LM and alginate in water at different concentrations was studied in order to determine at what ratio of pectin to alginate the swelling will be most effective (Fig. 2).



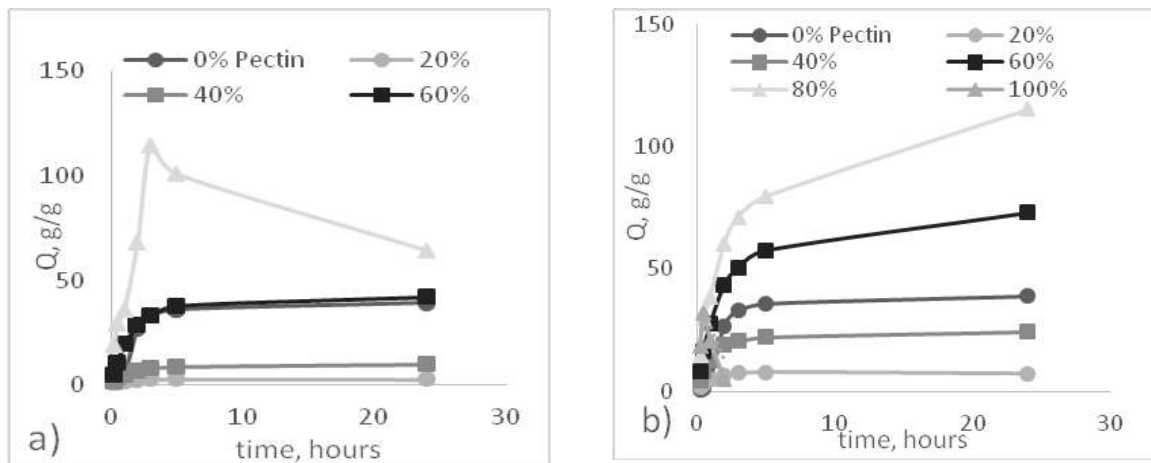


**Fig. 2.** Dependence of the swelling degree on the swelling time in water for mixed pectin A and Alginate (a) and pectin LM and Alginate (b) gel.

For pure Alginate ( $C_{Pec}=0$ ), the maximum swelling rate (after 5 days) reaches 30 g/g, while for the mixed gel 20 Alg:80 PecA it is—roughly 3 times higher, about 100 g/g, monotonically increasing with the increase of Pectin A content in the mixed gel, which was also observed while exploring the addition of Pec LM, but much smoother and more consistent. For mixed gels based on Alginate and Pectin LM, as the content of Pectin LM increases in the range from 20 to 80 % (mixed with Alginate), the maximum degree of swelling increases monotonically - from about 7.5 g/g to more than 115 g/g (at 80 % Pectin LM). A Gel with 100 % Pectin LM content was also synthesized and at the initial stage it had the maximum degree of swelling, but after 1 h the swelling was replaced by dissolution. The main regularities of the kinetics of swelling of hydrogels were described by Peppas and Ritger [4] and they introduced a simple exponential. Equation represents the diffusion mechanism of the polymeric system as follows:

$$M_t/M_\infty = kt^n$$

where  $M_t$  and  $M_\infty$  denote the amount of solvent diffused into the gel at time  $t$  and infinity (at equilibrium), respectively;  $k$  is the constant related to the structure of the network; and the exponent  $n$  is the number used to determine the type of diffusion. Based on the Peppas and Ritger equation for determining the type of diffusion it was found that for Alg-Pec mixed gels abnormal non-Fickian diffusion is characteristic. On the contrary, homo-alginate gels exhibit at sorption of water Super Case II transport mechanism.

The authors O. Goncharuk and Y. Samchenko are grateful for the financial support from PAS, Poland, and the NAS of the USA within a Long-term program for Ukrainian scientists (project “Biocompatible hybrid hydrogels with functional inorganic fillers for strengthening plant vegetation”).

1.B. Van Rooyen, M. De Wit, J. Van Niekerk, Pectin and Alginate Functional Biopolymers: Factors Influencing Structural Composition, Functional Characteristics and Biofilm Development, *Coatings*. – 2024. – 14.

2.I. Sokolovska, J. Kambulova, N. Overchuk, Study of the water binding in the gel systems of pectin and sodium alginate, *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies* . 2016. - 2 .

3.Y. Samchenko, K. Terpilowski, K. Samchenko, L. Golovkova, O. Oranska, O. Goncharuk, Calcium Alginate/Laponite Nanocomposite Hydrogels: Synthesis, Swelling, and Sorption Properties, *Coatings*. – 2024. - 14.

4.P.L. Ritger, N.A. Peppas, A simple equation for description of solute release I. Fickian and non-fickian release from non-swelling devices in the form of slabs, spheres, cylinders or discs, *Journal of Controlled Release*. – 1987. – 5.



## CARBOXYMETHYL CHITOSAN NANOPARTICLES CROSS-LINKED BY TERBIUM IONS: SYNTHESIS AND CHARACTERISTICS

*Shcheglov O.D., Kussyak A.P., Mechyk P.O., Petranovska A.L., Gorbyk P.P.*

Chuiko Institute of Surface Chemistry, NAS of Ukraine, [ol.shcheglov@gmail.com](mailto:ol.shcheglov@gmail.com)

Chitosan is a common polymer known for its high biocompatibility and, as a result, its promise in biomedical applications. However, chitosan is insoluble in water and generally neutral, which makes it difficult to use in this field. In contrast, carboxymethyl chitosan, its derivative, is highly soluble in water in a neutral environment and is not inferior in biocompatibility to chitosan. Moreover, materials based on carboxymethyl chitosan have shown positive results in studies of antibacterial, antitumour, antifungal and antioxidant properties in the fields of targeted drug and enzyme delivery, tissue engineering and biovisualisation [1].

The key to the formation of nanoparticles from carboxymethyl chitosan is the presence of a large number of amino and carboxy groups in its composition. This means that it can be a macroligand for cation coordination. Accordingly, the addition of cations can cross-link the macro chain of carboxymethyl chitosan, which is also known as ionic gelation. Under optimal conditions of such crosslinking, nanoparticles can be formed [2].

The aim of this study was to create polymeric nanoparticles with high biocompatibility, which could be used as a nanocintillator for photodynamic therapy or photopharmacology. The synthesis was based on the described ionic gelation approach using  $Tb^{3+}$  cations as a crosslinker.

Low-molecular-weight chitosan (Sigma-Aldrich, 448869, degree of deacetylation DA = 80.3%, average molecular weight M.w.  $\approx$  64 kDa) was used for synthesis. Carboxymethylation was performed as follows: 2 g of chitosan was suspended in 20 ml of 2-propanol by stirring for 1 h. While stirring, 10 ml of 10M NaOH was added dropwise and continued to be stirred for 1 h. Under stirring, 6 mL of monochloroacetic acid solution (0.5 mg/ml) was added dropwise, and the reaction mixture was stirred for 3 h at 65 °C. After cooling the reaction mixture to room temperature, it was filtered and washed with ethanol. The resulting sample was dried for 36 h at 40°C. For purification, the sample was dissolved in water under vigorous stirring for 2 h and the insoluble residue was separated by centrifugation (4000 rpm). The decanting supernatant was poured into cooled 2-propanol. The precipitate was collected by centrifugation and washed with 2-propanol. An excess of 0.05 M HCl was added to the resulting sample of carboxymethylchitosan sodium salt (CMCh-Na) and stirred for 30 min. The insoluble residue was separated by centrifugation, and the supernatant was poured into cooled 2-propanol. The resulting carboxymethyl chitosan (CMCh) precipitate was collected by centrifugation, lyophilised, and ground by grinding and sieving through a 100  $\mu$ m sieve. The modification reaction was confirmed by FTIR and  $^1H$  NMR [3]. The degree of substitution was determined by potentiometric titration with a result of 73.9% [4].

To form the nanoparticles, CMCh powder was dissolved in water and to separate the insoluble residue (0.45  $\mu$ m PTFE filter). Then, under constant stirring,  $TbCl_3$  solution was added to the solution dropwise. The pH of the solution was gradually adjusted to 6.7 with 0.1M NaOH. The resulting precipitate was washed with water and lyophilised, crushed by grinding and sieving through a 100  $\mu$ m sieve.

The obtained CMCh-Tb nanoparticles were studied by DLS and ELS to determine their colloidal characteristics.

In order to create such nanoparticles, a luminescence study was carried out. The X-ray-induced luminescence spectra of the obtained nanoparticles show that the particles have four peaks at wavelengths of 490, 545, 585 and 630 nm, which can be attributed to  $^5D_4-^7F_6$ ,  $^5D_4-^7F_5$ ,  $^5D_4-^7F_4$  and  $^5D_4-^7F_3$  Tb transitions, respectively. The main peak is at 546 nm, which corresponds to  $^5D_4-^7F_5$  Tb transitions.

Table

Colloidal characteristics of the obtained CMCh-Tb nanoparticles

| Characteristics                                                                           | Value             |
|-------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------|
| Average hydrodynamic size of nanoparticles in water before lyophilisation, nm             | $72.53 \pm 5.30$  |
| Average hydrodynamic size of nanoparticles in 0.9% NaCl solution after lyophilisation, nm | $100.40 \pm 6.95$ |
| $\zeta$ -potential in 0.9% NaCl solution after lyophilisation, mV                         | - 4.28            |

1. Chen L., Xie Y., Chen X., Li H., Lu Y., Yu H., Zheng D. O-carboxymethyl chitosan in biomedicine: A review. – *International Journal of Biological Macromolecules*. – 2024. – V.275. P.2. – P.133465.

2. Kalliola S., Repo E., Srivastava V., Heiskanen J.P., Sirviö J.A., Liimatainen H., Sillanpää M. The pH sensitive properties of carboxymethyl chitosan nanoparticles cross-linked with calcium ions. – *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*. – 2017. – V.153. – P.229-236.

3. García L., Braccini S., Pagliarini E., Del Gronchio V., Di Gioia D., Peniche H., Peniche C., Puppi D. Ionically-crosslinked carboxymethyl chitosan scaffolds by additive manufacturing for antimicrobial wound dressing applications. – *Carbohydrate Polymers*. – 2024. – V.346. – P.122640.

4. Xu C., Guan S., Xu J., Gong W., Liu T., Ma X., Sun C. Preparation, characterization and antioxidant activity of protocatechuic acid grafted carboxymethyl chitosan and its hydrogel. – *Carbohydrate Polymers*. – 2021. – V.252. – P.117210.

## RESEARCH OF NEW THERMOELECTRIC MATERIAL $\text{Zr}_{1-x}\text{Al}_x\text{NiSn}$

*Stadnyk Yu.<sup>1</sup>, Romaka V.A.<sup>2</sup>, Romaka L.<sup>1</sup>, Horyn A.<sup>1</sup>, Haraniuk P.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Ivan Franko National University of Lviv, Ukraine, [stadnykyu@gmail.com](mailto:stadnykyu@gmail.com)

<sup>2</sup>National University “Lvivska Politechnika”, Ukraine

The structural, electrokinetic, energetic, and magnetic properties of the  $\text{Zr}_{1-x}\text{Al}_x\text{NiSn}$  solid solution obtained by doping  $n$ -ZrNiSn with Al atoms by substituting Zr atoms at the  $4a$  position have been investigated. Previous studies of the ZrNiSn compound have established that its structure is disordered, and the  $4a$  position of Zr atoms is occupied by Ni atoms up to  $\sim 0.5\%$ , which generates defects of donor nature and donor states in the band gap  $\varepsilon_g$  [1]. Tetrahedral voids in the ZrNiSn structure constitute  $\sim 24\%$  of the unit cell volume and are traps for impurity atoms, generating defects and corresponding energy states [2].

The calculation of the unit cell parameter  $a(x)$  for the  $\text{Zr}_{1-x}\text{Al}_x\text{NiSn}$  solid solution revealed that introducing Al atoms into the ZrNiSn structure leads to complex structural transformations rather than the expected linear change resulting from the substitution of Zr atoms at position  $4a$ . At concentrations  $0 < x \leq 0.02$ , the unit cell parameter  $a(x)$  of  $\text{Zr}_{1-x}\text{Al}_x\text{NiSn}$  increases (Fig. 1a), which is the result of the substitution of Ni atoms ( $r_{\text{Ni}}=0.125$  nm) available at position  $4a$  by impurity Al atoms ( $r_{\text{Al}}=0.143$  nm). Such substitution is attended by the generation of defects of an acceptor nature in  $\text{Zr}_{1-x}\text{Al}_x\text{NiSn}$  (Al ( $3s^23p^1$ ) has fewer valence electrons than Ni ( $3d^84s^2$ )), and impurity acceptor states  $\varepsilon_A^1$  will appear in the band gap  $\varepsilon_g$  of  $\text{Zr}_{1-x}\text{Al}_x\text{NiSn}$ . At the concentration of Al atoms,  $x \approx 0.02$ , the parameter  $a(x)$  is maximum, and at  $x > 0.02$ , it decreases.

The decrease in the parameter  $a(x)$  of  $\text{Zr}_{1-x}\text{Al}_x\text{NiSn}$  at concentrations of  $x > 0.02$  is caused by the substitution of Zr atoms ( $r_{\text{Zr}}=0.160$  nm) by Al atoms in position  $4a$ , which also generates structural defects and energy states of an acceptor nature (the Al atom ( $3s^23p^1$ ) has fewer valence electrons than the Zr atom ( $4d^25s^2$ )). Two channels for generating acceptor states appear in an  $n$ -

type semiconductor. This could result in a change in the type of conductivity at a certain concentration. At the same time, the behavior  $a(x)$  of  $\text{Zr}_{1-x}\text{Al}_x\text{NiSn}$  at concentrations  $x > 0.04$  cannot be explained by a simple substitution of some atoms by others. After all, in the  $\text{Zr}_{1-x}\text{Al}_x\text{NiSn}$  structure, there is a linear increase in the concentration of Al atoms, and the rate of change of the parameter  $a(x)$  is smaller and reaches saturation at  $x > 0.05$ . Below, based on the results of the electrokinetic and energy properties of  $\text{Zr}_{1-x}\text{Al}_x\text{NiSn}$ , the mechanism of transformation of the crystal and electronic structures will be shown.

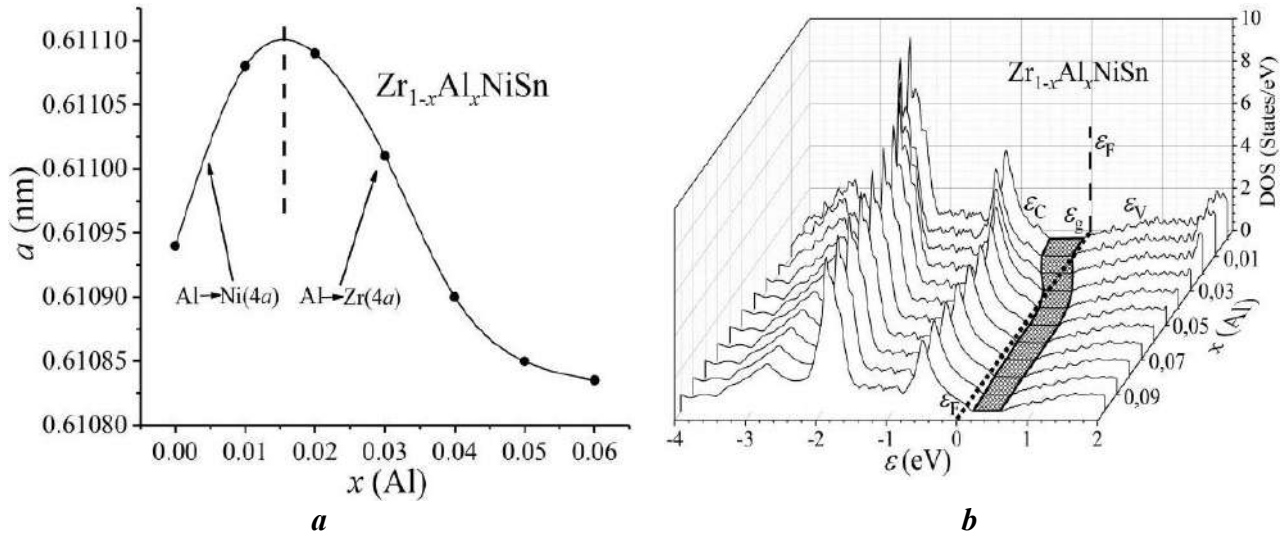


**Fig. 1.** Change in the cell parameter  $a(x)$  (a) and DOS simulation (b) of  $\text{Zr}_{1-x}\text{Al}_x\text{NiSn}$ .

The density of electronic states (DOS) distribution for the ordered variant of the  $\text{Zr}_{1-x}\text{Al}_x\text{NiSn}$  crystal structure was calculated to find the position of the Fermi level  $\epsilon_F$  relative to the continuous energy bands and the band gap width  $\epsilon_g$  (Fig. 1b). Since the substitution of Zr atoms by Al atoms in the crystallographic position 4a generates structural defects of an acceptor nature, even at the lowest concentration of Al atoms in the experiment,  $x=0.01$ , the Fermi level  $\epsilon_F$  (dashed line) begins to move away from the conduction band  $\epsilon_C$ . At a concentration of  $x \approx 0.02$ , the Fermi level  $\epsilon_F$  will be located near the middle of the band gap  $\epsilon_g$  of the semiconductor (full compensation state), which will determine the maximum values of the resistivity  $\rho$  in the experiment. At even higher concentrations, when the Fermi level  $\epsilon_F$  crosses the middle of the band gap  $\epsilon_g$  and approaches the valence band  $\epsilon_V$ , the type of the main current carriers of the semiconductor could change.

Fig. 2 shows the temperature dependences of the resistivity  $\ln(\rho(1/T, x))$  and the thermopower coefficient  $\alpha(1/T, x)$  of  $\text{Zr}_{1-x}\text{Al}_x\text{NiSn}$ ,  $x=0-0.06$ . The presented activation parts in the dependences indicate that the studied samples are doped semiconductors, and the negative values of the thermopower coefficient  $\alpha(1/T, x)$  show that electrons are the main current carriers [2]. Thus, the study of the structural, electrokinetic, energetic and magnetic properties of  $\text{Zr}_{1-x}\text{Al}_x\text{NiSn}$ , obtained by doping  $n$ -ZrNiSn with Al atoms by substituting Zr atoms in the 4a position, has demonstrated the complex nature of structural and energetic transformations.

It has been established that Al atoms can occupy different positions, causing changes in the crystal and electronic structures. It has been shown that in  $\text{Zr}_{1-x}\text{Al}_x\text{NiSn}$ ,  $x=0-0.02$ , the increase in the unit cell parameter  $a(x)$  is due to the preferential substitution of Ni atoms ( $r_{\text{Ni}}=0.125$  nm,  $3d^8 4s^2$ ) in the 4a position by Al atoms ( $r_{\text{Al}}=0.143$  nm,  $3s^2 3p^1$ ), generating defects and energy states of an acceptor nature.

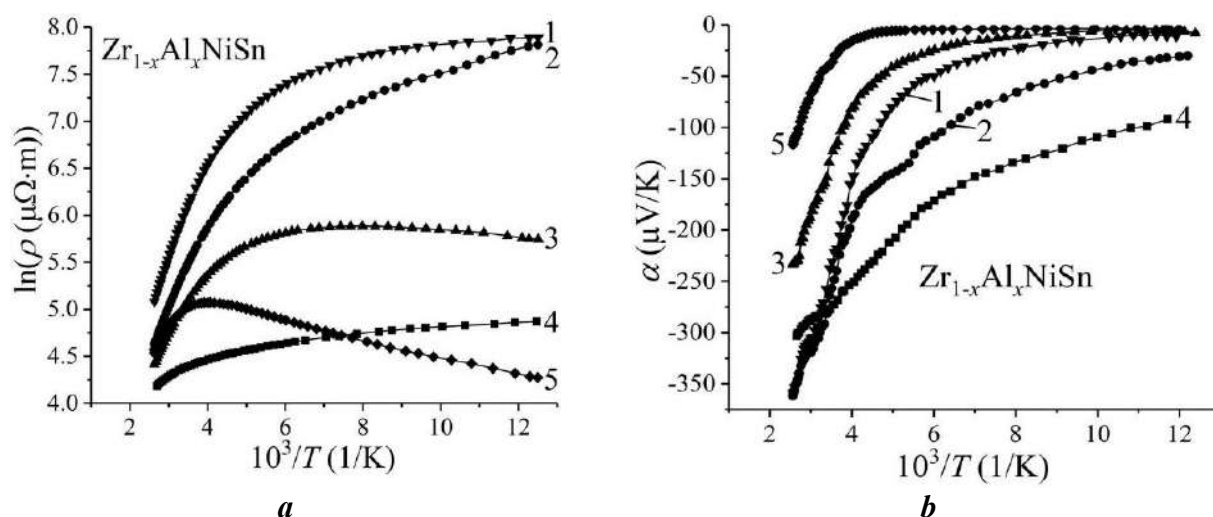


**Fig. 2.** Temperature dependences of the resistivity  $\ln(\rho(1/T, x))$  (a) and the thermopower coefficient  $\alpha(1/T, x)$  (b) of the  $\text{Zr}_{1-x}\text{Al}_x\text{NiSn}$  solid solution: 1 –  $x = 0.01$ ; 2 –  $x = 0.02$ ; 3 –  $x = 0.04$ ; 4 –  $x = 0.05$ ; 5 –  $x = 0.06$ .

The decrease in the parameter  $a(x)$   $\text{Zr}_{1-x}\text{Al}_x\text{NiSn}$ ,  $0.02 < x \leq 0.04$ , is caused by the substitution of larger Zr atoms ( $r_{\text{Zr}} = 0.160$  nm) with smaller Al atoms, which also generates defects and energy states of an acceptor nature. At concentrations  $x > 0.04$ , Al atoms are mainly localized in tetrahedral voids of the structure, generating defects and energy states of a donor nature. The ratio of the concentrations of the generated states  $\text{Zr}_{1-x}\text{Al}_x\text{NiSn}$  determines the position of the Fermi level  $\varepsilon_F$ . The performed studies allowed us to identify the mechanisms of electrical conductivity to establish the conditions for the synthesis of thermoelectric materials  $\text{Zr}_{1-x}\text{Al}_x\text{NiSn}$  with maximum efficiency of converting thermal energy into electrical energy.

**Acknowledgement:** We would like to acknowledge financial support of the Ministry of Education and Science of Ukraine under Grants No. 0124U000989 and No 0124U001146. Stadnyk Yu., Romaka L. and Horyn A. also thank the Simons Foundation (PD-Ukraine-00014574) for financial support.

1. Romaka V.V., Rogl P., Romaka L., Stadnyk Yu., Grytsiv A., Lakh O., Krayovskii V. Peculiarities of structural disorder in Zr- and Hf-containing Heusler and half-Heusler stannides // *Intermetallics*. – 2013. – Vol. 35. – P. 45–52.

2. Romaka V.A., Stadnyk Yu.V., Krayovskyy V.Ya., Romaka L.P., Guk O.P., Romaka V.V., Mykychuk M.M., Horyn A.M. The latest heat-sensitive materials and temperature transducers. – Lviv, Lviv Polytechnic Publishing House, 2020. – 612 p.

## ELECTRICAL PROPERTIES OF FERRITE STRUCTURES $n\text{-NiFe}_2\text{O}_4/n\text{-InSe}$

*Tkachuk I.G.<sup>1,2</sup>, Ivanov V.I.<sup>1</sup>, Kovalyuk M.Z.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup> Institute for Problems of Materials Science, Chernivtsi Branch, Ukraine

<sup>2</sup> Bukovinian State Medical University, Ukraine

The conditions of application of thin semiconducting ferrite  $\text{NiFe}_2\text{O}_4$  films on  $n\text{-InSe}$  crystalline layered semiconductor substrates at a temperature of 350 oC by the spray-pyrolysis method for the creation of photosensitive  $n\text{-NiFe}_2\text{O}_4/n\text{-InSe}$  heterojunctions were studied. Based on the temperature dependence of direct and reverse current-current characteristics, the mechanisms of

current flow through the heterojunction have been established. The spectral photosensitivity of the n-NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/n-InSe heterojunction in the energy range of 1.26÷3.2 eV was analyzed.

Currently, the use of semiconductor technologies is reaching a new level due to the use of various materials for the creation of devices. The use of semiconductors is increasingly observed in various practical applications, such as precision technological instrumentation, sensors, medical diagnostic devices, and others. This requires new semiconductor structures to have a wide range of properties, such as mechanical strength, appropriate electrical and magnetic properties, radiation resistance, etc. A significant role is played by the low cost, ease of manufacture, and wide distribution of the elements on the basis of which these structures are created. One such example is nickel ferrite film, which contains chemical elements common in nature, and their application to substrates can be done by various methods.

Monocrystalline n-InSe grown by the Bridgman method was used to manufacture heterojunctions. From the InSe crystal ingot, plane-parallel plates 3×3×1.2 mm<sup>3</sup>, which had perfect mirror surfaces, were chipped along the cleavage plane. NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> thin films were produced by spray pyrolysis of a 0.1 M aqueous solution of nickel dichloride NiCl<sub>2</sub>·2H<sub>2</sub>O and iron trichloride FeCl<sub>3</sub>·6H<sub>2</sub>O. Distilled water was used to dissolve metal salts.

In fig. shows the straight branches of the I-V characteristics of the n-NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/n-InSe heterojunction at temperatures from 244 K to 317 K. The height of the potential barrier ( $e\phi$ ) was determined by extrapolation of the straight sections of the straight branches to the voltage axis. It depends weakly on temperature and is equal to  $e\phi \approx 0.65$  eV.

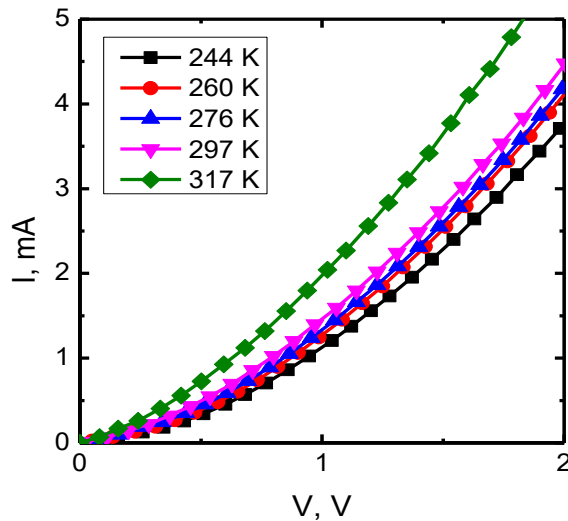


**Fig.** Direct branches of the I-V characteristics of the n-NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/n-InSe heterojunction.

The spectral dependence of the quantum efficiency of the n-NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/n-InSe heterostructure irradiated from the side of the n-NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> film is in the photon energy range of 1.26÷3.2 eV with a maximum at 2.48 eV. The long-wavelength edge of photosensitivity at  $h\nu \approx 1.26$  eV is caused by the fundamental absorption edge in n-InSe. The sharp edge of the intrinsic absorption indicates that the light is not scattered in the NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> layer and completely enters InSe at  $h\nu \approx E_g(\text{InSe})$ . This can be a confirmation of the high uniformity of the NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> film. With a further increase in the energy of photons, the photoresponse of the heterostructure increases due to an increase in the absorption coefficient. When  $h\nu$  reaches the values of the band gap of NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, the latter begins to absorb light and the photoresponse decreases, as the number of photons entering InSe decreases. The full width of the spectrum of the relative quantum efficiency at half-height  $\delta 1/2$  is  $\approx 1.96$ .

# ENGINEERING FLUORINATED SILICA-BASED MATRICES WITH TERBIUM-AMINO COMPLEXES FOR HIGH-PERFORMANCE SENSING

*Tomina V.V.<sup>1</sup>, Semeshko O.Y.<sup>2,3</sup>, Dutková E.<sup>2</sup>, Melnyk I.V.<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Chuiko Institute of Surface Chemistry, NAS of Ukraine, Ukraine, [v.v.tomina@gmail.com](mailto:v.v.tomina@gmail.com)

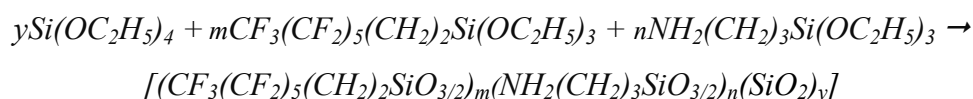
<sup>2</sup>Institute of Geotechnics of the Slovak AS, Slovakia,

<sup>3</sup>Kherson National Technical University, Ukraine

The incomplete metabolism of pharmaceutical compounds hinders their removal from the aqueous environment by standard wastewater treatment processes. Therefore, developing sensitive, selective, and efficient methods for the detection of pharmaceutical substances in water is essential. Silica-based sensors, particularly those modified with rare earth elements (REEs), such as terbium (Tb), offer a promising solution to this problem [1]. These sensors utilize the strong complexation between the nitrogen-containing functional groups on the silica surface and the REEs, which act as luminescent antennae. It is well known that hydrophobic interactions and physical adsorption enhance photoluminescent signals or cause shifts in them, which is also crucial for the selective detection of pharmaceutical compounds. Thus, to enhance photoluminescence, hydrophobic groups were added to the surface layer of the synthesized amino materials.

Thus, particles combining aminopropyl functions with long fluorinated chains ( $-\text{NH}_2/-$   $(\text{CH}_2)_2(\text{CF}_2)_5\text{CF}_3$ ) were designed. Silica spheres featuring both surface aminopropyl and fluorine-containing groups were synthesized via Stöber method. Specifically, tetraethyl orthosilicate (TEOS, 98%, Aldrich) underwent hydrolytic polycondensation in an alkaline medium prepared with ammonium hydroxide in the presence of two trifunctional silanes: one bearing a fluorine-containing substituent (1H,1H,2H,2H-perfluorooctyltriethoxysilane, PFES, 98%, ABCR) and one bearing an aminopropyl substituent (APTES, Fluka, 98%).

Schematically reaction can be depicted as follows:



As it was earlier researched [2], in such systems TEOS is the first to hydrolyse and condensate forming primary particles with the subsequent attachment of functionalising silanes. Thus the structure of the surface layer is ‘patchy’ with hydrophobic (fluorinated) and hydrophilic (amino) regions [3]. In the current synthesis, the TEOS/(PFES+APTES) molar ratio was kept constant at 3/1, while the ratio of functionalising silanes themselves, PFES and APTES, was varied, as given in Table 1.

**Table 1**

Some characteristics of the synthesized samples

|     | Sample         | TEOS/<br>(PFES+APTES) | % N  | % C   | % H   | C <sub>NH2</sub> ,<br>mmol/g | S <sub>BET</sub> ,<br>m <sup>2</sup> /g |
|-----|----------------|-----------------------|------|-------|-------|------------------------------|-----------------------------------------|
| 8*F | <b>SPA0.25</b> | 3/(0.75+0.25)         | 0.81 | 15.50 | 1.468 | 0.58                         | 68                                      |
| 7*F | <b>SPA0.5</b>  | 3/(0.5+0.5)           | 1.55 | 14.07 | 1.929 | 1.12                         | 47                                      |
| 9*F | <b>SPA0.75</b> | 3/(0.25+0.75)         | 2.17 | 11.29 | 2.368 | 1.58                         | 72                                      |

According to the elemental analysis (conducted with elementary analyzer Vario MACRO cube of Elementar Analysensysteme GmbH), the content of amino groups in the materials varies from 0.58 to 1.58 mmol/g, and correlates with the quantity of APTES introduced during synthesis. SEM microphotographs confirm the formation of particles with the forms close to spherical.

IR spectroscopy was used to identify the presence of functional groups in the surface layer of the materials. The presence of fluorine-containing groups in the samples was confirmed by two absorption bands in their IR spectra, namely, a band of medium intensity with a frequency of  $\sim 1315 \text{ cm}^{-1}$  corresponding to  $\nu_{\text{as}}(\text{CF})$ , and a strong-intensity band in the region of  $1190\text{-}1200 \text{ cm}^{-1}$ ,



corresponding to  $\nu_s$  (CF). However, the band of symmetric vibrations somewhat overlaps with fluctuations of polysiloxane network (broad intense adsorption band of siloxane bonds,  $\equiv\text{Si-O-Si}\equiv$ , in the range 1020-1150  $\text{cm}^{-1}$ , so it is difficult to identify it clearly. Indirectly, the presence of  $\equiv\text{Si}(\text{CH}_2)_2(\text{CF}_2)_5\text{CF}_3$  and  $\equiv\text{Si}(\text{CH}_2)_3\text{NH}_2$  groups in samples is testified by two absorption bands, at  $\sim 1362$  and  $\sim 1445$   $\text{cm}^{-1}$  in their IR spectra, which can be attributed to  $\delta(\text{Si-CH}_2)$ , and  $\delta(\text{CH}_2)$ , accordingly, but they overlap with broad absorpti absorption band of  $\nu(\text{OH})$  of adsorbed water at  $\sim 3000$ - $3400$   $\text{cm}^{-1}$ . In fact, polysilsesquioxane sample contains both stretching and bending bands characteristic of amino groups, namely  $\nu_{s,as}(\text{NH})$  at 3290, 3360  $\text{cm}^{-1}$  and  $\delta(\text{NH}_2)$  at 1480  $\text{cm}^{-1}$ . The presence of diethylenetriamine functional groups in the samples is evidenced by a group of absorption bands from  $-\text{CH}_2-$  units in the ethylene spacer manifested in the FTIR spectra in the region of 2850-2930  $\text{cm}^{-1}$ , which correspond to symmetric and asymmetric stretches of C-H bonds

The experiment on the removal of Tb(III) by sol-gel derived amino/fluorinated materials demonstrated direct dependence between the amino-groups content and sorption capacity: sample **SPA0.25** (132  $\mu\text{mol/g}$ ), followed by **SPA0.5** (245  $\mu\text{mol/g}$ ) and **SPA0.75** (717  $\mu\text{mol/g}$ ) samples. The adsorption isotherm data were fit to the Langmuir and Freundlich isotherm models (Table 2).

*Photoluminescence (PL) studies.* Room temperature PL spectra were acquired on a photon-counting spectrofluorometer PC1 (ISS, USA) with a 300 W xenon lamp as the excitation source. The emission spectra were obtained at the excitation wavelength of 310 nm (resolution step 1 nm) and excitation and emission slit widths set at 1.0 and 2.0 nm. The samples were placed into 1 cm path length rectangular quartz cuvette for spectral analysis.

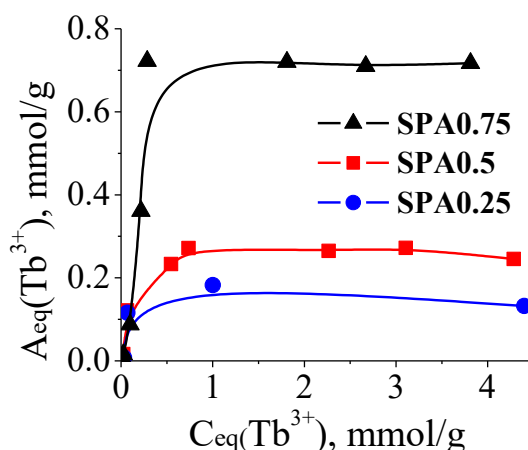


**Fig. 1.** Isotherms of Tb(III) removal by the samples.

**Table 2**

Parameters of Tb(III) ions sorption in the Langmuir and Freundlich equations

| Sample         | Langmuir equation<br>$A_{eq} = A_{max} \cdot (K_L \cdot C_{eq}) / (1 + K_L \cdot C_{eq})$ |                   |               | Freundlich equation<br>$A_{eq} = K_F \cdot C_{eq}^{(1/n)}$ |           |        |
|----------------|-------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------|---------------|------------------------------------------------------------|-----------|--------|
|                | $A_{max}$ ,<br>mmol/g                                                                     | $K_L$ ,<br>L/mmol | $R^2$         | $K_F$ ,<br>mmol/g                                          | $1/n$     | $R^2$  |
| <b>SPA0.25</b> | 0.16±0.03                                                                                 | 14.1±10.4         | <b>0.8496</b> | 0.12±0.03                                                  | 0.21±0.14 | 0.5763 |
| <b>SPA0.5</b>  | 0.28±0.01                                                                                 | 9.7±2.7           | 0.9751        | 0.21±0.02                                                  | 0.24±0.08 | 0.7961 |
| <b>SPA0.75</b> | 0.80±0.09                                                                                 | 4.9±2.3           | <b>0.8881</b> | 0.54±0.08                                                  | 0.31±0.11 | 0.7330 |

$A_{eq}$  - equilibrium adsorption, mmol/g;  $K_L$  - the Langmuir constant, L/mmol;  $C_{eq}$  - equilibrium concentration of As(III) ions in the solution, mmol/L;  $A_{max}$  - maximal adsorption capacity, mmol/g;  $K_F$  - a Freundlich constant, mmol/g;  $n$  - parameter characterising adsorption intensity.

Working silica suspension concentration was 0.1 g/L, different pollutant (Ofloxacin) concentration 5 and 10 µg/L, ionic power 0.1 (created by KCl). The PL spectra of Tb<sup>3+</sup>-loaded **SPA0.75** suspension with concentration of 0.1 g/L is (Fig. 2) recorded Tb(III) emission peaks at 492 nm.

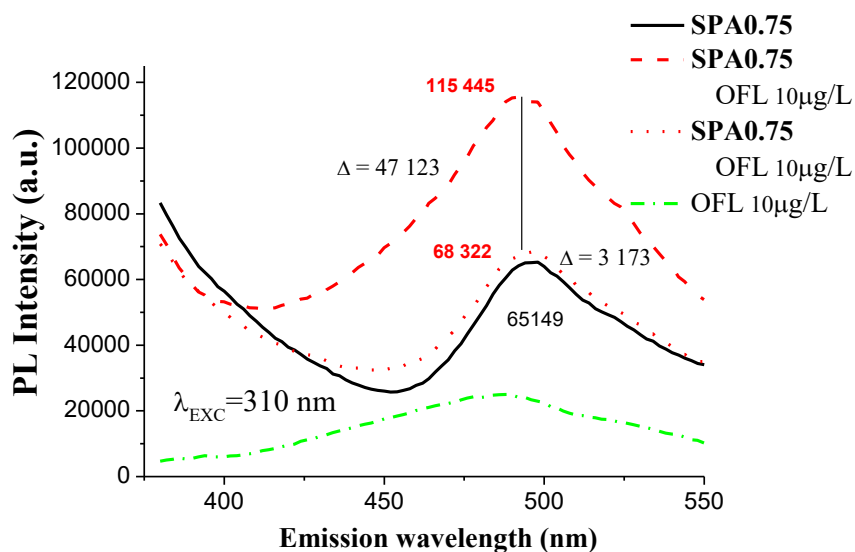


**Fig. 2.** Photoluminescence spectra of organosilica materials.

The intensity of the peak increases in the presence of OFL; moreover a dependence from contaminant concentration is observed. At the contaminant concentration of 5 µg/L, the peak intensity grows by 3000 a.u., while at the contaminant concentration of 10 µg/L, the increase in peak intensity is about 47 000 a.u. These data necessitate further investigation, however such levels of Ofloxacin detection and concentration-dependent response are significant enough to make the use of such materials as sensors for Ofloxacin promising.

**Acknowledgement.** The authors are grateful to the funding agencies and projects for supporting these studies: the Visegrad Scholarship Visegrad Scholarship ID#52410608 (V.Tomina), VEGA 2/0138/24 (O.Semeshko), and the EU NextGenerationEU through the Recovery and Resilience Plan for Slovakia under the projects 09I03-03-V01-00098 (O.Semeshko) and 09I03-03-V04-00708 (I.Melnyk).

1. Taylor K.M.L. and Lin W. Hybrid silica nanoparticles for luminescent spore detection. – *Journal of Materials Chemistry*. – 2009. – V.19. – P.6418–6422
2. Tomina V.V., Yurchenko G.R., Alexandr K Matkovsky A.K., Zub Y.L., Kosak A., Lobnik A. Synthesis of polysiloxane xerogels with fluorine-containing groups in the surface layer and their sorption properties. – *Journal of Fluorine Chemistry*. – 2011. – V.132. I.12. – P.1146–1151.
3. Tomina V.V., Melnyk I.V., Zub Y.L., Kareiva A., M. Vaclavikova M., Seisenbaeva G.A., Kessler V.G. Tailoring bifunctional hybrid organic–inorganic nanoadsorbents by the choice of functional layer composition probed by adsorption of Cu<sup>2+</sup> ions. – *Beilstein journal of nanotechnology*. – 2017. – V.8. I.1. – P.334–347.

# Zn, Ag-DOPED CuO NANOPARTICLES WITH ENHANCED COLLOIDAL STABILITY AND THEIR ANTIMICROBIAL PERFORMANCE

*Varchenko V.<sup>1</sup>, Bryleva K.<sup>1</sup>, Bunina Z.<sup>1</sup>, Belikov K.<sup>1</sup>, Zavgorodnii A.<sup>2</sup>, Paliy A.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Institute of Functional Materials Chemistry, NAS of Ukraine,

State Scientific Institution "Institute for Single Crystals", NAS of Ukraine, [varchenko@isc.kh.ua](mailto:varchenko@isc.kh.ua)

<sup>2</sup>National Scientific Center "Institute of Experimental and Clinical Veterinary Medicine"

CuO nanoparticles have been widely utilized in various fields, including catalysis, medicine, and disinfection. They exhibit significant antimicrobial activity against bacteria, fungi, and viruses by damaging cell membranes and inhibiting bacterial growth. Doping is an effective strategy to enhance the properties of nanoparticles. Studies have shown that CuO nanoparticles doped with Zn, Ag, or a combination of both (Ag&Zn) demonstrate superior antibacterial efficiency compared to pure CuO nanoparticles [1-3]. A major challenge associated with nanoparticles is their tendency to aggregate, forming larger particles due to Van der Waals and other attractive forces. The disintegration of these aggregates and the dispersion of nanoparticles to achieve stable suspensions remain complex and critical issues. However, limited research has focused on producing stable nanoparticle suspensions. The objective of our study was to develop a simple method for synthesizing Zn,Ag-doped CuO nanoparticles in suspension form and to evaluate the stability of the resulting suspensions.

Zn, Ag-doped CuO nanoparticles were synthesized via the hydrolysis of copper, silver, and zinc ions (9:0.5:0.5 molar ratio, total metal ion concentration of 0.005 mol/L) using sodium hydroxide. The reaction was carried out in the presence of sodium dodecyl sulfate as a surfactant under continuous stirring and heating. Copper, zinc, and silver nitrates served as metal precursors. Key synthetic parameters, including ligand presence, hydroxide concentration, reaction time, and temperature, were systematically studied and found to significantly influence the colloidal stability of the nanoparticles obtained.

A stable colloid of Zn, Ag-doped CuO nanoparticles, as a reddish-brown suspension, was obtained under the following synthesis conditions: a 40-fold excess of ammonia, a 5-fold excess of sodium hydroxide, a reaction temperature of 50 °C, and a reaction time of 1 hour. The resulting colloid was characterized using IR spectroscopy, dynamic light scattering (DLS), transmission electron microscopy (TEM), and inductively coupled plasma optical emission spectroscopy (ICP-OES).

Figure 1 presents the FTIR spectra of the synthesized Zn, Ag-doped CuO nanoparticles alongside CuO nanoparticles prepared under identical conditions but without dopants.

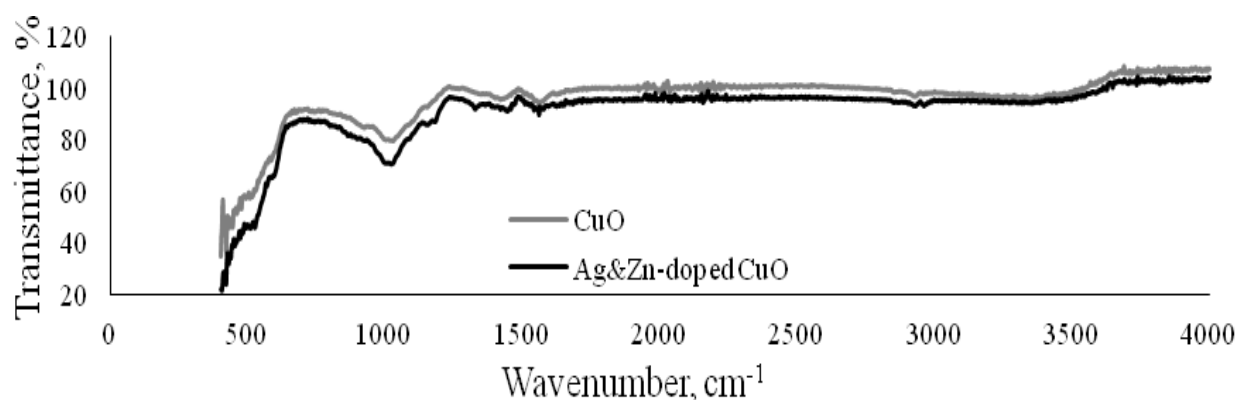


**Fig. 1.** FTIR spectra of CuO and Ag&Zn-doped CuO nanoparticles.

The bands in the 400–600 cm<sup>-1</sup> range are generally attributed to Cu–O stretching vibrations, while the band near 1000 cm<sup>-1</sup> corresponds to Cu–O bond bending vibrations. A small band at 1178

$\text{cm}^{-1}$  is characteristic of silver. Peaks associated with Zn–O vibrations, typically observed around  $440\text{ cm}^{-1}$ , are indistinguishable due to the high CuO content.

Figure 2 presents the particle size distribution obtained via DLS along with a TEM image of the studied colloid. The formation of nanoparticles with sizes ranging from 40 to 60 nm was observed.

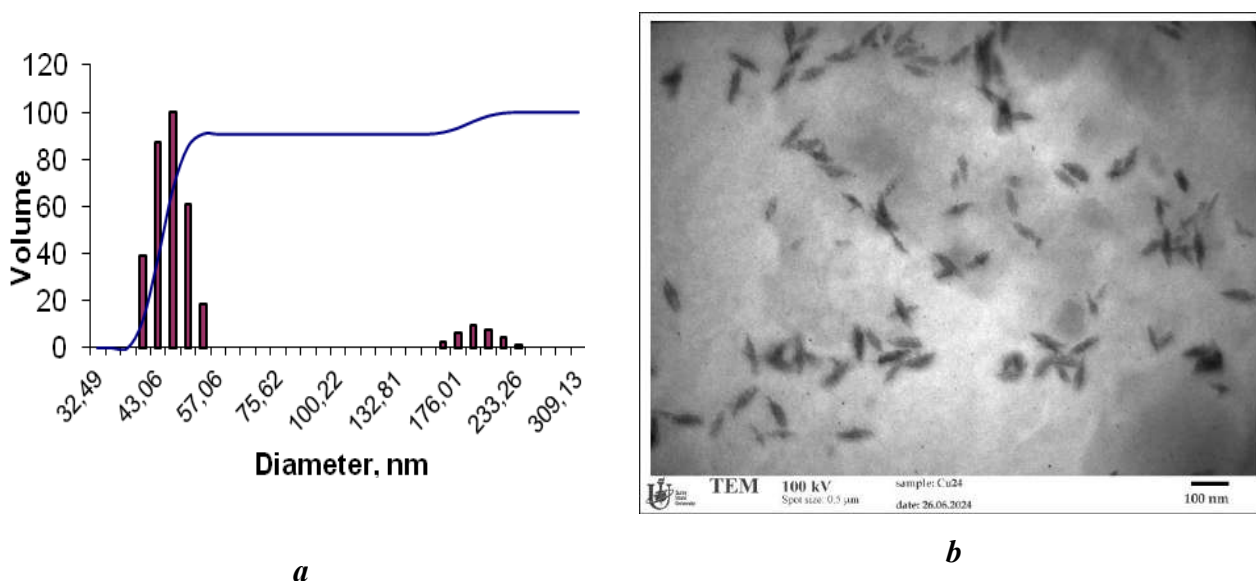


**Fig.2.** Particle size distribution and TEM image of the colloid studied.

The long-term stability of the colloid was evaluated by analyzing its formulation content using ICP-OES and measuring particle size distribution at predefined time intervals. The results indicated that the colloid remained stable for at least six months.

The antimicrobial activity of the studied colloid Cu(Zn, Ag)O was evaluated against mycobacteria *M. fortuitum*, *M. bovis*, *M. avium* and compared to CuO nanoparticles and CuO nanoparticles doped with either Zn or Ag, synthesized under the same conditions. Neither CuO nor Cu(Zn)O nanoparticles exhibited bacteriostatic or bactericidal activity against any of the tested species. In contrast, the studied colloid Cu(Zn, Ag)O exhibited bacteriostatic activity, inhibiting the viability of *M. fortuitum*, *M. bovis*, and *M. avium* at 24 hours, with further enhancement at 48 and 72 hours. This performance was comparable to the Cu(Ag)O formulation, which, despite showing activity, was found to be unstable.

*Authors thank National Research Foundation of Ukraine for financial support.*

1. Thakur N., Anu, Kumar K., and Kumar A. Effect of (Ag, Zn) co-doping on structural, optical and bactericidal properties of CuO nanoparticles synthesized by a microwave-assisted method,” // *Dalt. Trans.* – 2021. – Vol. 50 (18). –pp. 6188–6203.

2. Shinde R. S. *et al.*, “Design, fabrication, antitubercular, antibacterial, antifungal and antioxidant study of silver doped ZnO and CuO nano candidates: A comparative pharmacological study // *Curr. Res. Green Sustain. Chem.* – 2021. – V. 4. – p. 100138.

3. Lv Y., Li L., Yin P., and Lei T. Synthesis and evaluation of the structural and antibacterial properties of doped copper oxide // *Dalt. Trans.* – 2020. - V. 49(15). – P. 4699–4709.

## ELECTROCHEMICAL FORMATION AND OPTICAL PROPERTIES OF POLYPYRROLE/MAX PHASE FILMS

*Zhytskyi A.K., Horbenko Y.Y., Aksimentyeva O.I.*

Ivan Franko National University of Lviv, [artem.zhytskyi@lnu.edu.ua](mailto:artem.zhytskyi@lnu.edu.ua)

Polypyrrole (PPy) is a widely studied conducting polymer due to its unique electrical properties, chemical stability, and ease of synthesis. Its potential applications span a variety of fields, including energy storage devices, sensors, and biomedical applications, making it a subject of significant interest in both academic and industrial research [1-3]. Electrochemical deposition of polypyrrole is a widely used method for creating conductive polymer films. In this process, pyrrole monomers is oxidized at the electrode surface, leading to polymerization and the formation of a polypyrrole coating. This technique allows for precise control over the thickness and morphology of the polymer layer by adjusting the applied potential and deposition time. MAX phase, namely  $\text{Ti}_2\text{AlC}$ , is a highly conductive material, known for its excellent electrical properties. It behaves as a metallic conductor due to its layered structure, where the strong Ti-C bonds contribute to its stiffness and the weaker Ti-Al bonds enable easy electron mobility. This combination gives  $\text{Ti}_2\text{AlC}$  the ability to conduct electricity efficiently while retaining good mechanical properties. [4, 5]

The aim of this work was to establish the conditions for the electrochemical deposition of electroactive polypyrrole-MAX phase composite films on the optically transparent semiconductor electrodes and study their optical properties.

Electrochemical deposition was performed with the MTechPGP-550M potentiostat in the three-electrode electrochemical cell under the cyclic voltammetry mode with a scanning speed of 50 mV/s in the potential range from  $-0.5$  V to  $1.0$  V over 3, 5, and 10 cycles. The saturated AgCl electrode was used as the reference electrode, a platinum wire as the auxiliary electrode, and an optically transparent glass plate covered with a conductive layer of  $\text{SnO}_2$  was used as a working electrode. The synthesis took place from a 0.1 M pyrrole solution in 0.1 M *p*-toluenesulfonic acid (TSA) in the presence of the  $\text{Ti}_2\text{AlC}$ . Obtained polymer films were washed with distilled water, and then dried at room temperature. It was found that  $\text{Ti}_2\text{AlC}$  addition to the monomer solution has changed the voltage–current characteristics of pyrrole electrooxidation (Fig. 1).

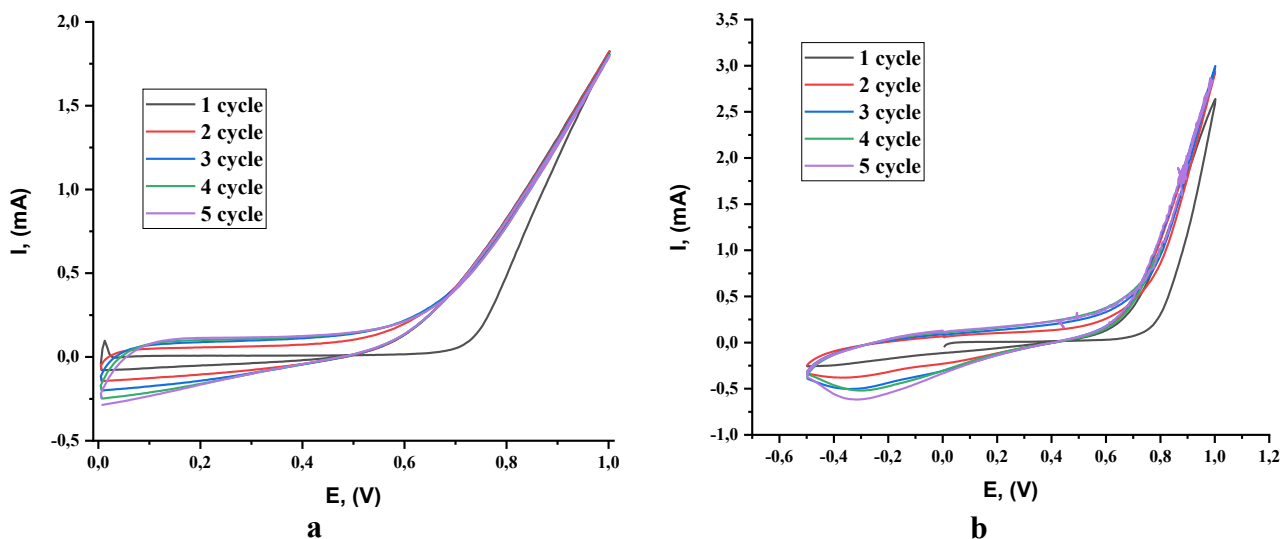


**Fig. 1.** CVAs obtained during the electrochemical polymerization of a 0.1 M pyrrole solution in the presence of 0.1 M TSA (a), with 5 wt.% MAX-phase (b) on  $\text{SnO}_2$ .  $v = 50$  mV/s.

The scanning electron microscopy (SEM) images of the surface of the PPy/MAX phase composites were analyzed, and the electron density distribution map was obtained. It was revealed a predominantly amorphous uniform structure with individual MAX granules distributed throughout

the entire surface area of the films. Elemental analysis confirmed  $\text{Ti}_2\text{AlC}$  incorporation into polypyrrole films during its electrochemical deposition.

Electrochemical activity for obtained polymer films was studied in the medium of 0,1 M TSA. The peak current increase was observed with the potential sweep rate increase. The logarithmic dependence of peak current ( $\lg I$ ) from potential sweep rate ( $\lg v$ ) indicates predominantly diffusion control of the process allowing the use of the model of semi-infinite diffusion and the Randles–Sevcik equation for determining the parameter of charge transport in conducting polymer films. Based on CVA, the values of effective diffusion coefficient of charge transport  $D_{\text{ef}}$  were calculated.

The optical properties of the films were studied using the Spectrometer 65 Inspector-105uv spectrophotometer in the wavelength range of 340–1100 nm. It was found that the incorporation of  $\text{Ti}_2\text{AlC}$  affects the optical absorption of PPy, resulting in an increased optical absorption across the entire range (Fig. 2). Additionally, the peak position at 380 nm for PPy is shifted to 480 nm for PPy/MAX phase composite film.

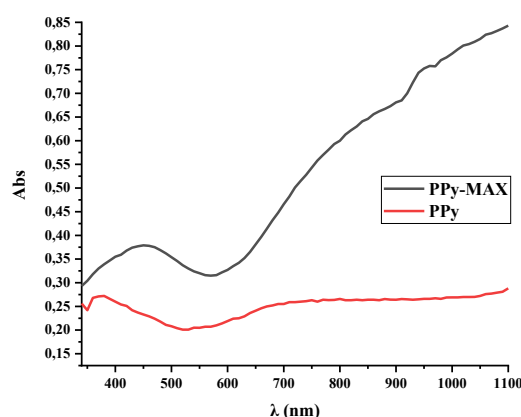


**Fig. 2.** Optical absorption spectrum of the PPy and PPy/MAX phase composite films on the  $\text{SnO}_2$ , obtained over 5 potential sweep cycles.

The obtained results can be applied to develop sensitive elements for various types of sensors.

1. George P. M., Lyckman An. W., Lavan D. A., Hegde A., Leung Y., Avasare R., Testa C., Aexander P. M., Langer R., Sur M. Fabrication and biocompatibility of polypyrrole implants suitable for neural prosthetics // *Biomaterials*. – 2005. – Vol. 26. – P. 3511–3519.
2. John J., Manoj M., Anilkumar K. M., Pradeep V. S., Jayalekshmi S. Lithium-enriched polypyrrole as a prospective cathode material for Li-ion cells // *Ionics* – 2018. – Vol. 24, Iss. 9. – P. 2565-2574.
3. Barbero C., Kötz R. Nanoscale dimensional changes and optical properties of polyaniline measured by in situ spectroscopic ellipsometry // *J. Electrochem. Soc.* – 1994. – Vol. 141. – P. 859–865.
4. Yuelei B., Xiaodong H., Rongguo W., Yue S., Chungheng Z., Shuai W., Guiqing C. High temperature physical and mechanical properties of large-scale  $\text{Ti}_2\text{AlC}$  bulk synthesized by self-propagating high temperature combustion synthesis with pseudo hot isostatic pressing // *J Eur Ceram Soc* – 2013. – Vol. 33, Iss. 13-14. – P. 2435-2445.
5. Lu S., Jian-Feng Z., Lian-Jun W., Wan J. SPS Fabrication, Microstructure and Electric Properties of  $\text{TiC}/\text{Ti}_2\text{AlC}/\text{Ti}_x\text{Al}_y$  in-situ Composites // *Inorg. Mater.* – 2009 – Vol. 24, Iss. 6. – P. 1168-1172.



## ВЛАСТИВОСТІ І ВИКОРИСТАННЯ ОКСИДНИХ НАНОМАТЕРІАЛІВ В ХІМІЧНИХ ДЖЕРЕЛАХ СТРУМУ

*Андреева О.Р.<sup>1</sup>, Коваленко І.В., Потаскалов В.А., Власенко Н.Є.*

<sup>1</sup>НТУ України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського",  
[dana\\_ecology@ukr.net](mailto:dana_ecology@ukr.net)

**Вступ.** Оксидні наноматеріали є важливим компонентом сучасної науки завдяки їх унікальним фізико-хімічним властивостям. Використання значно розширює можливості енергозберігаючих технологій, особливо в галузі хімічних джерел струму, таких як батареї, суперконденсатори, паливні елементи та сонячні батареї [1].

Наноматеріали на основі оксидів металів демонструють високу електрохімічну стабільність, питому площу поверхні та здатність до модифікації, що дозволяє адаптувати їх до різноманітних умов експлуатації [2]. Вивчення таких матеріалів відкриває нові перспективи для підвищення ефективності й довговічності хімічних джерел струму.

**Мета роботи.** Мета роботи полягає у вивченні властивостей оксидних наноматеріалів, таких як питома площа поверхні, електрохімічна стабільність, а також аналізі їх застосування в хімічних джерелах струму для підвищення ефективності та екологічної безпеки.

**Матеріали та методи.** Для аналізу структурних характеристик застосовувалися такі методи: рентгенівська дифракція (XRD), яка дозволяє визначати кристалічну структуру матеріалів; сканувальна електронна мікроскопія (SEM), що використовується для візуалізації нанорозмірних частинок та аналізу морфології поверхні [3].

**Результати та обговорення.** Оксидні наноматеріали демонструють широкий спектр властивостей, які вважаються перспективними для застосування в хімічних джерелах струму. Завдяки високій питомій площі поверхні, такі матеріали мають значно вищу реакційну здатність у порівнянні з мікрокристалічними аналогами, що забезпечує ефективний контакт з електролітом і поліпшує кінетику електрохімічних реакцій. Наприклад, наночастинки  $\text{TiO}_2$  (рис.1) успішно використовуються у фотокаталізі та сонячних батареях, де вони сприяють ефективному перетворенню енергії [1].

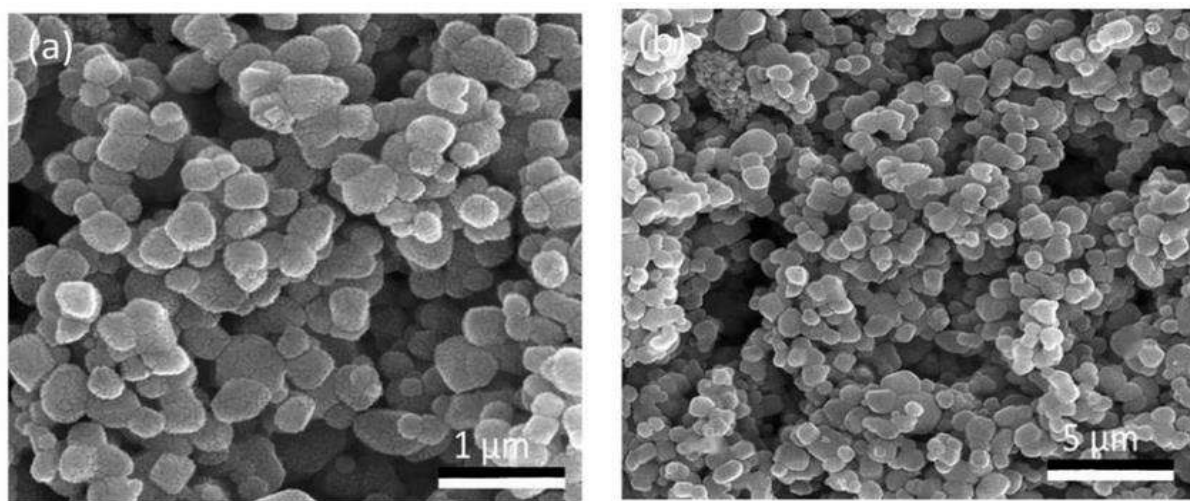


**Рис. 1.** Наночастинки  $\text{TiO}_2$  при (а) 1000× збільшенні, (б) 5000× збільшенні.

Значну увагу привертають оксиди цирконію ( $\text{ZrO}_2$ ), які використовуються як тверді електроліти у паливних елементах [4]. Їх висока іонна провідність у поєднанні з термостійкістю робить їх ключовим матеріалом для створення енергетичних систем, здатних працювати за екстремальних умов. Крім того, наноматеріали на основі  $\text{LiCoO}_2$  і  $\text{LiNiMnCoO}_2$  широко застосовуються як катодні матеріали в літій-іонних батареях, забезпечуючи високу щільність енергії та стабільність у тривалих циклах заряду [5]. Наноструктурний  $\text{TiO}_2$

використовується в анодах, демонструючи низьку напругу та швидку дифузію іонів літію, що сприяє підвищенню швидкості зарядки батарей.

Екологічний аспект також відіграє важливу роль у застосуванні оксидних наноматеріалів [5]. Їх використання дозволяє зменшити залежність від токсичних компонентів і підвищити ефективність перетворення енергії, що сприяє зменшенню викидів парникових газів. Крім того, такі матеріали можуть бути перероблені та повторно використані, що робить їх екологічно безпечними та економічно вигідними. Дослідження у цій сфері активно продовжуються, відкриваючи нові можливості для вдосконалення існуючих технологій і створення більш ефективних рішень для зберігання енергії.

**Висновки.** Оксидні наноматеріали є ключовими компонентами для підвищення ефективності та довговічності хімічних джерел струму. Їх унікальні властивості, такі як висока питома площа поверхні, електрохімічна стабільність і можливість модифікації, роблять їх перспективними для використання в сучасних енергетичних технологіях. Подальші дослідження в цій галузі сприятимуть створенню більш ефективних і екологічно безпечних пристроїв для зберігання енергії.

1. Dunn B., Kamath H., Tarascon J. Electrical Energy Storage for the Grid: A Battery of Choices // *Science*. – 2011. – vol. 334, №. 6058. – P. 928-935.

2. Simon P., Gogotsi Y. Materials for electrochemical capacitors // *Nature Materials*. – 2008. – vol. 7. – P. 845-854.

3. Manthiram A. A reflection on lithium-ion battery cathode chemistry // *Nature Communications*. – 2020. – vol. 11. – P.1550-1557.

4. Goodenough J. B. Energy storage materials: a perspective // *Energy Storage Materials*. – 2015. – vol. 1. – P. 158-161.

5. Bruce P. G., Scrosati B., Tarascon J. Nanomaterials for rechargeable lithium batteries // *Angewandte Chemie International Edition*. – 2008. – vol. 47, №. 16. – P. 2930-2946.

## СИНТЕЗ НАНОЧАСТИНОК МЕТАЛІВ НА ОСНОВІ РІСТ-СТИМУЛЮЮЧОЇ БАКТЕРІЇ *BACILLUS SUBTILIS* ТА ХАРАКТЕРИСТИКА ЇХ БАКТЕРИЦИДНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ

Борова М., Денисенко С., Бузіашвілі А., Ємець А.

ДУ «Інститут харчової біотехнології та геноміки НАН України»,

[marie0589@gmail.com](mailto:marie0589@gmail.com)

Наночастинки металів всебічно досліджуються в даний час, оскільки вони володіють специфічними електричними, хімічними, оптичними, каталітичними властивостями і виявляють антибактеріальну активність. Їх також можна успішно використовувати у боротьбі з бактеріальним ураженням рослин. Оскільки, розповсюджені хімічні бактерициди є шкідливими для людини та природної екосистеми, важливим питанням залишається розробка альтернативного методу боротьби з рослинними патогенами [1]. Мета даної роботи включала в себе «зелений» синтез наночастинок Ag та CuO за допомогою різних штамів *Bacillus subtilis* та оцінку їх антибактеріальної активності проти *R. solanacearum* та *S. michiganensis*, що викликають буру та кільцеву гниль картоплі.

Для «зеленого синтезу» наночастинок Ag та CuO використовували штами бактерій *B. subtilis* В-7099, UCM В-7445, *B. amyloliquefaciens* В-7101, які вирощували у середовищі LB протягом 3 діб при температурі 37°C та постійному обертанні зі швидкістю 120 об/хв до досягання оптичної щільності бактеріальної культури OD<sub>600</sub>=0.3. Далі бактеріальні клітини осаджували центрифугуванням при 10 000 об/хв протягом 10 хв. Для синтезу наночастинок використовували 25 мл супернатанту, який переносили у конічні колби та додавали розчин AgNO<sub>3</sub> до кінцевих концентрацій 1 мМ та 5 мМ, або розчин Cu(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>\*3H<sub>2</sub>O до кінцевих концентрацій 10 мМ та 20 мМ. У випадку НЧ Cu були підібрані дещо вищі концентрації

нітрату міді, оскільки саме вони виявились пороговими при формуванні наночастинок, за менших концентрацій формування наночастинок Cu у розчині не спостерігалось.

Для визначення антибактеріальної активності наночастинок срібла та міді використовували стандартний метод дифузії в агар [2]. Антибактеріальну активність оцінювали на цифрових фотографіях за допомогою програми ImageJ за діаметром зон затримки росту навколо дисків фільтрувального паперу з розчинами наночастинок.

У результаті було показано, що антибактеріальна активність наночастинок срібла, синтезованих за використання 1 мМ  $\text{AgNO}_3$ , була вищою, ніж наночастинок Ag, синтезованих на основі 5 мМ розчину  $\text{AgNO}_3$ . Діаметри зон затримки росту *C. michiganensis* в результаті впливу  $\text{AgHCl}$ , синтезованих на основі 1 мМ розчину  $\text{AgNO}_3$ , становили у середньому 18,45 мм, 16,78 мм, 15,75 мм. Діаметри зон затримки росту в результаті впливу  $\text{AgHCl}$  на основі 5 мМ  $\text{AgNO}_3$  були на рівні 15,87 мм, 12,9 мм, 18,49 мм відповідно. Для наночастинок міді було встановлено, що діаметр зон затримки росту *C. michiganensis* становив для наночастинок Cu на основі 10 мМ  $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$  – 8,52, 9,05 та 10,39 мм. Для наночастинок Cu на основі 20 мМ розчину  $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$  діаметр зон затримки росту становив – 7,79 мм, 10,69 мм, – 10,39 мм, тобто, антибактеріальна активність  $\text{CuHCl}$  на основі 10 та 20 мМ розчинів  $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$  та різних штамів *B. subtilis* та *B. amyloliquefaciens* загалом нижча, ніж  $\text{AgHCl}$  на основі 1 та 5 мМ  $\text{AgNO}_3$ . Таким чином, у даній роботі показана можливість успішного синтезу наночастинок Ag та CuO за використання супернатантів бактерії *B. subtilis* та перспективність наночастинок металів у захисті рослин родини *Solanaceae* від фітопатогенів.

1. Ibrahim E, Fouad H, Zhang M, Zhang Y, Qiu W, Yan C, Li B, Mo J, Chen J. Biosynthesis of silver nanoparticles using endophytic bacteria and their role in inhibition of rice pathogenic bacteria and plant growth promotion // *RSC Adv.* – 2019, № 9. – P. 29293-299

2. Guerrero Correa M, Martínez FB, Vidal CP, Streitt C, Escrig J, de Dicastillo CL. Antimicrobial metal-based nanoparticles: a review on their synthesis, types and antimicrobial action // *Beilstein J Nanotechnol.* - 2020 - Sep 25;11:1450-1469.

## ПОЛЕМ ЖНИВ КВАНТОВОЇ ХІМІЇ СТАЄ ПЕРІОДИЧНА ТАБЛИЦЯ ЕЛЕМЕНТІВ

Віленський В.О.<sup>1</sup>, Віленська Л.М.

<sup>1</sup>Житомирський державний університет ім. Івана Франка, [vilensky@zu.edu.ua](mailto:vilensky@zu.edu.ua)

Ці результати в певній мірі могли б мати інших авторів, якби відкриття у 1927 р Вальтера Гайтлера та Фріца В. Лондона, про те, що нейтральні атоми, на зразок Гідрогену, притягуються (attracted) один до одного з силою, що може бути порівнянна з кулонівською. Залучаючи принцип Паулі до нейтральних атомів, на зразок відомої структури атому Гідрогену свої результати автори опублікували 30.06.1927 року, і саме ця дата вважається днем народження квантової хімії. Треба звернути увагу, що обрано, як зразок, Гідроген, не Карбон чи Кальцій. Може тоді вже тоді квантова хімія почала б заглиблюватись у матеріалознавство, яке запропоновано квантовій хімії нами 01.04.2024. Але наука розвивається за треком накопичення знань і не лише з квантової хімії, але й з цивілізаційного сприйняття загрози, яка насувається на неї від синтетичних матеріалів. Але пройшло майже століття, ми всі дивились на періодичну таблицю елементів як на ікону, але в 2024 році ми відкрили, що всі, всі, всі атоми володіють властивістю *ATTRACTION*, і одиницю енергії притягнення ми назвали 'trac', а її носієм є ГІДРОГЕН, а сама енергія притягнення суттєво більша за кулонівську, оскільки природа її зовсім інша, як про це сказано в пропонованій роботі за результатами наших досліджень.

1 травня 2024 на відкритті всеукраїнської наукової конференції «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи» нами була представлена доповідь [1] «Полігетероеlementні сполуки: нове покоління полімерів» і перші моделі сполук [2],

створені і досліджені нами, а саме сполуки, у складі в яких присутні елементи періодичної таблиці, які раніше навіть і не розглядались для можливого використання. На Рис.1 представлено сполуку структури X-I у 2D вимірі.

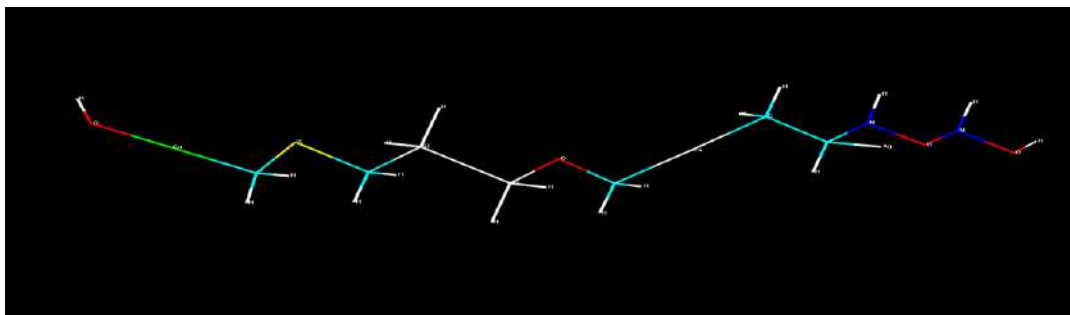


**Рис. 1.** Структура сполук X-I у 2D вимірі  
(утворюють 35 елементів від H, Ag, C, Ca, S, Si, Cu, до O періодичної таблиці).

В якості практичної привабливості *нового напрямку матеріалознавства* було вирішено представити результати модифікації добре відомого і найбільш забруднюючого доквілля полімеру-поліетилену (ПЕ), а в даному разі, це його олігомерний фрагмент ОЕ-539 (539-число атомів в даному фрагменті) ланцюгу.

На рис. 2 приведені результати ММ+ досліджень зразків з вмістом атомів *He*: 0, 6, 10, 14, 18, 22. Результати свідчать про відсутність несумісності між матричною вуглеводневою сполукою і зростаючою фазою *He*. Одна з перших систем, які ми дослідили, згадувалась на початку тексту [3], це поліетилену, поширеність якого в нашому житті не піддається обговоренню.

З метою отримання коректних результатів дослідження впливу атомів гелію, інвазійно введених до вуглеводневого ланцюгу замість атомів водню, обирали симетрично-послідовний метод заміщення на початковому етапі з кінцевих груп через 20, 50. Таким чином, була збережена послідовність конфігураційних змін структур з ОЕ-539, з яких були отримані композиції: ОЕ-539+6He, ОЕ-539+10He, ОЕ-539+14He, ОЕ-539+18He та ОЕ-539+22He.

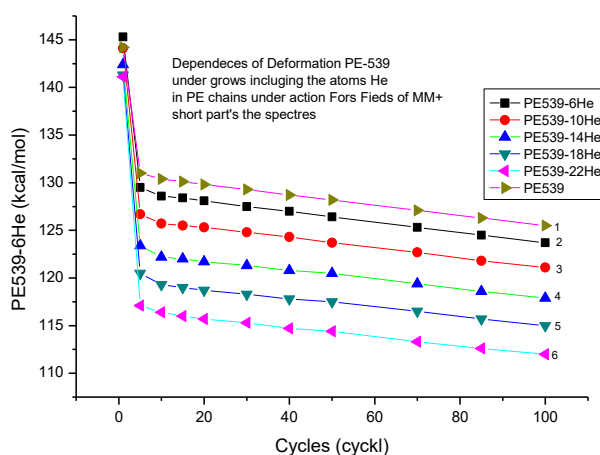


**Рис. 2.** Залежність деформації зразка ОЕ-539 від кількості атомів *He* в ланцюгу і часу дії силового поля (початкова частина спектру).

На теперішній час 18-а група Елементів ПТ від He, Ne і до Rn має назву Благородних (Noble Gasses), інколи до якої додають Og (Oganesson), який є нестабільним і розпадається

на невизначені складові, і тому не був включений до даного дослідження. Всі перші сім одноатомних елементів характеризуються як такі, що мають дуже низьку хімічну реактивність.

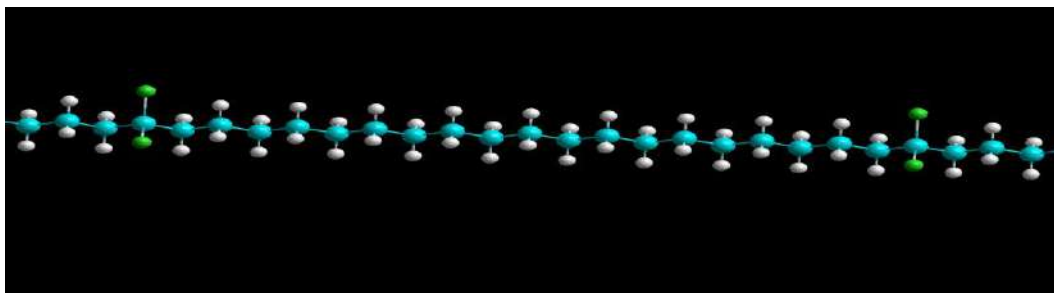


**Рис. 3.** 3D модель OE-539+nHe  
(атоми He, які виступають над ланцюгом завдяки більшій довжині зв'язку C–He).

На рисунках представлена “модель X-XIV,” основними елементами якої є непридатні до залучення не лише в полімерній хімії, а загалом в хімічній технології. Немає необхідності доводити, що створена нами модель сполуки є унікальною саме через всі складові XIV моделі. Головним тут є не недоліки атомів ПТЕ чи нездатність на теперішній час бути використаними сучасними хімічними технологіями, а просто це доказ, що всі елементи ПТЕ. На рис.4 3D моделі сполуки, в якій поєднані благородні гази і не менше невживані циклічні сполуки: 1,4 пара-вуглеводні 2-3F; 5-6F. Сполуку завершують SiH<sub>3</sub> радикали.

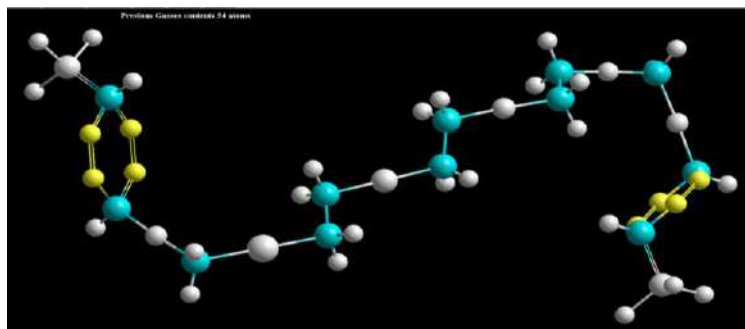


**Рис. 4.** 3D модель сполуки.

Властивості, оптимізації структури X-XIV методом хвильової механіки (ММ+). На рис.5 представлено результати оптимізації Miracal models' XIV алгоритмом ММ+ динаміки MD в діапазоні 52-272K.

Ця частина відкриття є принципово важливою тому що відповідно до назви першої статті даного напрямку [4] та завдання сформульованого в нашій доповіді на конференції ми доводимо що періодична таблиця елементів може бути доступною для квантового синтезу вже сьогодні. Створення нових матеріальних сполук і дослідження їх властивостей навіть за участю найвіддалених елементів періодичної таблиці це можливість сьогодення. Треба вже сьогодні думати про технічні можливості і елементи технологічного циклу, зрозуміло не на планеті Земля. Теперішні результати вказують, що для квантового синтезу вже на тепер немає обмежень.



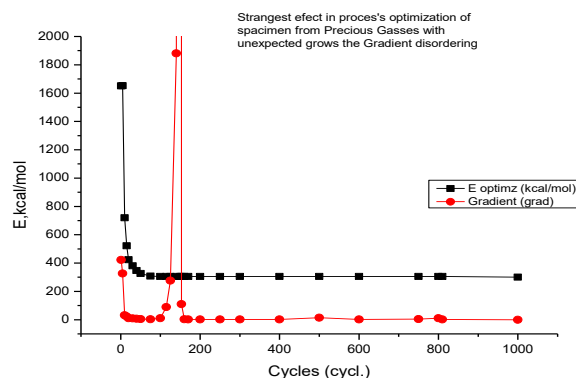


**Рис. 5.** Результати оптимізації Miracal models' XIV.

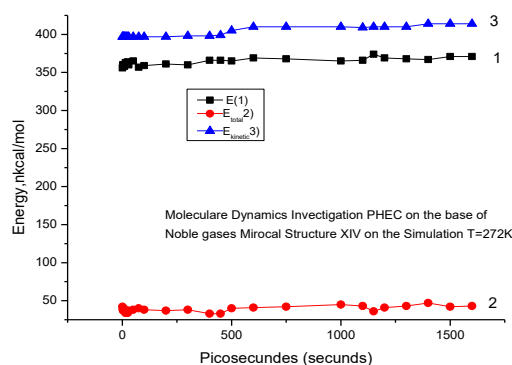


**Рис. 6.** Структура XIV після впливу T=272K.

Для даної частини дослідження обрані Nobelium (#102) and Lawrencium (#103) elements and as matrix was created by a Quantum synthesis the Oligooxiethene -317. Вплив складу сполук на їх основні фізичні характеристики сполук наведено в Таблиці 1.

Формування конфігурації ланцюгів похідних Олігооксіетен (ООЕ) дозволило встановити, що при інвазійному заміщенні близьких за величиною атракцій, як то елементи Lr та No проявляють здатність до атракції загалом трьох різних елементів без жодних зовнішніх примусових (хімічних чи фізичних і навіть фізико-хімічних ) впливів відносно складових.

**Таблиця.**

Вплив складу композицій на основні фізичні характеристики Олігогетероелементних сполук та особливості конфігурації їх ланцюгів.

| Назва                      | Number atoms | Molec. Mass, amu | Volume, Å <sup>3</sup> | Surface, Å <sup>2</sup> |
|----------------------------|--------------|------------------|------------------------|-------------------------|
| Oligooxiethene             | 317          | 1969.41          | 6696.4                 | 1240x10 <sup>8</sup>    |
| No-Oligooxiethene-Lr       | 317          | 2450.0           | 6865.8                 | 1028x10 <sup>9</sup>    |
| No-Lr-Oligooxiethene-No-Lr | 317          | 2927.4           | 7169.6                 | 2549x10 <sup>10</sup>   |
| No-Lr-Oligooxiethene-No-No | 317          | 2930.0           | 7013.3                 | 2567x10 <sup>10</sup>   |

І друга властивість, що в парах елементів, як в структурі сполук даного разу допускається заміна  $A \rightarrow B$  на обернену  $B \leftrightarrow A$  і на  $B \leftrightarrow B'$ , як це показано в дослідженні впливу зміни конфігурації ланцюгу Олігоетену шляхом інвазії елементів No та Lr відповідно до табл.. Результати отримані методом MM+ ( рис.7).

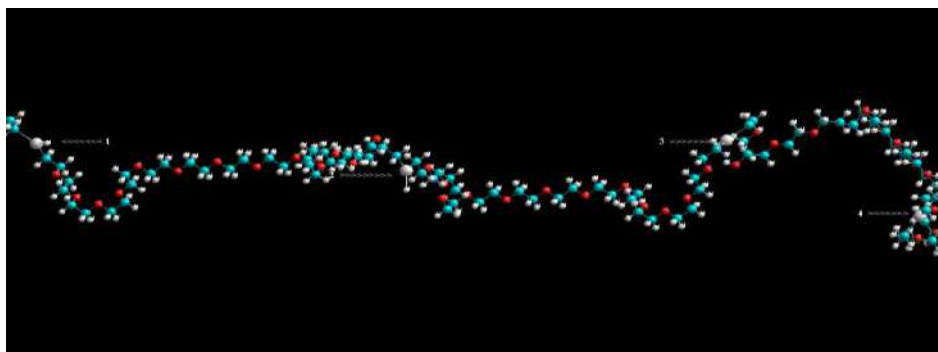


**Рис.7.** 3D модель Олігоетену-317: N число атомів-317; MM=1969 amu; V=6075Å<sup>3</sup>; Surface Area=3960Å<sup>2</sup>; Polarizebility=193.3 (для вивчення впливу конфігурації чотирьох важких атомів та їх положення в ланцюгу позначають стрілки).



Ідея використати важкі елементи No та Lr мала на меті оцінити далекодію впливу енергії attractions, яку утворюють десятки електронів, що обертаються довкола позитивно заряджених протонів ядер, атомів гігантів-притягіння. І саме ця унікальна властивість attraction всіх елементів періодичної таблиці дозволяє, за нашими очікуваннями, відійти від хімії, забруднюючої нашу планету до чистої хімії, в якій *attraction property* будуть використані на створення матеріальних сполук, в яких будуть присутні елементи від Гелію ,як приклад, до No та Lr, які зможуть бути модераторами нових властивостей невідомих матеріалів 21-го сторіччя.

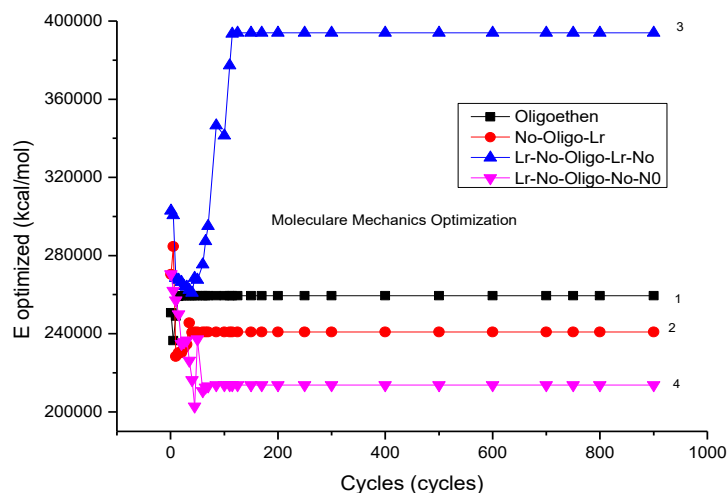


**Рис. 8.** Результати вивчення положення важких No та Lr, їх конфігурація та комбінація в ланцюгу Олігооксіетену-317.

Для вирішення цього завдання відповідно до табл.1 на базі олігооксіетену були створені три моделі. Коротко про особливості конфігурації їх ланцюгів: модель I: кінцеві атоми O перший і останній були інвазійно замінені на No та Lr; Модель II: 15-і атоми O на обох кінцях замінені атомами антагоністами: No протистояв Lr,  $Lr \leftrightarrow No$ . Очікувалась синергія впливу від парної взаємодії; Модель III, як видно з табл. на одному кінці збережена конфігурація взаємодії атомів-антагоністів. На другому була створена пара  $Lr < > Lr$  не взаємодії, а зачиненості і відштовхування.

Треба визнати, що результати заслуговують на використання навіть в теперішній час як метод, коли протилежно заряджені магнітні частки здатні забезпечити синергічні результати в квантових синтезах.

Вивчення еластичних властивостей моделей (табл.1) підтверджують важливість залучення важких елементів для квантового синтезу та відкривають можливості створення нових матеріалів, як це представлено на рис. 9.

В даному разі завданням авторів було визначити можливість досліджувати системи ланцюга, елементи якого здатні змінювати форму в умовах впливу хвильової механіки і необхідності мати сполуку (середовище), яке може щільно, без фазорозділення складових заповнити об'єм. Саме такою є модель X-100. Як можна бачити, до складу моделі X-100, окрім раніше використаних елементів ПТ Br, Cl, I, S, Ca, F та інших елементів Таблиці, які раніше не згадувались, бо було відомо, що вони не реакційнопридатні. В наступних дослідженнях це буде відкинуто, як застаріле сприйняття ПТЕ. Це підтверджено результатами дослідження, яке розглядається в даному розділі, який підтверджує певність авторів в тому, що недієздатних елементів в періодичній таблиці не існує. 3D тривимірна модель X-100 виключно складається з газопазних та рідких сполук (рис.10).

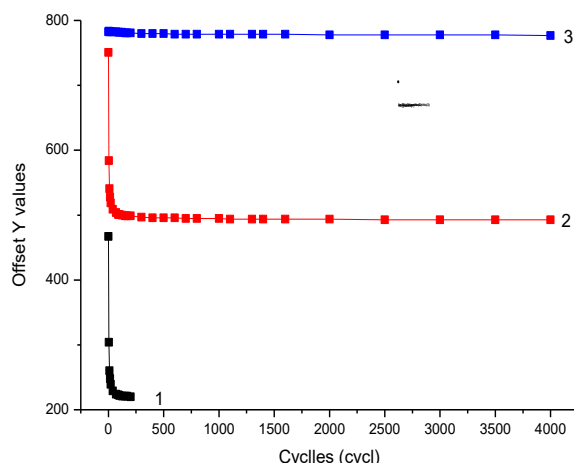


**Рис.9.** Від термопластів (1) через еластomers (2) до пластикатів (3) і все це лише методом інвазії замість кисню  $\text{No} \leftrightarrow \text{Lr}$  (2) або  $\text{No-Lr} \leftrightarrow \text{No-Lr}$ .

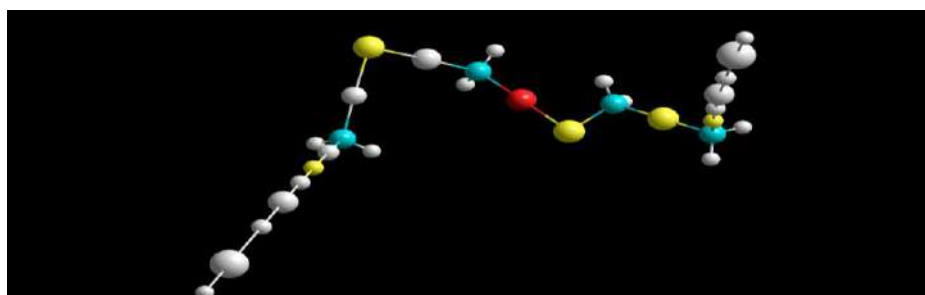


**Рис.10.** 3D тривимірна модель X-100 виключно складається з газозафазних та рідких сполук.

Досліджувалась методом MM+ (Рис.11) та проведені попередні дослідження методом MD. Фізичні характеристики структури :  $E_{\text{total}}=0,824\text{kcal/mol}$ ;  $D_{\mu}=0$  QSAR:  $\text{MM}=821.5\text{amu}$ ;  $36.6\text{\AA}^3$ ;  $\text{Surface}=1122.9\text{\AA}^2$ ;  $\text{Polarized}=40.2$ .

Загалом крива оптимізації структури X-100 (рис. 11) свідчить про її еластичні властивості, які характерні для експоненціальних кривих, це по-перше. Присутність трьох перегинів на експоненціальній функції є прямим доказом існування трьох фаз у складі цієї сполуки [5]. Останні дослідження температурно-динамічних властивостей X-100 свідчать, що гетероелементні зв'язки моделі X-100 зберігають цілісність ланцюгу в температурному інтервалі: 57K-270K.

Відкриття Володимира Віленського і Людмили Віленської представлено вище показало, що залучення елементів періодичної таблиці, яких на теперішній час 118, і це відкриває суттєво більші можливості людству, ніж пропонує штучний інтелект AI. І це легко довести! Якщо прийняти, що з загального числа у 118 елементів достатньо 4-х для створення нового матеріалу [5], то методом переміщень зі 118 незалежних елементів отримаємо:  $N = \frac{(118 \times 117 \times 116 \times 115 \times \dots \times 4 \times 3 \times 2 \times 1)}{24} = 249.950.785.371.840 / 24 = 12.289.616.057.160$  {12 трильйонів, 289 мільярдів 616 мільйонів 57 тисяч 160 сполук! І це не межа, відомо, що практично всім хімічним сполукам притамано мати ізомери число, змінюється в межах від 2-6, то кількість сполук які можна отримати загалом складає астрономічну величину! Такі перспективи для цивілізації людей відкриває дане відкриття, але для втілення його в технологічний процес нашої цивілізації необхідні умови Місяця або Марса і люди на зразок Ілона Маска, Джефа Безоса, Марка Цукерберга та Білла Гейтса, які давно пропонують

винести за межі Землі всі технологічні процеси, які сприяють кліматичній катастрофі нашої планети.

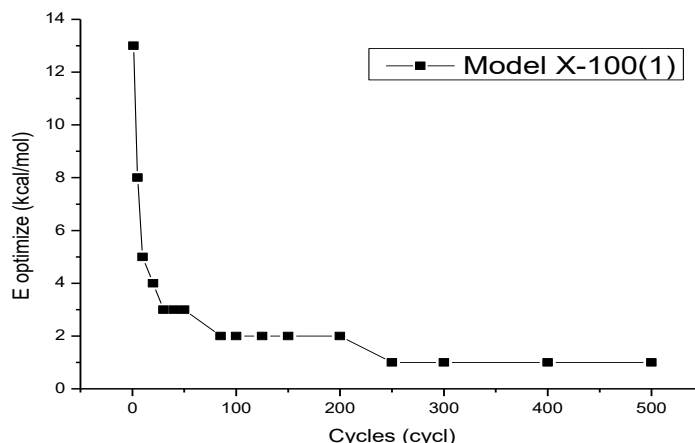


**Рис. 11.** Крива оптимізації структури X-100.

1.Vilensky V.O., Vilenska L.M. Discovery “Using Periodic Table for creating Polyheteroelemental compounds and other miracle structures”.

2. HyperChem<sup>TM</sup> Release 8.0.7 for Windows. Copy Right 1995-2009 Hypercube Inc.

3. Vilensky V. Warnings Regarding the Development of Scientific, Technical And Technological Processes Involving Synthetic Polymers, Which the Chemist Addresses To Colleagues. ‘III International Scientific and Practical Conference’. \_ January 12-14, 2023 Toronto. - 156-162.

4.Kravchenko D., Martsenuk O., Kozhukhova M., Vilensky V. Trends in The Application of Polymers. Historical Stages of High Molecular Compounds And Prospects Of Their Synthesis In The 21st Century //VII Actually, Problems of Chemistry: Research and Prospects' V All-Ukrainian Scientific Conference Zhytomyr-2023. - Conference Proceedings. - pp. 182-183

5.Vilensky Volodymyr Полімери: Синтез, Модифікація, Дослідження. Монографія. Видавництво: ЛІРА. - К. 2024.

## **ЗМЕНШЕННЯ ФАНТОМНИХ ВІДМОВ ЕЛЕКТРОТЕХНІЧНИХ ПРИСТРОЇВ ЗА РАХУНОК КОНТРОЛЮ ЗАЛИШКІВ ПОЛІМЕР-НЕОРГАНІЧНИХ КОМПОЗИЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ З ЕЛЕКТРОННОЮ ПРОВІДНІСТЮ**

*Володимиров В.В.*

Український Державний Університет Науки і Технології

ННІ «Український державний хіміко-технологічний університет», [vasilisk826@gmail.com](mailto:vasilisk826@gmail.com)

У сучасних умовах складання електронних вузлів на друкованих платах, із застосуванням поверхневого монтажу, виконується в переважній більшості випадків за рахунок паяльних з'єднань компонентів, що забезпечує електричне та механічне з'єднання компонентів на таких платах. Для видалення оксидів з поверхні матеріалів що паяють, зниження поверхневого натягу розплавленого припою та полегшення його розтікання використовуються паяльні флюси, за рахунок застосування яких забезпечується необхідна якість та надійність паяльних з'єднань.

З розвитком технологій і прагненням зробити виробництво більш екологічним, скоротити виробничі витрати, а також мінімізувати час необхідний на виробництво

продукції, все частіше починають використовувати безвідмивні (які не потребують подальшої очистки) флюси (по clean flux -NCF). На відміну від традиційних флюсів, що вимагають обов'язкового відмивання після паяння, безвідмивні флюси повинні забезпечувати надійне паяне з'єднання, не залишаючи при цьому корозійно-активних або електропровідних залишків, які могли б негативно вплинути на працездатність та надійність електронного пристрою. Флюси є композитними матеріалами з різними проявами своїх властивостей на різних температурних етапах процесу паяння. В основному флюси входять до складу так званих паяльних паст, де поряд з флюсом присутній дрібно гранульований припій, розмір гранул якого залежить від розміру компонентів, що монтуються на друковану плату. Поряд з цілим рядом незаперечних переваг, завдяки яким сфера його застосування з року в рік стає все більше, NCF мають певні недоліки, до яких можна віднести наявність паразитної провідності (при недотриманні термопрофілів паяння рекомендованих виробником), а також підвищеної вологості як на етапі виробництва так і подальшої експлуатації.

Так само збільшення кількості проблем, пов'язаних з надійністю в процесах збирання електроніки за останні десятиліття відбулося через використання більш дрібних компонентів з дрібним кроком контактів, більшої кількості паяних з'єднань у заданій області, впровадження законодавства WEEE / ROHS, яке призвело до використання безсвинцевих припоїв з вищими температурами оплавлення та гіршою змочуваністю [1].

Складання за технологією поверхневого монтажу (Surface Mount Technology-SMT) часто стикається із проблемою залишків на контактних майданчиках внутрішньосхемного тестування. Ці залишки, як наприклад непровідні залишки паяльних флюсів, можуть потрапляти на контактні виводи друкованої плати зроблені для внутрішньосхемного тестування, наприклад за рахунок розбризкування при прагненні скоротити час паяння і як наслідок збільшенні швидкості набору температури, так само цьому може сприяти неправильне дозування паяльних паст, коли флюс пасти в процесі нагрівання не залишається в місці паяльного з'єднання, а розтікається за його межі.. Також деякі проблеми у виробництві електронних збірок можуть бути викликані забрудненням або ненавмисними домішками [2].

Ці залишки часто мають непровідний характер, і тому внутрісхемний тест може промаркірувати протестований продукт як той що не пройшов перевірку, хоча він би працював нормально. Оскільки така продукція вважається такою, що не пройшла вихідний контроль, її подальше відвантаження замовнику неможливе, це автоматично знижує якість виробництва, збільшує витрати і як наслідок собівартість продукції.

Вирішення цієї проблеми носить комплексний характер. Починаючи з підтримки необхідного рівня чистоти виробничої лінії для відсутності залишків сторонніх рідин на друкованій платі, наприклад, крапель мастила від машин встановлених на конвеєрі. І закінчуючи правильним налаштуванням дозування подачі паяльних матеріалів та підтримці, рекомендованих виробником, термопрофілів пайки та загальної температури виробничих приміщень.

1. Géczy A., Investigating heat transfer coefficient differences on printed circuit boards during vapour phase reflow soldering // *Int. J. Heat Mass Transf.* - 2017. – 109. - 167–174.

2. James J. Licari Manufacturing Technology // *Coating Materials for Electronic Applications Polymers, Processes, Reliability, Testing Materials and Processes for Electronic Applications.* - 2003. - P. 201-277.

## КОРОЗІЙНА ТРИВКІСТЬ КОБАЛЬТОВИХ АМОРФНИХ СПЛАВІВ У ЛУЖНОМУ РОЗЧИНІ

*Герцик О.М.<sup>1</sup>, Слободний В.А.<sup>1</sup>, Чала Д.Ю.<sup>1</sup>, Пандяк Н.Л.<sup>2</sup>, Ташак М.С.<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>Львівський національний університет імені Івана Франка, [o\\_hertsyk@yahoo.com](mailto:o_hertsyk@yahoo.com)

<sup>2</sup>Національний лісотехнічний університет України

<sup>3</sup>Національний університет «Львівська політехніка»

Аморфні металеві сплави (АМС) на основі кобальту є дуже цінними матеріалами з особливими магнітними, корозійними та хімічними властивостями, що визначає розширення їх застосування, зокрема, як каталізаторів.

Фізико-хімічні властивості аморфних сплавів визначаються природою основного металу, композицією легуючих додатків та вмістом кристалічної фази. Тому цікавим та актуальним є дослідження впливу легуючих додатків в кобальтових аморфних сплавах на формування поверхневих оксидних шарів.

Можливості використання аморфних металевих сплавів в реакціях виділення водню, зумовлює необхідність визначення їхньої корозійної тривкості в лужних розчинах, зокрема, 1,0 М водному розчині КОН. Відомо [1-4], що більшість легованих АМС мають високу корозійну тривкість, яка зумовлена особливостями структури та елементного складу таких матеріалів.

Дослідження корозійної тривкості стрічкових аморфних сплавів  $\text{Co}_{72,0}\text{Cr}_{5,0}\text{Si}_{11,0}\text{B}_{12,0}$ ,  $\text{Co}_{72,0}\text{Fe}_{5,0}\text{Si}_{11,0}\text{B}_{12,0}$  та  $\text{Co}_{70}\text{Fe}_{2,5}\text{Cr}_{4,5}\text{Si}_{11}\text{B}_{12}$  у 1,0 М водному розчині КОН методом циклічної вольтамперометрії показало вищу тривкість сплаву з додатками хрому  $\text{Co}_{70}\text{Fe}_{2,5}\text{Cr}_{4,5}\text{Si}_{11}\text{B}_{12}$ . У випадку цього сплаву простежуються додатніші значення потенціалів корозії та нижчі значення струмів корозії.

Для оцінки механізму корозії кобальтових аморфних сплавів вперше проведено електрохімічні дослідження  $\text{Co}_{70}\text{Fe}_{2,5}\text{Cr}_{4,5}\text{Si}_{11}\text{B}_{12}$  у 1,0 М водному розчині КОН за різних (10÷100) мВ/с швидкостей розгортки потенціалу. В умовах контакту з агресивним лужним середовищем потенціали корозії  $\text{Co}_{70}\text{Fe}_{2,5}\text{Cr}_{4,5}\text{Si}_{11}\text{B}_{12}$  зсуваються в катодну сторону, а струми корозії за нижчих швидкостей змінюються незначно, а за вищих (70 та 100 мВ/с) – знижуються.

Після витримання у лужному розчині морфологія поверхні  $\text{Co}_{70}\text{Fe}_{2,5}\text{Cr}_{4,5}\text{Si}_{11}\text{B}_{12}$  та елементний склад дещо змінюється, зокрема, зменшується кількість Со та Fe.

*Подані результати досліджень отримано за фінансової підтримки Міністерства освіти і науки України (держбюджетна тема: 0123U101830 “Нанокристалізація аморфних сплавів на основі кобальту: кінетика, властивості, застосування”).*

*This work was partly supported by the Simons Foundation (Award Number: PD-Ukraine-00014574).*

1. Герцик О., Лопачак М., Ковбуз М., Слободний В., Кордан В., Пандяк Н. Вплив термообробки на електрохімічні властивості кобальтових аморфних сплавів // *Вісник Львівського університету. Серія хімічна*. – 2024. – Вип. 65. – С. 318-325.

2. Герцик О.М., Єзерська О.А., Носенко В.К., Гавриляк Н.М., Пандяк Н.Л. Електрохімічні параметри кобальтових аморфних сплавів у агресивних середовищах різної природи // *Фізико-хімічна механіка матеріалів*. – 2024. – Т. 60, №4. – С. 108-114.

3. Mariia Lopachak, Lidiya Boichyshyn, Physico-chemical properties of amorphous cobalt-based alloys: A review // *Proc. Shevchenko Sci. Soc. Chem. Sci.* - 2023. - Vol. LXXIII. - P. 26–37.

4. Герцик О.М., Гула Т.Г., Єзерська О.А. та ін. Вплив складу аморфних сплавів на їх корозійну тривкість у агресивних середовищах різної природи // *Фізико-хімічна механіка матеріалів*. – 2023. - №5. - С. 32-38.

## РАДІОПОГЛИНАЮЧІ МАТЕРІАЛИ З ГІБРИДНИМИ ВУГЛЕЦЬВМІСНИМИ І ФЕРИТОВИМИ НАПОВНЮВАЧАМИ

*Горбик П.П., Дубровін І.В., Прокопенко С.Л.*

Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, [dilyua@gmail.com](mailto:dilyua@gmail.com)

Розвиток та збільшення потужності пристроїв НВЧ-радіоелектроніки призводять до того, що електромагнітне випромінювання створює значні перешкоди радіоелектронної апаратурі та супутникового зв'язку. Вплив електромагнітного випромінювання (ЕМВ) різної природи на технічні та біологічні об'єкти є суттєвим фактором, що впливає на їх функціонування.

Радіопоглинаючі матеріали (РПМ) використовуються в основному у військовій промисловості, саме вони застосовуються у технології Стелс. У наш час є три типа радіопоглинаючих матеріалів: нерезонансні об'ємні, резонансні та нерезонансні магнітні. Проте військовій сфера це не єдине їх використання і область застосування таких матеріалів досить велика. РПМ використовують у лікарнях для екранування кабінетів з чутливими діагностичними чи лікувальними приладами, а також для вікон там, де споруди знаходяться поблизу потужних антен або інших передавальних пристроїв [1, 2].

Розробка нових високоефективних ширококутових радіопоглинаючих матеріалів стає дуже актуальною для вирішення проблеми зменшення перешкод та електромагнітної сумісності пристроїв. При розробці поглиначів електромагнітних хвиль використовуються різні матеріали, які поглинають електромагнітне випромінювання у певному діапазоні частот. Здатність матеріалів поглинати електромагнітне випромінювання визначається їх електричними та магнітними властивостями, до яких відносяться питома електропровідність, діелектрична та магнітна проникність, тобто від його складу і структури. Не існує універсального поглинаючого матеріалу, який можна використовувати для поглинання випромінювання у всьому частотному діапазоні. Найчастіше основу РПМ складають полімерні або неорганічні речовини, в яких як активні поглинаючі компоненти вводять порошки вуглецю, металів, карбіди, ферити, нанорозмірні частинки різного складу, волокна і ін. Більшість РПМ використовуються як радіопоглинаючі покриття (РПП). До РПМ, які збільшують радіопоглинальну здатність і знижують ефективну поверхню розсіювання об'єкта відносяться немагнітні (градієнтні, інтерференційні, комбіновані) і магнітні (феритові) матеріали. Градієнтні РПМ мають багатшарову структуру з плавною або ступінчастою зміною комплексної діелектричної і магнітної проникностей за товщиною матеріалу. Це призводить до збільшення радіопоглинальної здатності поверхні за рахунок електричних і магнітних втрат, що збільшуються від шару до шару. Інтерференційні РПМ підвищують радіопоглинальну здатність і знижують ефективну поверхню розсіювання за рахунок часткової нейтралізації відбитого від поверхні випромінювання, частина якого пройшла крізь матеріал. Як правило, інтерференційні РПП складаються з багатшарових структур, що включають і діелектрики (пластмаса, каучук та ін.), та електропровідні матеріали. Комбіновані РПП поєднують в собі градієнтні та інтерференційні РПП. В порівнянні з градієнтними та інтерференційними РПП, комбіновані РПП поєднують високий ступінь послаблення енергії радіохвиль з широким діапазоном частот, в якому відбувається це послаблення [3-6].

Метою даної роботи було розробка композиційних матеріалів на основі лакофарбового та полімер-неорганічного в'язучого з наповнювачами з феритових та вуглецевмісних матеріалів і вивчення їх властивостей для використання як РПМ в НВЧ діапазоні.

Для виготовлення РПМ ми використовували комерційну фарбу - алкідну емаль ПФ-115П зеленого кольору з підвищеною атмосферостійкістю (Farbex, Super enamel Premium), доступні вуглецеві наповнювачі: терморозширений графіт (ТРГ); піролітичний вуглець від переробки шин; вуглецеві нанотрубки (ВНТ); вуглецеві волокна довжиною 5 – 7 мм (ВВ) та спеціально синтезований нами магнетит, який одержували по методиці, що наведено у [7]. Було синтезовано нанорозмірний магнетит з середнім розміром частинок  $50 \div 60$  нм. Для



одержання полімер-неорганічних матриць з високими огнестійкістю і механічної порочністю використовували інертні матеріали - глиноземистий цемент (ГЦ), перліт, Na-сіль карбоксиметилцелюлози (марки ВД Китай, КМЦ) і поліізоціанат (ПІЦ, IsoPMDI92140, "Elastogran", Німеччина). Після змішування води, цементу, поліізоціанату і водного розчину КМЦ з концентрацією 3 г/дм<sup>3</sup> додавали функціональний наповнювач, перліт і залишали зразок до повного отвердіння.

Для дослідження властивостей зразків в надвисокочастотному (НВЧ) діапазоні 8–15 ГГц використовували інтерферометр на основі вимірювача різниці фаз РФК 2–18 та вимірювач коефіцієнта стоячих хвиль і послаблення Р 2–60 безелектродним методом. Радіопоглинаючі властивості зразків вивчали після висихання фарби (для цих же зразків було використано шар алюмінієвої фольги, на який наносили шар фарби з наповнювачами) або на зразках зі сформованим полімер-неорганічним в'язучим.

На рис.1а наведено фотографії зразків на лакофарбовому і полімер-неорганічному в'язучих, з яких видно, що поверхня РМП на лакофарбовому в'язучем має вигляд звичайного лакофарбового покриття.

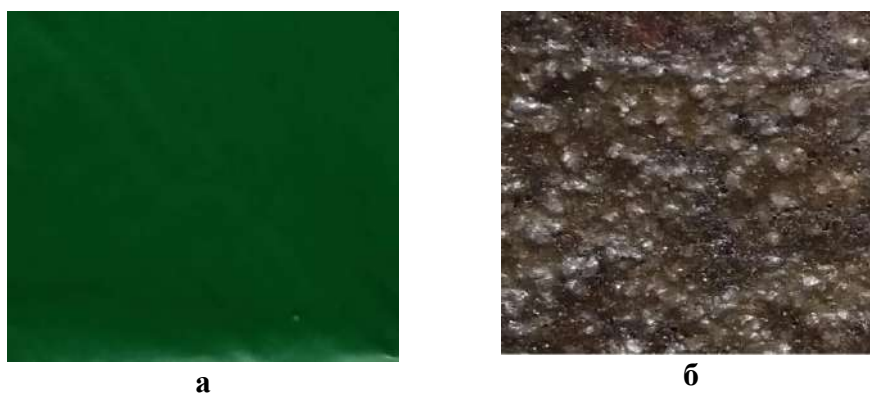


**Рис. 1.** Фотографії зразків РМП на лакофарбовому (а) і полімер-неорганічним з перлітом (б) в'язучих.

Такий вигляд мають всі зразки РПМ, які ми одержали незалежно від вмісту і типу функціонального наповнювача. Зразки РПМ на полімер-неорганічному в'язучому мають рівну темно-коричневу поверхню. Додавання перліту призводить до появи на поверхні виступаючих з об'єму зразка його частинок. По зовнішньому вигляду зразки не залежать від типу і концентрації функціонального наповнювача (рис. 1б). Склад і властивості одержаних зразків РПМ наведено у таблицях 1, 2.

**Таблиця 1**

Склад і властивості одержаних РПМ з в'язучим із фарби ПФ-115П на частоті 9 ГГц

| №№<br>п/р | Склад                                                                                                                       | Поглинання ЕМВ, R, dB |                   |                  |                             |
|-----------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|-------------------|------------------|-----------------------------|
|           |                                                                                                                             | зразок                | зразок,<br>фольга | зразок,<br>метал | зразок,<br>фольга,<br>метал |
| 1         | Фарба + 2,9 мас.% ТРГ                                                                                                       | -2,5                  |                   | -2,5             |                             |
| 2         | Фарба + 7,0 мас.% піролітичний вуглець від переробки шин                                                                    | -5,1                  | -1,5              | -2,9             | -1,5                        |
| 3         | Фарба + 0,2 мас.% ВНТ                                                                                                       | - 6,4                 | -1,5              | -2,0             | -1,5                        |
| 4         | Фарба + 0,15 мас.% ВВ                                                                                                       | -4,2                  | -2,1              | -4,2             | -2,1                        |
| 5         | Фарба + 10 мас.% магнетит                                                                                                   | -9,5                  |                   | -2,4             |                             |
| 6         | Фарба                                                                                                                       | - 4,0                 | 1,8               | -1,4             | -1,8                        |
| 7         | 3 шаровий зразок:<br>1-й шар – фарба + 0,15 мас.% ВВ<br>2-й шар – фарба + 0,38 мас. % ВВ<br>3-й шар – фарба + 0,7 мас. % ВВ | -5,3                  | -18,1             | -7,3             | -16,2                       |

Як видно з наведених у таблиці 1 даних, найкращі результати по поглинанню ЕМІ мають зразки з вуглецевим волокном і магнетитом. Для одержання градієнтних 3 шарових зразків РПМ використовували тільки вуглецеве волокно і ці зразки мають найкращі функціональні властивості.

Як видно з даних таблиці 2, зростання концентрації вуглецевого волокна не призвело до покращення радіопоглинаючих властивостей РПМ. Зменшення концентрації ВВ у сукупності з магнетитом дають кращий результат, ніж концентрація ВВ 0,03 мас.%. Додавання перліту дозволило одержати РПМ з найкращими властивостям на частотах 8,2 і 15 ГГц.

**Таблиця 2**

Склад і властивості одержаних РПМ з полімер-неорганічним в'язучим на частотах 8,2 та 15 ГГц

| №№<br>п/р | Склад, мас. %                                 | Поглинання ЕМВ, R, dB |                  |                   |                  |
|-----------|-----------------------------------------------|-----------------------|------------------|-------------------|------------------|
|           |                                               | Частота<br>8,2 ГГц    |                  | Частота<br>15 ГГц |                  |
|           |                                               | зразок                | зразок,<br>метал | зразок            | зразок,<br>метал |
| П-1       | 51,7 ПШ+26,6 КМЦ+21,6 ГЦ+0,03 ВВ              | -8,2                  | -10,5            | 17,3              | -17,4            |
| П-2       | 51,7 ПШ+26,6 КМЦ+21,6 ГЦ+0,05 ВВ              | -8,3                  | -5,5             | 16,4              | -15,1            |
| П-3       | 50,0 ПШ+25,8 КМЦ+21,0 ГЦ+0,02 ВВ+3,2 магнетит |                       | -8,4-            |                   | -16,8            |
| П-4       | 48,6 ПШ+25,1 КМЦ+20,4 ГЦ+0,03 ВВ+5,9 перліт   | -9,1                  | -6,2             | 19,8              | -12,5            |

Таким чином, РПМ на основі лакофарбового в'язучого мають високі функціональні властивості і їх можна використовувати для фарбування різних об'єктів як звичайну фарбу. РПМ на основі полімер-неорганічного в'язучого мають навіть кращі, ніж вищезазначені матеріали, але їх можна наносити на поверхні або у незатверділому стані, або приклеювати вже готові пластини на об'єкт, який потребує маскування.

1. Сотніков О.М., Таршин В.А., Ясечко М.М. Протидія потужному електромагнітному випромінюванню для захисту радіоелектронних засобів // *Системи обробки інформації*. – 2017. - № 5 (151). – С. 32-37.

2. Осинівий Г.Г., Субач В.П., Биков В.М., Колчигін М.М. Зниження радіолокаційної помітності літальних апаратів за допомогою Stealth-технологій // *Озброєння та військова техніка*. - 2018. - 2 (18). С. - 71-74.

3. Чубукін О.С. Отримання багатошарового радіопоглинаючого покриття на основі феритів з використанням генетичного алгоритму оптимізації ефективної поверхні розсіювання електромагнітних хвиль в діапазоні частот 8–12 ГГц. // *Системи озброєння і військова техніка*. – 2019. - № 2 (58). - С. 132-142.

4. Горбик П.П., Махно С.М., Дубровін І.В., Абрамов М.В., Міщенко В.М., Мазуренко Р. В., Петрановська А.Л., Пилипчук Є.В., Прокопенко С.Л. Синтез і властивості наноструктур, поглинаючих надвисокочастотне електромагнітне та нейтронне випромінювання // *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*. – 2017. - 15, № 1. - С. 47–82.

5. Лісачук Г.В. Функціональна кераміка. Керамічні матеріали, що захищають від електромагнітного випромінювання: монографія. – Харків: ТОВ «Планета-прінт», 2013. – 280 с.

6. Поплавко Ю.М., Татарчук Д.Д., Діденко Ю.В., Чипегін Д. Поглинальні мікрохвильові композитні матеріали // *Вісті вищих учбових закладів. Радіоелектроніка*. – 2023. -66, № 1.- С. 27-38.

7. Elmore W.C. Ferromagnetic Colloid for Studying Magnetic Structures // *Phys. Rev.* – 1938. – 54, № 4. – Р. 309-310.

# ПРОСТОРОВА БУДОВА ТА ЕЛЕКТРОННІ СПЕКТРИ ПОГЛИНАННЯ НАНОЧАСТИНОК НЕОРГАНІЧНОГО ПІГМЕНТА ОРТОВАНАДАТУ БІСМУТУ

Гребенюк А.Г.

Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, [grebenyuk\\_ag@ukr.net](mailto:grebenyuk_ag@ukr.net)

Неорганічні пігменти завжди були дуже важливими речовинами для життя людини. Промислове виробництво неорганічних пігментів на основі зростаючих хімічних і фізичних знань почалося приблизно в 1800 році; до цього використовувалися пігменти на основі природних матеріалів. Більшість неорганічних пігментів розроблено та вперше вироблено в промислових масштабах у 19 та 20 століттях. Постійні розробки спрямовані на вдосконалення існуючих звичайних пігментів, а також на синтез нових барвників. Нині поглиблюються всебічні знання про історичні та сучасні неорганічні пігменти, включаючи визначення, типи пігментів та їхні властивості, методи синтезу та застосування.

Більшість неорганічних пігментів є токсичними (сполуки хрому, заліза, свинцю, кадмію, арсену, міді тощо). В останні роки увагу дослідників було зосереджено на створенні і дослідженні властивостей експериментальними та теоретичними методами порівняно малотоксичних пігментів на основі мішаних оксидів, зокрема, жовтого ортованадату бісмуту, який до того ж має фотокаталітичні властивості.

$\text{BiVO}_4$  утворює чотири фази в природі: тетрагональну-1 (структурний тип циркону), тетрагональну-2 (структурний тип шееліту), орторомбічну (структурний тип пухериту) та моноклінну (структурний тип  $\beta$ -фергюсоніту). Шляхом неемпіричних розрахунків для дослідження їхньої структурної стабільності, зонних структур і оптичних властивостей показано, що стабільна фаза залежить від тиску, а найбільш стабільними є Т-1 (під 0 ГПа), Т-2 (під 2 ГПа) і М-фаза (під 4, 6 і 8 ГПа).  $\text{BiVO}_4$  поліморфи у всіх випадках є напівпровідниками, а ширина забороненої зони зменшується зі збільшенням тиску. Оптичні властивості  $\text{BiVO}_4$  можуть бути налаштовані шляхом певної зміни тиску, що є корисним для оптичних застосувань.

У всіх фазах бісмут має координаційне число 8, ванадій – 4, а кисень – 3. Отже, ці структури необхідно віднести до гіпервалентних (гіперкоординованих), а побудова молекулярних моделей і пошук умов стабілізації для них є нетривіальною задачею і потребує спеціального розгляду у кожному окремому випадку.

Метою цієї роботи є побудова і квантовохімічний аналіз методом теорії функціоналу густини просторової будови, енергетичних характеристик та забарвлення молекулярних моделей наночастинок найбільш стабільної поліморфної модифікації ортованадату бісмуту, яка належить до структурного типу циркону.

Ортованадат бісмуту зі структурою циркону характеризується просторовою групою  $I4_1/amd$  і параметрами елементарної комірки  $a = 7.303 \text{ \AA}$ ,  $b = 7.303 \text{ \AA}$ ,  $c = 6.584 \text{ \AA}$ . Довжина зв'язку  $\text{Bi-O}$  становить  $2.41 \text{ (4)}$  та  $2.55 \text{ \AA (4)}$ , а  $\text{V-O}$  –  $1.7 \text{ \AA (4)}$ . Вздовж вісі  $c$  можна виділити ланцюги, аналогічно таким у структурі  $w$ -кремнезему, які складаються по чергово з тетраедрів  $\text{BiO}_4$  та  $\text{VO}_4$ . Відповідні молекулярні моделі можуть закінчуватися з обох боків термінальними гідроксильними групами.

Близьке паралельне розташування ланцюгів мішаних оксидів веде до збільшення координаційних чисел атомів бісмуту аж до 8, таким чином зміцнюючи структуру кластера. Додаткова хемосорбція молекул води також забезпечує збільшення координаційних чисел атомів. В результаті рівноважні молекулярні моделі містять трикоординовані атоми кисню, які сусідять з тетракоординованими атомами ванадію та октакоординованими атомами бісмуту (частина атомів бісмуту на поверхні кластера можуть мати менші координаційні числа).

Будова і властивості побудованих молекулярних моделей вивчалися методом теорії функціоналу електронної густини (DFT) з базисним набором SBKJCS та функціоналом B3LYP з використанням програмного комплексу PC GAMESS. Електронні спектри поглинання розраховано нестационарним методом (TDDFT).

Розраховано просторову будову, оптичні спектри поглинання, величини повної енергії  $E_{\text{повн}}$  та енергетичної щільності  $\Delta E$  простих ланцюгів ортованадату бісмуту, які включають 1. 2 та 3 формульні одиниці речовини. Ці частинки надто малі, або відбивати властивості поліморфних модифікацій речовини. Довжина зв'язку V-O в них становить 1.692 Å (є близькою до такої для кристала), а Bi-O – 2.462 Å (трохи менша за експериментальну для кристала). Ширина енергетичної щільності цих частинок зі збільшенням розмірів моделей поступово зменшується, що відповідає батохромному зсуву максимумів в електронних спектрах поглинання моделей, однак вони залишаються в ультрафіолетовій області.

Досліджено просторову і електронну будову та оптичні властивості модельних структур, утворених близько розташованими простими ланцюгами ортованадату бісмуту, які включають 5 та 9 формульних одиниць речовини. В цих структурах координаційне число атомів ванадію залишається рівним 4, а їхня довжина становить 1.692 - 1.723 Å, тоді як атоми бісмуту підвищують координаційне число аж до 8 (при цьому довжина 6 зв'язків Bi-O збільшується до 2.300 – 2.460 Å і додається пара коротких контактів 2.900 Å).

Ширина енергетичної щільності цих частинок зі збільшенням розмірів моделей також поступово зменшується, що відповідає батохромному зсуву максимумів в електронних спектрах поглинання моделей, і з'являються максимуми у видимому діапазоні, які відповідають жовтому забарвленню, що узгоджується з експериментом.

Розглянуто просторову і електронну будову, а також оптичні властивості модельної структури, утвореної трьома близько розташованими простими ланцюгами ортованадату бісмуту, яка включає 6 формульних одиниць речовини. Ця частинка фактично є двовимірною. В цій структурі координаційне число атомів ванадію дорівнює 4, а їхня довжина становить 1.723 - 1.771 Å, тоді як атоми бісмуту підвищують координаційне число до 6 (зв'язки завдовжки 2.230 - 2.930 Å).

Ширина енергетичної щільності частинок ортованадату бісмуту відповідає батохромному зсуву максимумів в електронних спектрах поглинання моделей, і з'являються максимуми у діапазоні 330 - 385 нм, які відповідають блідо-жовтому забарвленню.

Ортосилікат цирконію та ортованадат бісмуту є ізоструктурними. Міжатомні відстані в тетраедрах дорівнюють 1.668 - 1.759 Å (Si - O) та 1.698 – 1.872 Å (V - O), а в додекаедрах становлять 2.319 – 2.332 Å (Zr - O) Å та 2.497 – 2.597 Å (Bi - O). Перехід від валентної пари IV-IV до валентної пари III-V призводить до різкого (майже вдвічі) зменшення енергетичної щільності і появи жовтого забарвлення.

В літературі повідомляється про синтез кольорових пігментів змішаних оксидів хрому або заліза, розведених в матриці оксиду алюмінію зі структурою корундового типу, які отримують шляхом додавання забарвлених іонів до беміту. В результаті токсичність одержуваних пігментів істотно зменшувалась, а інтенсивність забарвлення збільшувалась. За аналогією, шляхом квантовохімічного моделювання досліджено електронну структуру та забарвлення домішкової фази ортованадату бісмуту в ізоструктурному середовищі циркону. Для цього в кластерній моделі циркону, що містить 14 формульних одиниць, частина їх (в центральній частині кластера, що зберігало забарвлення моделі, та на його поверхні, що призводило до його знебарвлення) замінювалась на певну кількість формульних одиниць ортованадату бісмуту.

Використаний метод розрахунку та запропоновані кластерні моделі ортованадату бісмуту дозволяють відтворити просторову будову та енергетичні характеристики тетрагональної модифікації речовини на напівкількісному рівні. Розраховані електронні спектри поглинання моделей наночастинок лежать в області, яка відповідає жовтому забарвленню.

Величини ширини енергетичної щільності для моделей істотно залежать від координаційного оточення атомів бісмуту, а забарвлення виникає при наявності бісмут-кисневих додекаедрів, що узгоджується з експериментальними даними для кристалів. Результати розрахунків свідчать, що розведення ортованадату бісмуту в ізоструктурній матриці циркону підвищує інтенсивність забарвлення пігмента.

## **Mn-ЗАМІЩЕНІ ФЕРИТИ КОБАЛЬТУ ЯК ЕФЕКТИВНІ КАТАЛІЗАТОРИ ДЛЯ ОКИСНЕННЯ ОРГАНІЧНИХ ЗАБРУДНЕНЬ**

*Данилюк І.В., Татарчук Т.Р., Шийчук О.В.*

Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,

[ivanna.lapchuk@pnu.edu.ua](mailto:ivanna.lapchuk@pnu.edu.ua)

Процеси поглибленого окиснення є одними з сучасних методів очищення води за допомогою утворення високоактивних окиснювальних радикалів. Зокрема, одним із ключових етапів у процесах поглибленого окиснення є каталітична активація пероксиду водню. У процесі активації утворюються гідроксильні радикали – потужні окислювачі, здатні руйнувати стійкі органічні забруднення, в тому числі – мікробіологічні організми. Гетерогенні каталізатори в таких процесах відіграють важливу роль, тому вони повинні демонструвати високу та тривалу каталітичну активність. Згаданим вимогам відповідає ферит кобальту, оскільки він ефективно активує як пероксид водню, так і пероксимоносульфат для деградації органічних забруднювачів [1]. Для підвищення каталітичної активності матеріали можна доповнювати іонами інших перехідних металів, такими як  $Mn^{2+}$ ,  $Cu^{2+}$ ,  $V^{3+}$ . Дане заміщення створить сприятливі умови для ефективного очищення води від органічних забруднень, що є актуальним завданням сьогодення.

Таким чином, було синтезовано серію Mn-заміщених феритів кобальту ( $Co_xMn_{1-x}Fe_2O_4$ , де  $x = 0, 0,1, 0,3, 0,5, 0,7, 1$ ) методом лужного співосадження із застосуванням карбоксиметилцелюлози як диспергуючого агента [2]. Було проведено X-променевий аналіз, який підтвердив наявність (111), (220), (311), (222), (400), (442), (511) і (440) піків Брегга, що свідчить про формування кубічної структури шпінелі (просторова група Fd-3m). Як синтезовані вихідні зразки, так і відпалені за  $500^\circ C$  були однофазними шпінелями. Інфрачервона спектроскопія отриманих Co-Mn феритів виявила дві характерні коливальні смуги, які належать зв'язкам метал-кисень у структурі феритової шпінелі. Аналіз FTIR продемонстрував наявність зв'язків C=O, C-O та C-O-C, які притаманні для карбоксиметилцелюлози. Також ІЧ-спектри показали, що кількість полісахариду карбоксиметилцелюлози зменшується після відпалу. За допомогою дослідження ВЕТ було отримано ізотерми, які відповідають IV типу за класифікацією IUPAC. Це свідчить про наявність як мезопор, так і мікропор в частинках феритів. Найбільша петля гістерезису спостерігається для відпаленого  $MnFe_2O_4$ , що свідчить про найбільшу кількість дрібних пор.

Усі синтезовані ферити виявили ефективну каталітичну активність у процесі розкладу  $H_2O_2$ . За допомогою окиснення ортофенілендіаміну було досліджено генерацію вільних радикалів. Встановлено, що вихідні зразки феритів є більш активними у порівнянні з відпаленими. Однак відпал сприяє підвищенню каталітичної активності Co-Mn феритів в реакції окиснення 4-нітрофенолу. 4-нітрофенол є токсичним продуктом, що утворюється внаслідок органічного синтезу. Дана органічна сполука часто зустрічається у стічних водах виробництва барвників, пестицидів та фармацевтичних препаратів. Кінетика деструкції 4-нітрофенолу за участі різних каталізаторів вказує на схожий порядок активності з кінетичними лініями розкладу  $H_2O_2$ . Цей факт підтверджує, що окиснення забруднювача пов'язане з розкладом  $H_2O_2$ . Встановлено, що деструкція 4-нітрофенолу відбувається за кінетикою реакції першого порядку (константа швидкості для зразка  $MnFe_2O_4$  становила  $> 0.06 \text{ хв}^{-1}$ , що забезпечує майже 100 % руйнування забруднювача впродовж 1 години) [2].

Таким чином, отримані мезопористі Mn-заміщені ферити кобальту є перспективними гетерогенними Фентон-подібними каталізаторами.

1. Tatarchuk T., Shyichuk A., Danyliuk N., Lapchuk I. et al. Fenton- like water disinfection using fixed-bed reactor filled with a  $CoFe_2O_4$  catalyst: Mechanisms, the impact of anions, electromagnetic heating, and toxicity evaluation // *Sep. Purif. Technol.* - 2024. – 348. – 127748.

2. Tatarchuk T., Bilovol V. et al. Mesoporous Co-Mn ferrites as highly radical-forming catalysts for wet peroxide oxidation of 4-nitrophenol//*Appl. Surf. Sci.* – 2025. - V.690. - 162610.



## ВИДАЛЕННЯ ПЕР- ТА ПОЛІФТОРАЛКІЛЬНИХ РЕЧОВИН ІЗ ПРИРОДНИХ І СТИЧНИХ ВОД СПЕЦІАЛЬНИМИ СОРБЕНТАМИ НА ОСНОВІ КРЕМНЕЗЕМУ

*Дударко О.А.<sup>1,2</sup>, Сейсенбаєва Г.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup> Відділ молекулярних наук, Шведський університет сільськогосподарських наук, Уппсала, Швеція, [odudarko80@gmail.com](mailto:odudarko80@gmail.com)

<sup>2</sup> Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Пер- та поліфторалкільні сполуки (ПФАС) є стійкими забруднювачами довкілля, оскільки характеризуються високою стабільністю, токсичністю та здатністю до біоаккумуляції. Серед них перфтороктанова кислота (ПФОА) становить особливу загрозу через її високу розчинність і стійкість до розкладу. Перфтороктанова кислота (PFOA), також відома як C8 і перфтороктаноат, є синтетичною, стабільною фторповерхнево-активною речовиною, яку в тому числі використовують як ПАР для емульсійної полімеризації фторполімерів (Teflon і Gore-Tex). PFOA виробляється в промислових кількостях з 1940-х років. Він також утворюється в результаті деградації попередників, таких як деякі фтортеломери. Є токсикантом і канцерогеном для тварин. PFOA було виявлено в крові більш ніж 98% населення США на низьких рівнях і рівнях, що не перевищують часток на мільярд, і вищому рівні у працівників хімічних заводів. Вплив асоціюється з підвищенням рівня холестерину та сечової кислоти, а нещодавно було виявлено, що більш високі рівні PFOA в сироватці крові спричиняють підвищений ризик хронічної хвороби нирок. Цей зв'язок не залежав від таких факторів, як вік, стать, расова/етнічна приналежність, індекс маси тіла, діабет, гіпертонія та рівень холестерину в сироватці крові. [1]

У цьому дослідженні основна увага приділяється розробці та використанню спеціалізованих мезопористих кремнеземних сорбентів на основі метасилікату натрію (SBA-15), функціоналізованих аміногрупами – первинними, вторинними і третинними (SBA-NH (3-амінопропіл)триетоксисилан), SBA-DA (N-[3-(триметоксисиліл)пропіл]етилєндіамін) та SBA-TA (N1-(3-триметоксисилілпропіл)діетилєнтриамін)), для ефективного очищення водних середовищ від ПФОА. Синтез цих сорбентів здійснювався шляхом темплатного процесу конденсації алкіламіносиланів в присутності P123, що дозволило отримати матеріали з високою адсорбційною здатністю (до 649 мг/г для SBA-TA).

Дослідження демонструє, що поєднання оптимальної морфології поверхні та її функціональних властивостей суттєво покращує ефективність адсорбції ПФОА. Отримані результати створюють передумови для розробки масштабованих і економічно вигідних технологій вилучення ПФОА із систем водопостачання.

Застосування фізико-хімічних методів, включаючи СЕМ, ПЕМ, ІЧ, XRD та ЯМР спектроскопії, дозволило підтвердити структурні та хімічні властивості сорбентів, а адсорбційні дослідження продемонстрували швидку кінетику та високу ефективність.

Одним з методів, який було використано для вивчення процесів сорбції і ефективності вилучення ПФОА була <sup>19</sup>F ЯМР спектроскопія. Ми вимірювали залежність інтенсивності резонансів для кожного зразка в порівнянні з початковою концентрацією та типом адсорбційної матриці (рис. 1) у розчинах після сорбції. Було зроблено висновок, що найефективнішою була сорбція на зразках: SBA-DA та SBA-TA, а найменшою – на чистому SBA. Було зроблене припущення про вплив протонованих аміногруп на ефективність вилучення, що вдалося підтвердити за допомогою твердотільної <sup>19</sup>F ЯМР спектроскопії (Рис. 2), яка дозволила встановити характер взаємодії та кількісну інформацію про утворені адсорбційні комплекси на основі дисперсії хімічного зсуву ядер <sup>19</sup>F. Слід зазначити, що спостережувані резонанси <sup>19</sup>F для ПФОА (SBA) мають незвично для твердого ЯМР вузьку ширину лінії, що можна пояснити підвищеною динамікою PFOA в матриці. Це явище може мати місце, лише якщо ПФОА не взаємодіє з групою NH. Крім того, у спектрі комплексів NHПФОА через інше оточення ядер <sup>19</sup>F хімічний зсув є більш дисперсним порівняно з нефункціоналізованим SBA [2].



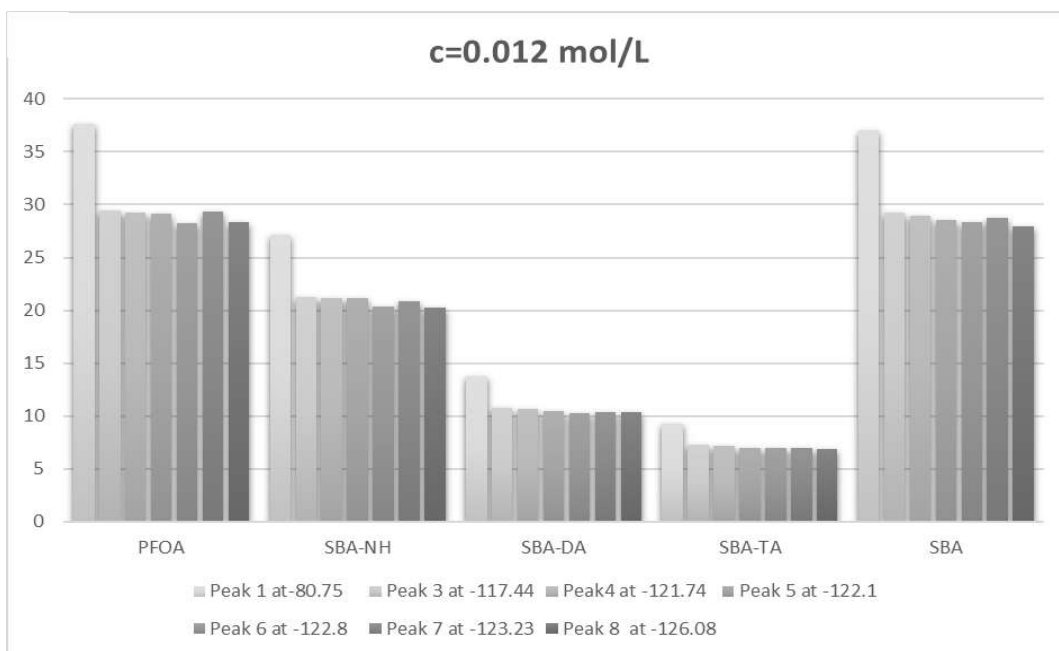


**Рис. 1.** Залежність інтенсивностей резонансів  $^{19}\text{F}$ , що належать сполукам, що залишилися в розчині ( $\text{H}_2\text{O}$ ) після поглинання на синтезованих зразках. Інтенсивності калібрували відносно синтетичного еретичного сигналу, при  $-90$  ppm і відповідно однакової концентрації в усіх експериментах.

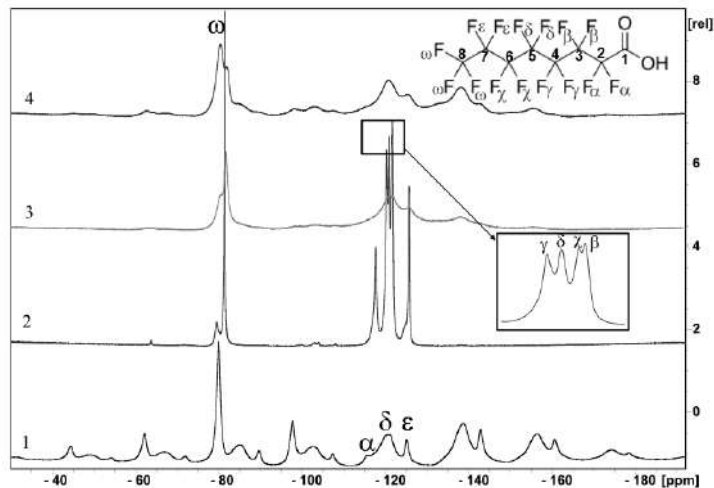


**Рис. 2.** Твердотільні  $^{19}\text{F}$  ЯМР спектри вихідного кристалічного ПФОА (1), SBA (2), SBA-DA (3), SBA-TA (4).

Отже, електростатичні взаємодії між протонованими аміногрупами та аніонними молекулами ПФОА були визначені як ключові для процесу адсорбції.

1. <https://www.ebi.ac.uk/chebi/searchId.do?chebiId=CHEBI:35549>
2. Dudarko O., Budnyak, T., Tkachenko, O., Agback, T., Agback, P., Bonnet, B., Ahrens, L., Daniel, G., Seisenbaeva, G. Removal of Poly- and Perfluoroalkyl Substances from Natural and Wastewater by Tailored Silica-Based Adsorbents // *ACS EST Water*. – 2024. – 4 (4), P. 1303–1314.

## АНАЛІЗ РЕОЛОГІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ КОМПОЗИТУ НА ОСНОВІ ПОЛІКАПРОАМІДУ

*Земке В.М., Братичак М.М., Чопик Н.В.*

*Національний університет «Львівська політехніка», [viktoria.m.zemke@lpnu.ua](mailto:viktoria.m.zemke@lpnu.ua)*

У теперішній час в науці спостерігається тенденція до вдосконалення існуючих полімерних матеріалів. Одним з перспективних напрямків є модифікація полімерів, яка призводить до одержання матеріалів з покращеними фізико-хімічними властивостями.

Одним з найважливіших факторів, що впливають на переробку полімерних сумішей, є їх реологічні характеристики. Вивчення таких властивостей, як плинність та вхідові поправки, дозволяє не тільки зрозуміти поведінку матеріалу під час переробки, але й передбачити його структуру, і як наслідок, впливати на експлуатаційні властивості.

В роботі аналізували реологічні властивості нанокompозиту на основі поліаміду 6 модифікованого монтморилоніт-полівінілпіроліденовою сумішшю та чистим поліамідом [1].

Зняття кривих течії (залежності між напруженням зсуву  $\tau$  від швидкості зсуву  $\dot{\gamma}$ ) здійснювали на віскозиметрі постійного тиску типу ПРТ за постійної температури 230 °C, але за різних навантажень та співвідношенні довжини капіляра до діаметру ( $l/d$ ). Для побудови кривих течії розраховували: швидкість зсуву в капілярі ( $\dot{\gamma}_i$ ), напруження зсуву ( $\tau_i$ ) та ефективну в'язкість ( $\eta_{ef}$ ) [2, 3]. На основі отриманих даних будували графіки залежностей  $\tau = f(\dot{\gamma})$  та  $\eta = f(\dot{\gamma})$  в логарифмічних координатах.

Криву течії розбивали на інтервали і в кожному інтервалі визначали  $n$ , як величину обернено пропорційну тангенсу кута нахилу дотичної до кривої. Розрахованим швидкостям присвоювали відповідні значення напруження зсуву, на основі чого будували криві течії в істинних координатах.

Наступним кроком було визначення тиску ( $P$ ), який створюється поршнем на матеріал та об'ємної витрати ( $Q$ ) матеріалу при різних співвідношення  $l/d$  [3].

З одержаних даних (розрахованих показників) будували графік залежності об'ємної витрати ( $Q$ ) від тиску ( $P$ ) для різного співвідношення  $l/d$ . Вибирали декілька значень  $Q$ :  $Q_1$ ,  $Q_2$  і т.п. та знаходили відповідні значення  $P$ :  $P_1$ ,  $P_2$  і т.п., які відповідають величинам витрат  $Q$  та будували залежність  $\Delta P = f(l/d)$ . Екстраполюючи одержану залежність до нульового значення перепаду тисків, одержуємо вхідову поправку, виражену у відносних довжинах каналу. Вхідова поправка  $v = 1,2$ . Для кожного вибраного значення  $Q$  розраховували напруження зсуву  $\tau$ , швидкість зсуву в капілярі  $\dot{\gamma}$  та ефективну в'язкість  $\eta_{ef}$  [4].

Таким чином, при зростанні об'ємної витрати матеріалу напруження та швидкість зсуву зростають, але не суттєво. Одночасно, при зростанні швидкості зсуву ефективна в'язкість композицій зменшується.

Отже, нанокompозит на основі поліаміду 6 модифікований монтморилоніт-полівінілпіроліденовою сумішшю характеризується технологічністю, притаманною термопластам і тому є придатним для виготовлення конструкційних виробів методом лиття під тиском.

1. Krasinskyi V., Suberlyak O., Zemke V., Chekailo M. Obtaining of nanocomposites based on montmorillonite and polyamide in solution // *Chemistry, Technology and Application of Substances, Bulletin of the Lviv Polytechnic National University*. – 2021. – vol. 4(1), pp. 172– 178.

2. Krasinskyi V., Suberlyak O., Kochubei V., Jachowicz T., Dulebova L., Zemke, V. Nanocomposites based on polyamide and montmorillonite obtained from a solution // *Adv. Sci. Technol. Res. J.* – 2020. vol.14 (3). – pp. 192–198.

3. Plastics. Determination of the melt mass – flow rate (MFR) and melt volume– flow rate (MVR) of thermoplastics – Part 1: Standard method (ISO 1133– 1:2022(E)). – 2022.

4. Chiang Dae Khan. Rheology in polymer processing processes. New York: Academic Press. – 1976. – p. 368.

## ОСОБЛИВОСТІ ФОРМУВАННЯ КАЛЬЦІЙ ФОСФАТІВ У ПРИСУТНОСТІ СУМІШІ КАТІОНІВ $\text{Fe}^{3+} + \text{Mg}^{2+}$ (чи $\text{Zn}^{2+}$ )

*Комащенко Є.О., Струтинська Н.Ю., Лівіцька О.В.*

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, [evakoma0809@gmail.com](mailto:evakoma0809@gmail.com)

На сьогодні важливим завданням для матеріалознавців та дослідників є розробка сучасних матеріалів для заміни чи відновлення кісткової тканини. Для такої мети підходять синтетичні матеріали, оскільки їх використання не має широкого списку обмежень, в порівнянні з ауто- та алотрансплантатами, а функціональні властивості таких імплантатів можуть бути відкореговані ще на стадії їх синтезу відповідно до встановлених вимог окремої задачі. Особливої уваги привертають кальцій фосфати, зокрема апатитового типу  $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ , що є основною неорганічною компонентою кісток та зубів, а також біфазні суміші (гідроксиapatиту  $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2 + \beta\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ ) завдяки притаманним їм біоактивності, нетоксичності та остеоіндуктивності. Варіюванням вмісту фаз у біфазних кальцій фосфатах можливим є вплив на розчинність одержаного матеріалу, а і, відповідно, ціленаправлений контроль процесів відновлення кістки.

Одним з підходів спрямованого впливу на функціональні властивості кальцій фосфатів є легування їх катіонних підґраток. Таким чином введення іонів  $\text{Fe}^{3+}$  у структуру апатитового типу дозволяє покращувати механічні і забезпечує появі магнітних властивостей. Модифікування катіонами  $\text{Mg}^{2+}$  та  $\text{Zn}^{2+}$  дозволяє підвищити біологічну активність синтетичних матеріалів, сприяти процесам мінералізації та наблизитись за складом до природньої кісткової тканини.

Метою наведеної роботи було обрано дослідження особливостей формування кальцій фосфатів у присутності іонів  $\text{Fe}^{3+}$  та катіонів двовалентних металів ( $\text{Mg}^{2+}$  або  $\text{Zn}^{2+}$ ) у складі вихідного розчину. А також оцінка впливу складу модифікованих кальцій фосфатів на значення рН модельних розчинів, залежно від катіонного модифікування та фазового складу синтезованих кальцій фосфатів.

Зразки було синтезовано, з водних розчинів наведеного складу  $\text{NH}_4^+ \text{-Ca}^{2+} \text{-Fe}^{3+} \text{-(Zn}^{2+} \text{ або } \text{Mg}^{2+})\text{-PO}_4^{3-} \text{-NO}_3^-$ , за зазначених мольних співвідношень  $\text{Ca}^{2+} : \text{Fe}^{3+} : \text{Mg}^{2+} = (10-y) : x : z$ , (для  $x = 0.25, z = 0.25, 0.5$ ; для  $z = 0.25, x = 0.1, 0.5$ ) або  $\text{Ca}^{2+} : \text{Fe}^{3+} : \text{Zn}^{2+} = (10-y) : x : z$ , ( $x = 0.1, 0.25, z = 0.25$ ) з подальшим нагріванням до  $600^\circ\text{C}$ . Відповідно до результатів порошкової рентгенографії встановлено формування фаз апатитового типу (гексагональна сингонія, пр. гр.  $R\bar{6}_3/m$ ), для Fe-Zn-вмісних зразків, а у випадку Fe-Mg-вмісних систем 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.  $R3c$ ). Встановлено, що підвищення вмісту легуючих іонів  $\text{Fe}^{3+} + \text{Mg}^{2+}$  у вихідному розчині сприяє зростанню кількості фази на основі  $\beta\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ .

Досліджено вплив синтезованих зразків на значення рН модельного розчину при температурі  $37^\circ\text{C}$  та  $\text{pH} = 7.45$  впродовж 72 годин. Встановлено вплив хімічного та фазового складу синтезованих кальцій фосфатів на характер зміни рН модельного розчину, що вказує на вплив модифікування кальцій фосфатів на їх біоактивність. Це в подальшому може бути використано для одержання синтетичних біоматеріалів для сучасної ортопедії для усунення дефектів кісткової тканини.

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

## МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ГАЗО-ЛАЗЕРНОГО РІЗАННЯ ТРУБЧАСТОЇ ЗАГОТОВКИ

*Кондрашев П.В.<sup>1</sup>, Степура О.М.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>НТУ України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»,

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

В даний час з урахуванням стрімкого розвитку науково-технічного прогресу, лазерна технологія є домінуючою насамперед для технологічного процесу різання матеріалів. Це обумовлено рядом переваг в першу чергу універсальністю інструмента (лазерного променя), не має жодних обмежень до матеріалів які застосовуються для виготовлення виробів, зокрема до їх фізико-механічних властивостей. В той же час при лазерному різанні тонкостінних трубчастих заготовок (наприклад медичних ендопротезів) є суттєві відмінності від звичайного лазерного різання виробів з листових матеріалів. Для більшого розуміння газодинамічних процесів які відбуваються під час лазерної обробки медичних ендопротезів було проведено моделювання процесу розповсюдження струменя допоміжного газу на виході із конічного сопла та його взаємодія із трубчастою заготовкою за допомогою програмного пакету Fluent 6.2 який використовує в якості математичного апарату стандартну  $k-\epsilon$  модель Лаундера-Соплдинга (1) яка добре зарекомендувала себе для моделювання рідких фаз з невеликими градієнтами турбулентних пульсацій, має достатню економічність та високу точність.

$$V_f' = \Gamma \sqrt{\frac{2k}{3}}, \quad L_e = \frac{C_\mu^{\frac{3}{4}} k^{\frac{3}{2}}}{\epsilon}, \quad \tau_e = \frac{L_e}{\sqrt{\frac{2k}{3}}}, \quad (1)$$

де  $k$ -скалярний коефіцієнт енергії турбулентного потоку;

$\epsilon$ -скалярний коефіцієнт розсіювання потоку;

$C_\mu$ -постійна турбулентності;

$\frac{3}{4}$

$C_\mu^{\frac{3}{4}}$

-фактор обраний для здійснення зв'язку між шкалою довжини та довжиною вихору;

$\Gamma$ -випадкова величина, яка обирається для того щоб виявити випадковість турбулентного потоку.

Конічна форма сопла (рис. 1) була обрана з урахуванням рідкої фази з невеликими градієнтами турбулентності на відміну від сопла Вітошинського для якого характерні велика турбулентність та витрата рідкої фази [1, 3].

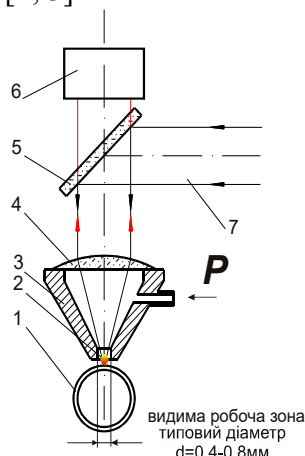


**Рис. 1.** Схема процесу лазерного різання тонкостінної трубчастої заготовки з використанням конічного сопла: 1-заготовка, 2-плазмова хмара, 3-конічне сопло для подачі робочого газу, 4-об'єктив, що фокусує, 5-поворотне дзеркало, 6-телевізійна камера, 7-лазерне випромінювання.

На підставі проведених теоретичних розрахунків процесу моделювання розповсюдження струменя газу на виході із конічного сопла були встановлені граничні значення тиску допоміжного газу при яких відбуваються деформаційні процеси медичного ендопротезу а також спотворення його геометричної конфігурації. Згідно результатів проведеного моделювання процесу взаємодії допоміжного газу з циліндричною тонкостінною заготовкою, була виготовлена дослідна партія заготовок ендопротезів діаметром 1,6 та 4 мм з найпростішою «лінійною» конструкцією візерунка та різною довжиною нитки та кроком по колу, рівному 0,16 мм. На трубчастій заготовці діаметром 4 мм по довжині кола розміщувалось 74 різів товщиною 20 мкм та на заготовці, діаметром 1,6 мм розміщувалось 30 різів відповідно. Так, на рис. 2 зображено зразки медичних ендопротезів діаметром 2-4 мм та довжиною 12- 40 мм.



**Рис. 2.** Зразки медичних ендопротезів різної геометрії.

#### **Висновки:**

-Досліджено взаємодію допоміжного газу із трубчастою тонкостінною заготовкою шляхом моделювання процесу розповсюдження струменя газу на виході із конічного сопла.

-Отримано граничні значення розподілення тиску газу вздовж осі сопла при яких відбуваються деформаційні процеси та спотворення геометричної конфігурації медичного ендопротезу.

-Згідно результатів проведеного моделювання процесу взаємодії допоміжного газу з циліндричною тонкостінною заготовкою, була виготовлена дослідна партія заготовок медичних ендопротезів діаметром 1,6 та 4 мм з найпростішою «лінійною» конструкцією візерунка та різною довжиною нитки та кроком по колу, рівному 0,16 мм.

1. Дослідження аеродинамічних характеристик потоку на робочій ділянці розімкненої аеродинамічної труби дозвукових швидкостей / В.Г. Горобець, Ю.О. Богдан, В.І. Троханяк, Є.О. Антипов, М.Ю. Масюк // *Енергетика і автоматика*. – 2018. – №4. – С. 37-47.

2. Приладовий комплекс реєстрації об'єму та об'ємної витрати газу / І.В. Коробко, О.О. Драчук // *Mechanics and Advanced Technologies*. 2018. – 3 (84).

3. Рудаков К.М. Про створення скінченно-елементної моделі ендопротеза / К.М. Рудаков, М.І. Анякін, В.С.Коваленко, Ю.С.Коба // *Вісті Академії інженерних наук України*. – 2007. - №4 (34). - С. 4-8.



## ВПЛИВ УМОВ СИНТЕЗУ НА ХІМІЮ ПОВЕРХНІ, СТРУКТУРНІ ТА ФОТОЕЛЕКТРОХІМІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ Ti- i Zn-ВМІСНИХ ОКСИДНИХ ПЛІВОК

*Крамар А.С.<sup>1</sup>, Воробець В.С.<sup>2</sup>, Колбасов Г. Я.<sup>2</sup>, Дяченко А.Г.<sup>1</sup>, Ліннік О.П.<sup>1</sup>,*

<sup>1</sup> Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, [nkramar45@gmail.com](mailto:nkramar45@gmail.com)

<sup>2</sup> Інститут загальної та неорганічної хімії імені В. І. Вернадського НАН України

Золь-гель методом, як одним із низько затратних і простих у практичному застосуванні серед так званих «bottom-up» підходів одержання нанорозмірних матеріалів, синтезовано трьохшарові плівки на титанових і скляних підкладках із молярним співвідношенням  $Ti/Zn=1$ . Як джерело іонів металів використовувались тетраізопропоксид титану (IV) та хлорид цинку. З метою зміни фізико-хімічних властивостей напівпровідникових плівок, додатково одержано зразки, при синтезі яких додавали 5 мол.% сечовини. Термічна обробка (ТО) перших двох шарів становила 300°C та останнього - 450°C, 500°C або 600°C (аббревіатура зразків -  $Ti/Zn\_TO$  або  $N/Ti/Zn\_TO$ , де N-сечовина).

Аналіз результатів рентгенофазового аналізу (РФА), електронної дифракції та спектроскопії комбінаційного розсіювання дозволив встановити, що усі зразки містять  $TiO_2$  у структурі анатазу із низьким ступенем кристалічності, що зростає зі збільшенням ТО. Відмічається поява РФА рефлексів, які можна віднести до кристалічної структури кубічної фази  $ZnTiO_3$ , у дифрактограмах  $N/Ti/Zn\_500$ ,  $Ti/Zn\_600$  та  $N/Ti/Zn\_600$  зразків.

Фотоелектрохімічні дослідження показали, що квантовий вихід фотоструму для усіх  $Ti/Zn$  електродів підвищується у порівнянні з індивідуальними оксидами ( $TiO_2$  – анатаз,  $ZnO$  – вюрцит). Поява фотоструму в діапазоні більших довжин хвиль для усіх  $N/Ti/Zn$  може свідчити про вплив модифікуючої домішки на ефективність поглинання квантів світла з меншою енергією. Розраховані значення енергії ширини забороненої зони ( $E_g$ ) для непрямих і прямих переходів вказують на вплив як ТО, так і сечовини на електронну будову композитів. Фотоелектрохімічно одержані значення потенціалу пласких зон ( $E_{fb}$ , НВЕ, pH 7) для зразків  $Ti/Zn\_450$ ,  $N/Ti/Zn\_450$ ,  $Ti/Zn\_500$ ,  $N/Ti/Zn\_600$  відповідають значенням -0,39 В, -0,36 В, -0,36 В, -0,36 В, що є проміжними значеннями до  $TiO_2$  (-0,41 В) та  $ZnO$  (-0,32 В), що свідчить про формування підрівнів іонів  $Zn^{2+}$  у структурі  $TiO_2$ . У той же час, прояв зсуву  $E_{fb}$  у катодну область у випадку  $N/Ti/Zn\_500$  та  $Ti/Zn\_600$  зі значеннями -0,44 В та -0,47 В може бути спричинений початком кристалізації фази  $ZnTiO_3$ .

Формуванням  $Zn-O-Ti$  зв'язків відбувається на поверхні всіх плівок, як свідчать розкладені РФЕ-спектри  $Zn2p_{3/2}$ -електронів. Зі збільшенням ТО спостерігається зменшення відносної інтенсивності розкладених піків поверхневих  $Zn-O-Zn$  зв'язків до повної їх відсутності на поверхні зразків  $Ti/Zn\_600$  і  $N/Ti/Zn\_600$ . Згідно положення максимуму  $Ti2p_{3/2}$ -електронів, встановлено, що на поверхні  $Ti/Zn\_600$  і  $N/Ti/Zn\_600$  зразків відбувається формування дефектів, що пояснюється кристалізацією фази  $ZnTiO_3$ . У випадку інших зразків, формування  $Zn-O-Ti$  зв'язків підтверджено зсувом максимуму  $Ti2p_{3/2}$ -електронів у бік вищих енергій.

Отже, варіативність умов синтезу золь-гель плівок впливає на кристалічність структури, фотоелектрохімічні властивості та хімію поверхні. Відмічається, що зі збільшенням ТО відбувається поява зародків кристалічної структури кубічної фази титанату цинку (зразки  $N/Ti/Zn\_500$ ,  $Ti/Zn\_600$  та  $N/Ti/Zn\_600$ ). Додавання сечовини на стадії синтезу дозволяє одержати плівки з квантовим виходом фотоструму у діапазоні більших довжин хвиль, що забезпечується меншою енергією ширини забороненої зони. Про взаємний вплив ТО та модифікуючої домішки може свідчити: положення потенціалу пласких зон, з чого слідує положення зони провідності та валентної зони; утворення як і різноманітних поверхневих структур із відмінною координацією іонів металів, так і утворення дефектів поверхні.



## ЗАСТОСУВАННЯ ФУЛЕРЕНІВ ДЛЯ КОНСЕРВАЦІЇ ПРОДУКТІВ

*Кричковська Л.В.<sup>1</sup>, Карпушина С.А.<sup>2</sup>, Бирта Г.О.<sup>1</sup>, Грицаєнко Ю.А.<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>Полтавський університет економіки і торгівлі,

<sup>2</sup>Уманський Національний університет садівництва, [svitkrp@gmail.com](mailto:svitkrp@gmail.com)

<sup>3</sup>Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»

Концентровані водні розчини гідратованого фулерену C<sub>60</sub>, скорочено C<sub>60</sub>FWS, є молекулярно-колоїдними системами сферичних фрактальних кластерів, структурною одиницею яких є міцний, високогідрофільний супрамолекулярний комплекс, що складається з молекули фулерену C<sub>60</sub>, яка вбудована в першу гідратну оболонку, яка складається з 24 молекул води: C<sub>60</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>24</sub> (C<sub>60</sub>H<sub>24</sub>O<sub>24</sub>). Близькоз'язана гідратна оболонка є стабільною і підтримується наступними впорядкованими водними оболонками. Розмір C<sub>60</sub>H<sub>24</sub>O<sub>24</sub> відповідає 1,6-1,8 нм. Кластери C<sub>60</sub>H<sub>24</sub>O<sub>24</sub>, тобто вторинні асоціати, утворюються шляхом злиття їх гідратних оболонок. Розміри таких сферичних кластерів відповідають низці значень: 3,4; 7,1; 10,9; 14,5; 18,1; 21,8; 25,4; 28,8; 32,4; 36,0 нм.

Гідратовані фулерени створюють у своєму оточенні впорядковане, структурно гетерогенне водне середовище, в якому спрямованість і кінетика хімічних та біохімічних процесів відрізняється від тих, що відбуваються в чистій (невпорядкованій) воді [1]. Водні розчини гідратованого фулерену C<sub>60</sub> мають великий і універсальний спектр навіть позитивної біологічної активності. Розміри кластерів значною мірою залежать від концентрації C<sub>60</sub>H<sub>24</sub>O<sub>24</sub> у розчині. Чим менш концентрований розчин, тим менший у ньому середній розмір кластера. При розведенні C<sub>60</sub>FWS відбувається динамічний процес перерозподілу молекулярних структурних одиниць до встановлення рівноважного стану з певним дисперсним розподілом кластерів, характерним для цих умов. Процес встановлення дисперсійної рівноваги може тривати досить тривалий час. Розчини з концентрацією 14,4 та 1,0 мг/л зручні для випробувань малих та надмалих доз C<sub>60</sub>H<sub>24</sub>O<sub>24</sub>, оскільки при розведенні розчинів з концентрацією 14,4 мг/л відбувається швидке розукрупнення кластерних структур. При концентрації 1,0 мг/л і менше, одиничні C<sub>60</sub>H<sub>24</sub>O<sub>24</sub> існують у розчині у вигляді ізольованих структур.

При застосуванні C<sub>60</sub>FWS рекомендований діапазон концентрацій гідратованого фулерену C<sub>60</sub> в кінцевому продукті складає: в продуктах водомістких (вода питна, вода для приготування харчових продуктів, алкогольні напої, безалкогольні напої (0,01-10)×10<sup>-3</sup> мг/л. Методика визначення фулеренів у водовміщуючих продуктах заснована на визначенні фулерена в рідких розчинах методом оберненофазної високоефективної рідинної хроматографії (ВЕРХ) з використанням діодно-матричного детектора (довжина хвилі 340 нм) після екстракції фулерену зі зразка бромбензолом.

Фулерени були обрані нами для дослідження їх впливу на стійкість розчинів з біологічно активними речовинами в порівнянні з вуглецьвміщуючою водою, настояної на шунгітах, подрібнених до нанорозмірів. Розмір наночасток складав 40-50 нм. Визначення кількості мікроелементів нового розчину проводили з використанням рентгенофлуоресцентного аналізу з комп'ютерною обробкою отриманих результатів. Зразки препаратів для досліджень готували як на основі гідратованих фулеренів, так і шунгітів (шунгіті настоювалися на дистильованій воді на протязі 3-5 діб). Порошкоподібний шунгіт розміром нижче 40 нм отримували з використанням методу кріоподрібнення. Введення до складу функціонального препарату гідратованих фулеренів призводило до більшої стійкості продукту щодо мікробіологічної контамінації (табл.). Як свідчать результати, представлені у таблиці 1 у дослідних зразках препарату відбувається різного ступеню зменшення в колонійутворюючих одиниць всіх використаних тест-мікроорганізмів через 7 діб після інокуляції, що обумовлено антимікробною дією гідратованих фулеренів та шунгітової води, що також є фулереноподібною структурою, яка забезпечує самоконсервуючий ефект.

Ефективність антимікробних властивостей фулереноподібних структур  
у дослідних зразках функціонального препарату

| Тест-культури                 | Мікробне навантаження після інокуляції, lg КУО/мл | Lg зменшення вихідного мікробного навантаження |       |        |       |
|-------------------------------|---------------------------------------------------|------------------------------------------------|-------|--------|-------|
|                               |                                                   | Гідратовані фулерени                           |       | Шунгіт |       |
|                               |                                                   | 2 доби                                         | 7 діб | 2 доби | 7 діб |
| <i>Staphylococcus aureus</i>  | 5,00                                              | 1,2                                            | 1,8   | 1,6    | 2,5   |
| <i>Pseudomonas aeruginosa</i> | 4,99                                              | 3,15                                           | 3,5   | ,02    | 4,30  |
| <i>Candida albicans</i>       | 4,98                                              | 2,37                                           | 3,58  | 2,85   | 4,08  |

Як свідчать данні таблиці 1, фулерени давали більш високі антимікробні властивості проти найбільш розповсюджених варіацій мікробів.

Є данні про високу ліпофільність фулеренів [2]. Навіть із водорозчинних комплексів з амбідентними полімерами (наприклад, з комплексу C60/γ-ЦД) молекула фулерена C60 швидко переходить у ще більш гідрофобне середовище – у ліпідний бішар. Висока ліпофільність фулеренів неминує має призводити до того, що багато біологічних ефектів пов'язані із взаємодією цих молекул з мембранами. Ліпофільна природа фулерена в принципі припускає можливість його локалізації в неполярних областях мембранних структур. У дослідях з амінокислотними похідними фулерена C60 було показано, що вони можуть проникати у мембрану фосфатидилхолінових ліпосом. Високорозчинні у воді похідні фулеренів-C60 виводяться з організму значно швидше. Ліпофільні властивості фулеренів C60 обмежують їх адсорбцію, проникність через стінку кишечника, розподіл в органах та проникнення всередину клітин.

Водорозчинні похідні C60, як правило, також не виявляють гострої токсичності *in vivo* у дозах до 200–500 мг/кг [2]. Так, середньосмертельна доза (LD50) для фулеренола C60(OH)18 при внутрішньовенному введенні становить 1,2 г/кг. Проте, токсичність похідних C60 може варіювати залежно від природи замісника. Так, синтезовано гідрофільне моносукцинімідпохідне аміноетилдифеніл-C60, яке у разі внутрішньовенного введення тваринам у дозі 15 мг/кг не призводило до токсичних ефектів, але за підвищення дози до 25 мг/кг призводило до загибелі тварин.

При застосуванні ліпофільні властивості фулерену можуть мати вирішальну роль у взаємодії фулерена і його похідних з біологічними об'єктами як *in vitro*, так і *in vivo*. Фулерени викликають особливий інтерес як модифікатори ліпідних двошарових мембран у дослідженнях з фотоелектричного перетворення завдяки їхній високій спорідненості до електронів і високої гідрофобності. Ліпофільні й амфіфільні фулерени в комбінації з лецитиновими мембранами дають можливість створення зовсім нових макромолекулярних систем. Введення в молекулу залишків, здатних до полімеризації, дозволяє одержувати жорстко стабілізовані мембрани, що, у свою чергу, відкриває широке поле діяльності з створення високомолекулярних носіїв і систем доставки.

1. Jennepalli S., Pyne S.G., Paul A. Keller P.A. [60]Fullerenyl amino acids and peptides: a review of their synthesis and applications // *Royal Society of Chemistry advances*. – 2014. V. 4. – P. 46383-46398.

2. Матишевська О.П., Прилуцька С.В., Гринюк І.І. Фулерени C60 – біологічно активні молекули І. Фізико-хімічні властивості та біодоступність // *Біотехнологія*. – 2010. –Т. 3, №1. – С. 18-26.

# СУПРАМОЛЕКУЛЯРНІ КОМПЛЕКСИ ВКЛЮЧЕННЯ β-ЦИКЛОДЕКСТРИНВІСНОГО АЕРОСИЛОГЕЛЮ З БЕНЗЕНОМ ТА ЙОГО КАРБОКСИЛЬНИМИ ПОХІДНИМИ

Ляшенко Д.Ю.

Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, [lasenkodiana60@gmail.com](mailto:lasenkodiana60@gmail.com)

На сьогодні є проблема та її наслідки постійного впливу низьких концентрацій полярних метаболітів на навколишнє середовище [1, 2]. Ці сполуки утворюються в результаті розкладання нафти водними мікроорганізмами спочатку до первинних метаболітів (білки, пептиди, амінокислоти), а потім до вторинних (бензен та його похідні). Крім того, слідові кількості бензену та його карбоксильних похідних потрапляють у навколишнє середовище зі стічними водами хімічних заводів, підприємств фармацевтичної промисловості, змивами із сільськогосподарських угідь.

Визначення та аналіз у водному середовищі слідових кількостей ароматичних органічних речовин можна здійснити, використовуючи функціоналізовані неорганічні сорбенти, що мають високу механічну, гідролітичну, хімічну та радіаційну стійкість, а отже, не втрачають сорбційної здатності при тривалій експлуатації і не забруднюють воду продуктами деструкції.

Мета роботи – дослідження сорбції бензену (Benz) та його похідних: бензойної, (HBenz) саліцилової (HSal) та β-резорцилової (HRez) кислот β-циклодекстринвмісним аеросилогелем (ASG-β-CD). Синтез аеросилогелю було здійснено шляхом двостадійної хімічної іммобілізації функціональних груп β-циклодекстрину на мезопористому різновиді діоксиду кремнію – аеросилогелі так, як описано в [3]. Методами хімічного аналізу, ІЧ спектроскопії та низькотемпературної адсорбції-десорбції азоту визначено вміст β-CD та адсорбційні характеристики поверхні. Концентрація функціональних олігосахаридних груп становила 0.04 ммоль/г,  $S_{\text{пит.}} = 100 \text{ м}^2/\text{г}$ ,  $V_{\Sigma} = 0.60 \text{ см}^3/\text{г}$  та  $d_{\text{сер.}} = 27 \text{ нм}$ .

Методом спектрофотометрії вивчено сорбцію слідових кількостей Benz та токсичних ароматичних кислот HBenz, HSal та HRez з води та водних буферних розчинів з  $\text{pH} = 1$  в залежності від тривалості контакту і рівноважної концентрації.

Встановлено, що сорбційна ємність ароматичних сполук на ASG-β-CD досягається вже за 15-20 хв. Одержані результати проаналізовано за допомогою кінетичних моделей для процесів псевдопершого та псевдодругого порядку (табл. 1), а також за моделями Ленгмюра та Фрейндліха для рівноважної адсорбції на гетерогенній поверхні (табл. 2).

Таблиця 1

Кінетичні параметри сорбції ароматичних сполук  
β-циклодекстринвмісним аеросилогелем

| Ароматична<br>сполука | Процес псевдопершого порядку<br>$\lg(a_{eq} - a_t) = \lg a_{eq} - \frac{k_1}{2.303} \cdot t$ |       |                                                | Процес псевдодругого порядку<br>$\frac{t}{a_t} = \frac{1}{(k_2 \cdot a_{eq}^2)} + \frac{t}{a_{eq}}$ |       |                                                |
|-----------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------|-------|------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|------------------------------------------------|
|                       | Константа<br>швидкості<br>$k_1, 1/\text{хв}$                                                 | $R^2$ | Рівноважна<br>сорбція<br>$a_{eq}, \text{мг/г}$ | Константа<br>швидкості<br>$k_2, \text{г}/(\text{мг} \cdot \text{хв})$                               | $R^2$ | Рівноважна<br>сорбція<br>$a_{eq}, \text{мг/г}$ |
| Benz                  | 0.076±0.009                                                                                  | 0.999 | 2.9±0.2                                        | 0.405±0.013                                                                                         | 0.999 | 2.7±0.2                                        |
| HBenz                 | 0.198±0.010                                                                                  | 0.993 | 2.4±0.1                                        | 0.411±0.020                                                                                         | 0.997 | 3.8±0.2                                        |
| HSal                  | 0.108±0.010                                                                                  | 0.999 | 3.7±0.2                                        | 0.146±0.008                                                                                         | 0.999 | 4.7±0.2                                        |
| HRez                  | 0.294±0.013                                                                                  | 0.999 | 4.5±0.2                                        | 0.079±0.005                                                                                         | 0.999 | 7.5±0.3                                        |

Показано, що кінетичні криві сорбції ароматичних сполук описуються рівнянням для псевдодругого порядку, за винятком бензену. Псевдоперший порядок для Benz свідчить, що взаємодія молекули Benz відбувається з одним центром поверхні ASG-β-CD, а саме шляхом його повного занурення в порожнину молекули β-CD з утворенням супрамолекулярного

комплексу типу “хазяїн–гість”. Псевдодругий порядок свідчить про взаємодію молекул бензенкарбонових кислот з декількома центрами сорбції на поверхні модифікованого олігосахаридними групами ASG-β-CD.

**Таблиця 2**

Параметри рівноважної сорбції ароматичних сполук β-циклодекстринвмісним аеросилогелем

| Ароматична сполука | Ізотерма Ленгмюра<br>$\frac{C_{eq}}{a_{eq}} = \frac{1}{K_L \cdot a_m} + \frac{1}{a_m} \cdot C_{eq}$ |              |       | Ізотерма Фрейндліха<br>$\lg a_{eq} = \lg K_F + \frac{1}{n} \cdot \lg C_{eq}$ |       |       |
|--------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------|-------|------------------------------------------------------------------------------|-------|-------|
|                    | $a_m$ , мг/г                                                                                        | $K_L$ , л/мг | $R^2$ | $K_F$ , мг/г                                                                 | $1/n$ | $R^2$ |
| <i>Benz</i>        | 3.19±0.24                                                                                           | 2.01±0.15    | 0.99  | 1.83±0.12                                                                    | 0.45  | 0.99  |
| <i>HBenz</i>       | 5.58±0.28                                                                                           | 0.15±0.01    | 0.99  | 0.08±0.01                                                                    | 0.57  | 0.99  |
| <i>HSal</i>        | 5.45±0.27                                                                                           | 0.13±0.01    | 0.99  | 0.13±0.01                                                                    | 0.51  | 0.98  |
| <i>HRez</i>        | 6.70±0.34                                                                                           | 0.29±0.01    | 0.99  | 0.36±0.01                                                                    | 0.71  | 0.99  |

На підставі розрахунків параметрів рівноважної сорбції в рамках моделей Ленгмюра і Фрейндліха доведено, що сорбція *Benz* та ароматичних кислот на ASG-β-CD добре узгоджуються з рівнянням Ленгмюра і величини ємності моношару ( $a_m$ ) знаходяться у хорошій відповідності з експериментальною сорбційною ємністю, на відміну від аналогічного параметра ( $K_F$ ) для поверхні з неоднорідними центрами. Це доводить визначальний внесок прищеплених олігосахаридних груп в сорбцію *Benz* та токсичних органічних кислот (табл. 2).

Раніше за рівнянням Кетелара були розраховані константи стійкості ( $K_s$ ) комплексів включення типу “хазяїн–гість” між олігосахаридом та відповідними сполуками у водних розчинах. Показано, що стійкість комплексів включення збільшується в ряду β-CD-*Benz* < β-CD-*HBenz* ≈ β-CD-*HSal* < β-CD-*HRez*. Ємність моношару модифікованого групами аеросилогелю, згідно розрахунку за моделлю Ленгмюра, також зростає від бензену до моно- та дізаміщених кислот (*Benz* < *HBenz* ≈ *HSal* < *HRez*), а коефіцієнти кореляції мають високі значення (табл. 2). Тому логічно припустити, що сорбція цих ароматичних сполук на поверхні ASG-β-CD відбувається також за рахунок утворення поверхневих комплексів включення типу “хазяїн–гість” між закріпленими молекулами олігосахариду поверхні та молекулами ароматичних сполук.

Таким чином, введення олігосахаридних груп до поверхневого шару неорганічних сорбентів сприяє підвищенню спорідненості щодо бензену та бензенкарбонових кислот. Це може бути використане при створенні ефективних сорбентів для визначення та аналізу малих кількостей токсичних ароматичних сполук з води і водних розчинів.

1. Duarte-Davidson R. Benzene in the environment: an assessment of the potential risks to the health of the population // *Occupational and Environmental Medicine*. – 2001. – V. 58, N 1. – P. 2–3.

2. Moura C.P., Vidal C.B., Barros A.L., Costa L.S., Vasconcellos L.C.G., Dias F.S., Nascimento R.F. Adsorption of BTX (benzene, toluene, o-xylene, and p-xylene) from aqueous solutions by modified periodic mesoporous organosilica // *J. Colloid and Interface Sci.* – 2011. – V. 363, N 2. – P. 626–634.

3. Бесякова Л.О., Ляшенко Д.Ю. Синтез та сорбційні властивості β-циклодекстринвмісного аеросилогелю // *Хімія, фізика та технологія поверхні*. – 2023. – Т. 14, № 1 – P. 19–33.

## ХІМІЧНА ВЗАЄМОДІЯ МОНОКРИСТАЛІВ GaSb З ТРАВІЛЬНИМИ КОМПОЗИЦІЯМИ I<sub>2</sub> + HI

*Маланич Г.П.<sup>1</sup>, Денисюк Р.О.<sup>2</sup>, Томашик В.М.<sup>1</sup>, Лозова М.В.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України,

[galya.malanich@gmail.com](mailto:galya.malanich@gmail.com)

<sup>2</sup>Житомирський державний університет імені Івана Франка

Напівпровідникові матеріали типу A<sup>III</sup>B<sup>V</sup>, зокрема GaSb, широко застосовуються для виготовлення інфрачервоних детекторів, інфрачервоних світлодіодів, лазерів і транзисторів, а також термоелектричних систем. Однак, при практичному використанні таких матеріалів існують значні технологічні проблеми, пов'язані з недосконалостями механічних і хімічних обробок та складними умовами роботи виготовлених на їх основі приладів.

Для розробки травільних композицій, що володіють невеликими швидкостями розчинення матеріалу при збереженні високої якості полірованої поверхні, найкраще використовувати слабкі окислювачі. Одним з окисників, який задовольняє таким вимогам, є йод і розчини на його основі [1]. Такі травники характеризуються малими швидкостями розчинення напівпровідників, а також є більш технологічними та екологічно безпечнішими, ніж розчини на основі бром та хлору [2].

В роботі досліджено залежності швидкості розчинення GaSb від концентрації I<sub>2</sub> в HI з використанням установки для хіміко-динамічного полірування при T = 298 K і швидкості обертання диску 78 хв<sup>-1</sup>. Встановлено, що швидкість хімічного травлення GaSb в досліджуваних розчинах змінюється в межах 8,0 – 15,2 мкм/хв, причому полірована поверхня з дзеркальним блиском монокристалів формується в розчинах 9–15 мас. % I<sub>2</sub> в HI (параметр шорсткості становить R<sub>a</sub> < 10 нм). При вмісті 3–6 мас. % I<sub>2</sub> в HI формується поверхня з металічним блиском.

Значення електродних потенціалів процесу полірування GaSb травільними розчинами I<sub>2</sub> + HI визначали для встановлення можливих процесів, що протікають на поверхні розділу фаз. Електродні потенціали процесу саморозчинення GaSb знаходяться в межах 0,165–0,185 В (рис. 1). Електродні потенціали у всіх досліджуваних розчинах з часом поступово знижуються впродовж 20–30-секундного травлення, а далі стабілізуються, що свідчить про розчинення напівпровідника без утворення важкорозчинних сполук. Встановлено, що збільшення вмісту йоду в травільних композиціях призводить до незначного зростання значень електродних потенціалів саморозчинення.

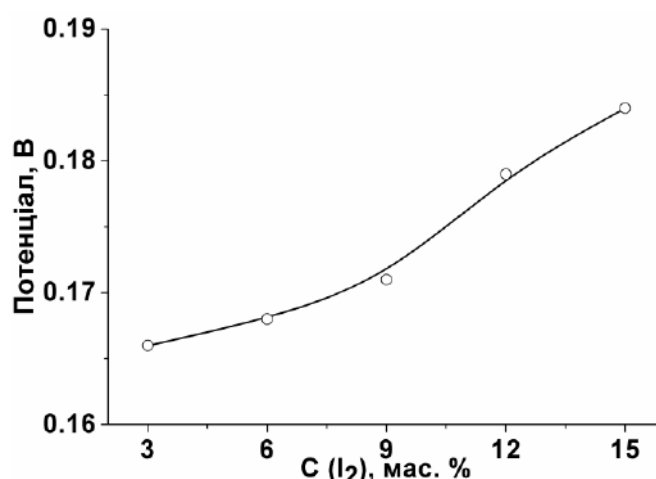


**Рис. 1.** Залежність значень електрохімічних потенціалів взаємодії GaSb від концентрації йоду в травільних розчинах I<sub>2</sub> + HI (T = 293 K).

Оскільки травильні суміші володіють поліруючими властивостями в інтервалі концентрацій 9–15 мас %  $I_2$  в  $HI$ , то можна зробити висновок, що для хімічної обробки поверхні GaSb можна використовувати травники із окисно-відновними потенціалами понад 0,17 В.

Електродні потенціали процесу саморозчинення Ga та Sb в травильних розчинах  $I_2 + HI$  знаходяться в межах 0,39 – 0,425 В та 0,318 – 0,341 В відповідно (рис. 2). Встановлено, що збільшення вмісту йоду в травильних композиціях призводить до незначного збільшення значень електродних потенціалів процесу саморозчинення Ga та Sb, що спостерігається і у випадку GaSb.

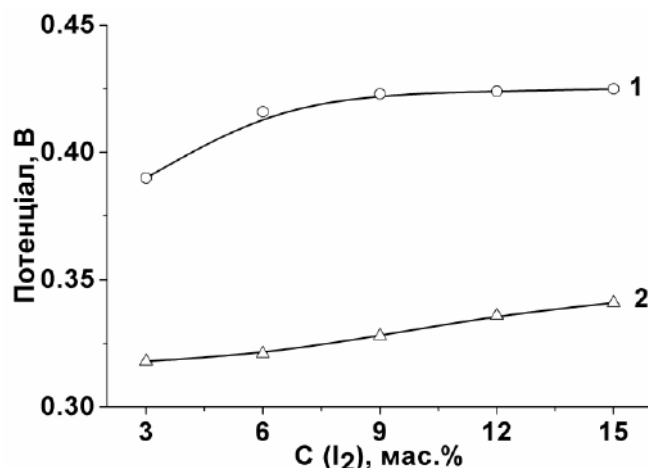


**Рис. 1.** Залежність значень електрохімічних потенціалів взаємодії Ga (1) та Sb (2) від концентрації йоду в травильних розчинах  $I_2 + HI$  ( $T = 293\text{ K}$ ).

Порівнюючи отримані дані, наведені на рис. 1 та рис. 2, можна відзначити, що найбільші за величиною значення потенціалів саморозчинення характерні для Ga, причому порівняння залежностей для GaSb та його складових компонентів свідчить про те, що розчинення галій стибіду в йодвмісних розчинах лімітується швидкістю розчинення Ga. Таким чином процес розчинення галій стибіду в розчинах  $I_2 + HI$  визначається переходом у розчин галію або утворених на поверхні його сполук.

На основі отриманих експериментальних даних встановлено, що для хіміко-динамічного полірування поверхні GaSb можна використовувати йодвмісні травники із окисно-відновними потенціалами понад 0,17 В, що створює умови для обмеження процесу розчинення GaSb переведенням у травильну композицію катіонів галію, при цьому швидкість полірування галій стибіду знаходиться в межах 13,0 – 15,2 мкм/хв.

Робота виконана за рахунок бюджетного фінансування проєкту № 0121U108511 Національної академії наук України. Автори щиро вдячні всім захисникам України та рятувальникам, завдяки яким стало можливим проведення досліджень та публікація їх результатів.

1. Malanych G., Tomashyk V., Korchovy A., Sabov T. Chemical interaction of the GaAs, GaSb, InAs, and InSb single crystals surface with  $I_2 + DMF$  (methanol) etchants. – *Appl. Nanosci.* - 2023. - V.13, N.10. - P.7047-7056.

2. Ivanits'ka V.G., Moravec P., Franc J., Tomashik V.M., Tomashik Z.F., Masek K., Chukhnenko P.S., Höschl P., Ulrych J. Chemical polishing of CdTe and CdZnTe in iodine-methanol etching solutions. – *J. Electron. Mater.* - 2011. - V.40, N.8. - P.1802-1808.



## РОЗРАХУНОК ПАРАМЕТРІВ АДСОРБЦІЇ РИВАНОЛУ НА ПОВЕРХНІ НАНОКРИСТАЛІЧНОГО ДІОКСИДУ ТИТАНУ

*Маркітан О.В.*

Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, [kammar@ukr.net](mailto:kammar@ukr.net)

Нанорозмірні оксидні системи все частіше стають основою для досліджень в біотехнологічній сфері, медицині та хімії навколишнього середовища. Перспективним матеріалом для створення модельних систем та нових терапевтичних засобів є нанокристалічний діоксид титану. Він має низьку токсичність, стабільність фізико-хімічних параметрів та високу біосумісність, широко використовується в біомедицині, може слугувати носієм біологічно активних речовин. Питання пошуку потенційних носіїв речовин, які були б безпечними, біосумісними, стабільними та ефективними при розробці нових терапевтичних препаратів, є завжди актуальним.

Діамінопохідні акридину, маючи антимікробні, антивірусні та антибактеріальні властивості, широко застосовуються для лікування ран, шкіри та слизових оболонок при різного роду інфекціях. Одним з таких профілактичних та лікувальних протимікробних, антисептичних засібів є риванол. У водному розчині він перебуває у вигляді катіонів, протонованих по гетероциклічному атому Нітрогену. Можна припустити, що протоновані молекули риванолу будуть адсорбуватися негативно зарядженими функціональними поверхневими групами діоксиду титану.

Було вивчено залежність адсорбції риванолу від його вихідної концентрації у розчині при  $pH=4.6$  та  $5.1$  (рисунок) та проаналізовано отримані результати з використанням різних ізотермічних моделей для розрахунку кількісних параметрів, приведених в таблиці. Для характеристики даного процесу адсорбції використовували результати, розраховані за моделями з величиною параметра кореляції лінійних залежностей ( $R^2 = 0.97-0.99$ ).

Ізотерми адсорбції мають різний характер, однак в області початкових концентрацій хід кривих схожий і вони задовільно описуються рівнянням Ленгмюра. Величини константи, розраховані за рівнянням Ленгмюра, свідчать про досить міцний зв'язок у досліджуваній системі. Для системи з більшою концентрацією сорбенту (рис. 1 а) за рівнянням Тьомкіна константа зв'язування дещо вища.

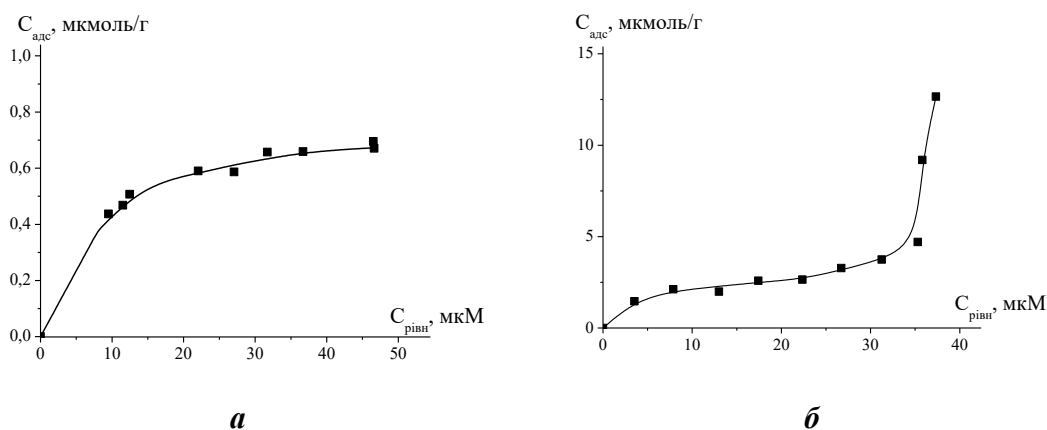


**Рис. 1.** Ізотерми адсорбції риванолу ( $C_{РВ}=5-50 \text{ мкМ}$ ) на поверхні діоксиду титану:  $pH=4.6$ ,  $STiO_2=5 \text{ г/л}$  – (а),  $pH=5.1$ ,  $STiO_2=1 \text{ г/л}$  – (б).

При концентрації діоксиду титану  $1 \text{ г/л}$  та підвищенні концентрації сорбату в результаті насичення моносару адсорбція переходить з мономолекулярної у полімолекулярну (рис. 1 б). Дана ізотерма адсорбції найкраще описується моделлю БЕТ, про що свідчить отримане значення коефіцієнта кореляції для цієї моделі ( $R^2 = 0.996$ ). Після формування мономолекулярного шару на поверхні сорбенту, для досліджуваної системи

характерним є прояв взаємодії адсорбат-адсорбат, сила якої значно менша, ніж сила взаємодії сорбент-адсорбат ( $K_S \gg K_L$ ). При цьому між молекулярними йонами можливе утворення додаткових водневих зв'язків або безпосередньо, або через молекули води.

Характер адсорбції риванолу на поверхні діоксиду титану є сприятливим, на що вказують параметри міри інтенсивності сорбції  $1/n$  та  $R_L$ , розраховані за моделями Фрейндліха та Ленгмюра відповідно.

**Таблиця**

Параметри, розраховані за ізотермами адсорбції риванолу  
з поверхнею нанокристалічного діоксиду титану.

| Модель адсорбції     | Параметри моделі                               | Значення параметрів             |                                 |
|----------------------|------------------------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|
|                      |                                                | pH = 4.6<br>$C_{TiO_2} = 5$ г/л | pH = 5.1<br>$C_{TiO_2} = 1$ г/л |
| Ленгмюра             | $K_L$ , л/моль                                 | 133293.83                       | 101887.39                       |
|                      | $\log K_L$                                     | 5.13                            | 5.01                            |
|                      | $A_{max}$ , моль/г                             | $7.87 \cdot 10^{-7}$            | $5.09 \cdot 10^{-6}$            |
|                      | $\Delta G^\circ$ , кДж/моль                    | -28.75                          | -28.09                          |
|                      | $R_L$ , ( $C_0$ , моль/л)                      | 0.6001                          | 0.6625                          |
|                      | $R^2$                                          | 0.9890                          | 0.8292                          |
| Фрейндліха           | $K_F$ , г/моль                                 | $9.43 \cdot 10^{-6}$            | 0.0072                          |
|                      | $\log K_F$                                     | -5.03                           | -2.14                           |
|                      | $1/n$                                          | 0.263                           | 0.7009                          |
|                      | $R^2$                                          | 0.9775                          | 0.7954                          |
| Дубініна-Радускевича | $K_{DR}$ , моль <sup>2</sup> /кДж <sup>2</sup> | 0.0021                          | 0.0052                          |
|                      | $\log K_{DR}$                                  | -2.68                           | -2.29                           |
|                      | $A_{max}$ , моль/г                             | $2.32 \cdot 10^{-6}$            | $1.32 \cdot 10^{-4}$            |
|                      | $E$ , кДж/моль                                 | 15.542                          | 9.85                            |
|                      | $R^2$                                          | 0.9799                          | 0.7832                          |
| Тьомкіна             | $K_T$ , кДж·г/моль <sup>2</sup>                | $2.25 \cdot 10^6$               | 242517.62                       |
|                      | $\log K_T$                                     | 6.35                            | 5.38                            |
|                      | $B_T$ , кДж/моль                               | 16.51                           | 829.02                          |
|                      | $R^2$                                          | 0.9811                          | 0.6251                          |
| Редліха-Петерсона    | $K_{RP}$ , л/г                                 | 2952.47                         | 0.2231                          |
|                      | $\alpha$ , л/моль                              | $6.06 \cdot 10^8$               | 0.1218                          |
|                      | $\beta$                                        | 0.7991                          | $1 \cdot 10^{-16}$              |
|                      | $R^2$                                          | 0.8153                          | 0.6155                          |
| БЕТ                  | $K_S$ , л/моль                                 | 0.3105                          | $7.78 \cdot 10^9$               |
|                      | $K_L$ , л/моль                                 | -31044.89                       | 24259.60                        |
|                      | $A_{max}$ , моль/г                             | 0.2622                          | $1.04 \cdot 10^{-6}$            |
|                      | $R^2$                                          | 0.7212                          | 0.9963                          |

На основі величини константи Ленгмюра розраховано значення вільної енергії Гіббса ( $\Delta G^\circ < 0$ ), величина якої свідчить про самовільність процесу. Значення енергії адсорбції, розраховані за моделями Дубініна-Радускевича та Тьомкіна, знаходяться в межах  $8 < E < 16$  кДж/моль, а отже адсорбція проходить за іонообмінним механізмом. Модель Редліха-Петерсона, поєднуючи в собі моделі Фрейндліха та Ленгмюра, передбачає наявність на поверхні сорбента певного числа центрів з однаковим адсорбційним потенціалом поряд з її гетерогенністю. Це виражається через параметр  $\beta$ . Для ізотерми при pH=4.6 розраховане значення цього параметра наближається до 1, а отже процес адсорбції краще описується моделлю Ленгмюра і менше відповідає закону Генрі.

Утворення стійкого поверхневого комплексу у досліджуваній системі вказує на те, що нанокристалічний діоксид титану є перспективним матеріалом як основа для фіксації біологічно активних речовин при створенні нових терапевтичних засобів.

## МАГНІТОЧУТЛИВИЙ НАНОКОМПОЗИТ НА ОСНОВІ ДИБЕНЗО-18-КРАУН-6 ЕТЕРУ

*Мечик П., Щеглов О., Кусяк А., Петрановська А., Горбик П.*

Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, [pavelmechik41@gmail.com](mailto:pavelmechik41@gmail.com)

Краун-етери – це макроциклічні сполуки, які широко застосовуються у хімії координаційних сполук, сенсорних технологіях та аналітичній хімії завдяки їхній здатності селективно зв'язувати катіони певних металів. Вони використовуються в іон-селективних електродах, що застосовуються для аналізу складу розчинів, а також у сорбційних матеріалах для вилучення йонів з води та технологічних середовищ. У медицині краун-етери можуть бути частиною транспортних систем для таргетної доставки ліків.

Серед різновидів краун-етерів особливу увагу привертають дибензо-18-краун-6 і дибензо-24-краун-8 етери. Їх жорстка структура, посилена бензеновими кільцями, сприяє ефективному зв'язуванню йонів у полярних і неполярних середовищах, а різниця в величині макроциклів створює передумови для селективної адсорбції [1].

Імобілізація молекул краун-етерів на магнітних наночастинках дозволяє не тільки створити селективні сорбенти, а й забезпечує зручність у вилученні сорбенту з розчину за допомогою магнітного поля. З цією метою було відпрацьовано методики функціоналізації дибензо-18-краун-6 етеру спочатку карбоксильними (COOH) групами, які в подальшому перетворювались на активні хлорангідридні (COCl) групи. Успішність проходження реакцій та повнота перетворень були підтверджені методом <sup>1</sup>H-ЯМР-спектроскопії, що видно за рахунок зміни положень піків ароматичних кілець і невеликої зміни піків етерних груп краун-етеру [2].

Модифікація магнетиту відбувалась за реакцією ацилювання гідроксильних груп поверхні магнетиту хлорангідридними групами краун-етеру за участі тріетиламіну в розчиннику ТГФ. Отримані зразки промиті киплячим толуолом та висушені при 85°C для видалення залишків толуолу. Успішність модифікації підтверджено методом ІЧ-спектроскопії. Максимуми в районі 3000 см<sup>-1</sup> свідчать про наявність бензенових кілець, в районі 1500 см<sup>-1</sup> свідчать про наявність C=O зв'язків та в межах 1000–1300 см<sup>-1</sup> C-O та C-C етерних груп на верхні отриманого зразка.

1. Kang J., Ha W. et al. 4'-aminobenzo-18-crown-6 functionalized magnetic nanoparticles as a solid-phase extraction adsorbent for determination of Pb<sup>2+</sup> // *Analytical Methods* – 2019.

2. Uğraş H. i., Caki U., Azizoglu A., Kiliç T., Erk C. Experimental, Theoretical and Biological Activity Study on the Acyl-Substituted Benzo-18-crown-6, Dibenzo-18-crown-6 and Dibenzo-24-crown-8 // *Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry*. – 2006. – 159–165.

## КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА СПОЛУКИ HoRe<sub>0,25(3)</sub>Ge<sub>2</sub>

*Михалічко В.М.<sup>1</sup>, Федина Л.О.<sup>2</sup>, Федорчук А.О.<sup>3</sup>, Федина М.Ф.<sup>4</sup>*

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

<sup>2</sup> Львівський національний університет ім. Івана Франка,

<sup>3</sup> Львівський національний університет ветеринарної медицини та біотехнологій ім.С.Гжицького,

<sup>4</sup> Національний лісотехнічний університет України, [fmf@ua.fm](mailto:fmf@ua.fm)

Рентгенівським дифракційним методом порошку (дифрактометр ДРОН-2М, Fe K<sub>α</sub>-випромінювання) досліджено кристалічну структуру тернарного германіду HoRe<sub>0,25(3)</sub>Ge<sub>2</sub> (структурний тип (СТ) CeNiSi<sub>2</sub>, символ Пірсона (СП) oS16, просторова група (ПГ) *Cmcm*, *a* = 4,1172(4), *b* = 15,8101(14), *c* = 4,0053(3) Å, *V* = 260,72(4) Å<sup>3</sup>, *R<sub>B</sub>* = 0,0524, *R<sub>P</sub>* = 0,0264, *χ*<sup>2</sup> = 1,92). Проаналізовано спорідненість структури дослідженої сполуки з структурами

бінарних германідів гольмію згідно найближчого координаційного оточення найменш електронегативних атомів рідкісноземельного елемента.

Вперше про тернарний германід  $\text{HoRe}_{0,25}\text{Ge}_2$  повідомили автори праці [1], які провели для цієї сполуки тільки перший етап структурних досліджень. Метою нашої роботи було встановлення структурних параметрів тернарного інтерметаліду  $\text{HoRe}_{0,25(3)}\text{Ge}_2$

Сплав масою 1 г виготовлено в електродуговій печі з вольфрамовим електродом на мідному водоохолоджуваному поді в атмосфері очищеного аргону з металів високої чистоти (не менше 99,85 мас. % основного компонента). Як гетер використано губчастий титан. Зразок гомогенізовано при 800°C протягом 900 год у вакуумованій кварцовій ампулі з подальшим гартуванням у холодній воді. Масив дифракційних даних полікристалічного трифазного зразка складу  $\text{Ho}_{30,7}\text{Re}_{7,7}\text{Ge}_{61,6}$  одержаний на дифрактометрі ДРОН-2.0М (випромінювання  $\text{Fe K}_\alpha$ ). Разом з основною сполукою  $\text{HoRe}_{0,25(3)}\text{Ge}_2$  у зразку перебувають у рівновазі ще фази Ge (СТ C) та  $\text{HoGe}_{3-x}$  (СТ  $\text{DyGe}_3$ ). Експериментальні умови одержання масиву дифракційних даних та результати уточнення структури сполуки наведено в табл. 1, координати та ізотропні параметри коливання атомів – у табл. 2.

**Таблиця 1**

Експериментальні умови одержання масиву дифракційних даних та результати уточнення структури сполуки  $\text{HoRe}_{0,25(3)}\text{Ge}_2$

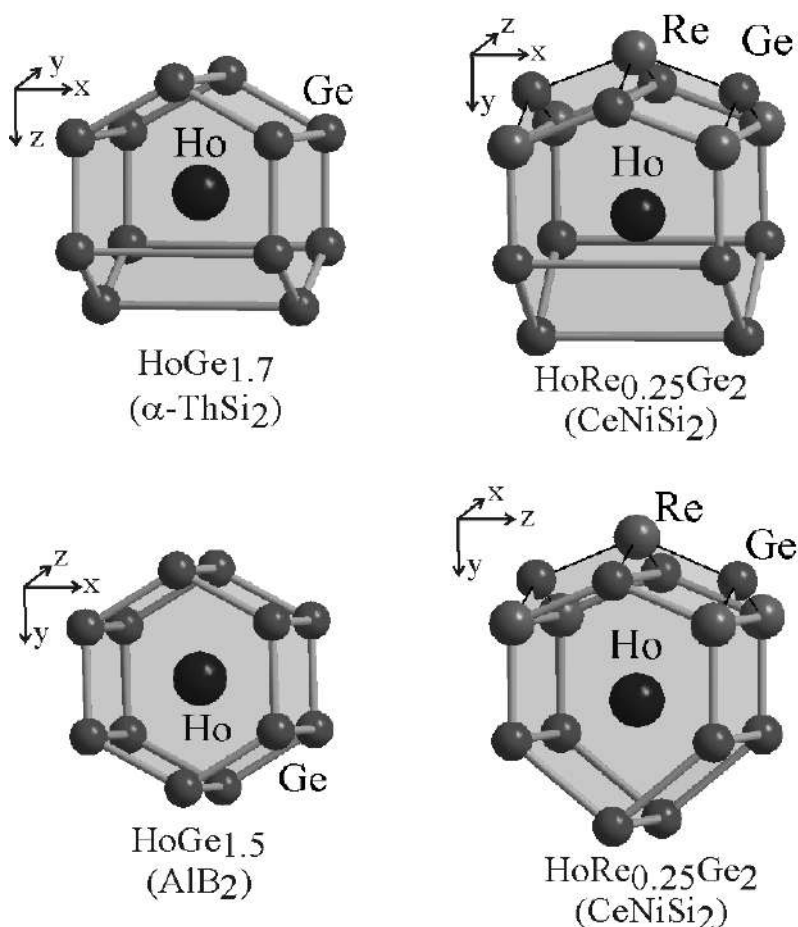
|                                                                 |                                                   |
|-----------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------|
| Склад зразка                                                    | $\text{Ho}_{30,7}\text{Re}_{7,7}\text{Ge}_{61,6}$ |
| Вміст фази, мас. %                                              | 45,2(1)                                           |
| Склад сполуки                                                   | $\text{HoRe}_{0,25(3)}\text{Ge}_2$                |
| Структурний тип                                                 | $\text{CeNiSi}_2$                                 |
| Символ Пірсона, просторова група                                | $o\text{S}16, Cmc21$                              |
| Параметри комірки:                                              |                                                   |
| $a, \text{\AA}$                                                 | 4,1172(4)                                         |
| $b, \text{\AA}$                                                 | 15,8101(14)                                       |
| $c, \text{\AA}$                                                 | 4,0053(3)                                         |
| Об'єм комірки $V, \text{\AA}^3$                                 | 260,72(4)                                         |
| Густина $D_x, \text{г}\cdot\text{см}^{-3}$                      | 9,087                                             |
| Параметр текстури $G, [\text{напрям}]$                          | 0,936(9), [010]                                   |
| Інтервал $2\theta, ^\circ$ / крок, $^\circ$ / час сканування, с | 20-125 / 0,05 / 3                                 |
| Параметри ширини піків:                                         |                                                   |
| $U$                                                             | 0,75(8)                                           |
| $V$                                                             | -0,89(7)                                          |
| $W$                                                             | 0,312(3)                                          |
| Параметр змішування $\eta$                                      | 0,56(3)                                           |
| Параметр асиметрії піків $P$                                    | -0,085(19)                                        |
| Фактори розбіжності:                                            |                                                   |
| $R_B$                                                           | 0,0524                                            |
| $R_F$                                                           | 0,0509                                            |
| $R_p$                                                           | 0,0264                                            |
| $R_{wp}$                                                        | 0,0361                                            |
| $\chi^2$                                                        | 1,82                                              |

**Таблиця 2**

Координати та ізотропні параметри коливання атомів у структурі сполуки  $\text{HoRe}_{0,25(3)}\text{Ge}_2$

| Атом | ПСТ | $x$ | $y$        | $z$ | $G, \%$ | $B_{\text{ізо}}, \text{\AA}^2$ |
|------|-----|-----|------------|-----|---------|--------------------------------|
| Ho   | 4c  | 0   | 0,4024(11) | 1/4 | 100     | 0,43(2)                        |
| Re   | 4c  | 0   | 0,2153(19) | 1/4 | 25(3)   | 0,24(1)                        |
| Ge1  | 4c  | 0   | 0,0584(15) | 1/4 | 100     | 0,80(6)                        |
| Ge2  | 4c  | 0   | 0,8030(17) | 1/4 | 100     | 0,80(6)                        |

Згідно найближчого координаційного оточення (НКО) найменш електронегативних атомів гольмію [2] структура дослідженої сполуки близькоспоріднена зі структурами бінарних германідів гольмію  $\text{HoGe}_{1,7}$  (СТ  $\alpha\text{-ThSi}_2$  СП  $tI12$ , ПГ  $I4_1/amd$ ) та  $\text{HoGe}_{1,5}$  (СТ  $\text{AlB}_2$  СП  $hP3$ , ПГ  $P6/mmm$ ) [3].



З першої структури структура сполуки  $\text{HoRe}_{0,25(3)}\text{Ge}_2$  виводиться включенням додаткових атомів германію, які центрують дві суміщені бокові чотирикутні грані та атома ренію навпроти ребра пентагональної призми, характерної для СТ  $\alpha\text{-ThSi}_2$ . (рис.) Цю ж структуру можна вивести зі структури типу  $\text{AlB}_2$  шляхом включення аналогічних атомів Ge та Re у гексагональну призму вихідної структури бінарного германіду. При переході до структури тернарної сполуки відбувається часткове заміщення атомів германію на атоми ренію.

**Рис.** Спорідненість структур сполук  $\text{HoRe}_{0,25(3)}\text{Ge}_2$ ,  $\text{HoGe}_{1,7}$  та  $\text{HoGe}_{1,5}$

1. Francois M., Venturini G., Malaman B., Roques B. Nouveaux isotopes de  $\text{CeNiSi}_2$  dans les systemes  $\text{R-M-X}$  ( $\text{R} = \text{La-Lu}$ ,  $\text{M} = \text{metaux des groupes 7A 11}$  et  $\text{X} = \text{Ge, Sn}$ ). I. Compositions et parametres cristallins // *J. Less-Common Met.* – 1990. – Vol. 160. – P. 197-213.

2. Федорчук А., Федина М., Кітик І. Найближче координаційне оточення атомів у структурах неорганічних сполук. – Чернівці: Видавничий дім “Родовід”, 2013. – 198 с.

3. Villars P., Cenzual K. Pearson’s crystal data: crystal structure database for inorganic compounds. – Materials Park (Ohio): ASM International, 2013/14.

## КАЛИНА ЗВИЧАЙНА У СИНТЕЗІ НАНОЧАСТИНОК СРІБЛА

Мусієнко Д.Р., Литвин В.А.

Черкаський національний університет ім. Б. Хмельницького, [dmusienko446@gmail.com](mailto:dmusienko446@gmail.com)

Наночастинки срібла ( $\text{AgNЧ}$ ) мають широкий спектр застосувань у медицині, косметології, екології та інших галузях завдяки своїм унікальним властивостям, зокрема високій антимікробній активності. Традиційні методи їхнього синтезу базуються на фізичних і хімічних підходах, які часто потребують використання токсичних реагентів і жорстких умов (високих температур, сильних відновників), що обмежує їхню безпечність та екологічність. Альтернативою є зелений синтез, який передбачає використання природних біологічних агентів – рослинних екстрактів, мікроорганізмів або біополімерів – як відновників і стабілізаторів наночастинок срібла [1].

Рослинні екстракти є особливо привабливими для біогенного синтезу  $\text{AgNЧ}$ , оскільки вони містять широкий спектр вторинних метаболітів – флавоноїдів, поліфенолів, органічних

кислот, алкалоїдів та інших сполук, здатних одночасно відновлювати і стабілізувати наночастинки. Використання екстрактів рослин також дозволяє контролювати розмір, морфологію та стабільність отриманих наночастинок, що є важливим для їхнього практичного застосування [2].

Однією з рослин, придатних для зеленого синтезу  $\text{AgNЧ}$ , є калина звичайна (*Viburnum opulus*) – плодовий чагарник, що містить значну кількість біологічно активних сполук (органічні кислоти, стероїди, сапоніни, флавоноїди), які можуть виступати як відновники та стабілізатори наночастинок срібла. Враховуючи її унікальний хімічний склад, дослідження можливості використання екстрактів цієї рослини для синтезу  $\text{AgNЧ}$  є актуальним. Метою роботи було дослідити ефективність екстрактів різних частин калини (листя, ягід, кори – як свіжих, так і висушених) у синтезі наночастинок срібла, а також оцінити їхню стабільність у часі. Свіжі частини калини піддавали механічному подрібненню, а висушені екстрагували шляхом кип'ятіння. Після фільтрації екстрактів до них додавали аргентум нітрат ( $\text{AgNO}_3$ ) у лужному середовищі. Про утворення наночастинок свідчила поява смуги поглинання в діапазоні 320–600 нм, з максимумом близько 400 нм, що характерно для сферичних наночастинок срібла розміром 10 нм (рис. 1).

Під час первинних вимірювань та порівняння оптичних густин максимумів на спектрах було встановлено, що найвищу ефективність у синтезі  $\text{AgNЧ}$  продемонстрували екстракти кори, особливо у висушеному вигляді ( $A = 1,1$ ), тоді як листя показало найнижчий рівень утворення наночастинок (0,42 для свіжого і 0,3 для висушеного листя). Ягоди мали проміжні результати, проте також забезпечували ефективний синтез.

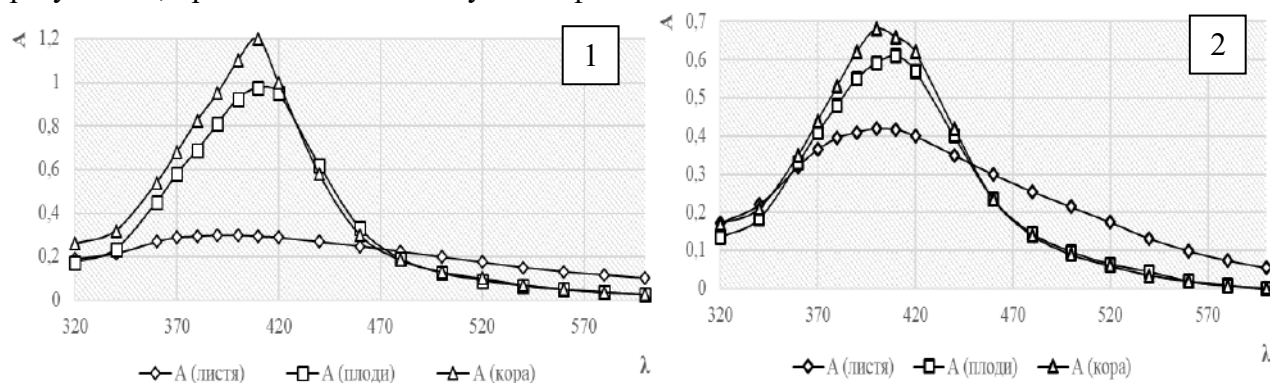


**Рис. 1.** Спектри оптичного поглинання наночастинок срібла, синтезованих за допомогою екстрактів висушеного (1) і свіжого (2) листя, ягід і кори калини.

Аналіз стабільності показав, що розчини наночастинок, отримані з екстрактів ягід та кори, з часом навіть покращували свої оптичні властивості –  $A_{400}$  зросла на 30–40% через місяць. Натомість розчини, отримані з листя, втрачали значну частину оптичної густини: через місяць  $A_{400}$  знизилася на 20,2% (свіже листя) і 81,7% (висушене).

Результати виконаної роботи мають цінне наукове значення і показують, що кора і ягоди калини є ефективними біовідновниками і стабілізаторами для синтезу наночастинок срібла. Висока стабільність отриманих наночастинок означає їх придатність для подальшого використання в біомедичних, антимікробних і нанотехнологічних розробках.

1. Mittal A. K., Chisti Y., Banerjee U. C. Synthesis of metallic nanoparticles using plant extracts // *Biotechnology Advances*. – 2013. - 31(2). - 346-356.

2. Irvani, S. Green synthesis of metal nanoparticles using plants // *Green Chemistry*. – 2011. – 13. - 2638-2650.



## ТРИБОКОРОЗІЙНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТРУБНОЇ СТАЛІ У СІРКОВОДНЕВМІСНИХ СЕРЕДОВИЩАХ ЗА ПРИСУТНОСТІ КИСНЮ

*Рацька Н.Б., Чучман М.Р., Васи́лів Х.Б.*

Фізико-механічний інститут ім. Г. В. Карпенка НАН України, [nadija.ratska@gmail.com](mailto:nadija.ratska@gmail.com)

Трубні системи у нафтогазовидобувній промисловості суттєво залежать від тривкості до корозійно-механічного руйнування, спричиненого сірководнем, який пришвидшує суцільну та виразкову корозію сталей. На інтенсивність корозії впливає не тільки сірководень, а й кисень, який може з ним реагувати змінюючи його дію. Взаємодія цих компонентів з поверхнею сталі призводить до утворення корозійних продуктів, які, в свою чергу, можуть прискорювати процес зношування. Крім того, кисень може зменшувати виділення водню і наводнювання металу, що може впливати на ефективність роботи вузлів тертя [1]. Наразі недостатньо досліджено трибологічні властивості трубних сталей, зокрема із сформованими сірководневмісними плівками, у корозивних середовищах за присутності суміші сірководню та кисню, що важливо для підвищення тривалості експлуатації металоконструкцій.

Мета роботи – вивчити вплив кисню (повітря) на корозійні та трибокорозійні властивості сталі 17Г1СУ у сірководневмісних середовищах.

Для трибокорозійних випробувань за схемою «кулька-площина» зразки (40×50×4 мм) витримували 310 і 720 год в розчині 5% NaCl + 0,5% CH<sub>3</sub>COOH (рН 2,7), крізь який безперервно пропускали суміш сірководню та повітря за співвідношення парціальних тисків  $P_{H_2S}: P_{air}=1:1$ , температури 25 °С та загального тиску 0,1 МПа і надалі досліджували у цих розчинах. Після довготривалої витримки в корозивному середовищі зразки сталі 17Г1СУ використовували як робочий електрод (WE), електрод порівняння (RE) – хлорид-срібний, а допоміжний електрод – платиновий. Зміну сили струму під час тертя фіксували із застосуванням універсального потенціостата-гальваностата MTech SPG-500fast. Навантаження на контртіло (кулька Ø9 мм з Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) 10 Н. Втрати матеріалу визначали за профілограмами доріжки тертя.

Виявили, що у хлоридно-ацетатних середовищах за присутності сірководню і повітря опір корозійно-механічному зношуванню сталі 17Г1СУ поступово знижується зі зростанням часу попередньої довготривалої витримки у цих розчинах. Визначально на механізми зношування сталі впливають сформовані сульфідовмісні плівки. За експозиції 310 год у розчині на поверхні сталі формуються більш однорідні окисно-сульфідні плівки, ніж за витримки 720 год, однак вплив водню найвідчутніший. Однорідність поверхневих плівок зменшується, ймовірно, внаслідок формування сульфідів, кристалічна решітка яких сприяє більшій локалізації корозії.

Встановлено, що у результаті корозійно-механічного зношування сталі у розчині 5% NaCl + 0,5% CH<sub>3</sub>COOH з вмістом сірководню і повітря відбувається рівномірне корозійно-механічне зношування, що проявляється у практично стабільних значеннях коефіцієнта тертя за фрикційної взаємодії. Характер зміни електродних потенціалів під час трибокорозії вказує, що у розчині із повтряно-сірководневою сумішшю інтенсивніші процеси руйнування сформованих структур із зростанням довготривалих витримок. Трибокорозійні процеси зменшують опірність зношуванню сталі 17Г1СУ після довготривалих експозицій внаслідок активації корозії кислим розчином у ~2 рази, суттєво зростають і втрати матеріалу здебільшого через руйнування рихлих продуктів корозії.

1. Хома М. С., Чучман М. Р., Васи́лів Х. Б., Рацька Н. Б., Ковальчик Ю. І. Дослідження впливу кисню на корозію та наводнювання трубної сталі у сірководневих середовищах // *Фізико-хімічна механіка матеріалів*. – 2024., т. 60. № 5. – С. 10–17.

## ВПЛИВ КАТАЛІЗАТОРІВ КРИСТАЛІЗАЦІЇ НА СТРУКТУРУ ТА ВЛАСТИВОСТІ БРОНЬОВИХ МАТЕРІАЛІВ

Рябінін С.О., Захаров А.В., Майстат М.С.

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»,  
[riabinin\\_svyatoslav@hotmail.com](mailto:riabinin_svyatoslav@hotmail.com)

Ефективність броньових матеріалів значною мірою залежить від їхньої внутрішньої структури. Кристалізація у склокристалічних системах впливає на механічну міцність, ударостійкість і тріщиностійкість [1, 2]. Каталізатори кристалізації ( $\text{TiO}_2$ ,  $\text{ZrO}_2$ ,  $\text{SnO}_2$ , фториди) відіграють ключову роль у контролі нуклеації та росту кристалів, формуючи тонкодисперсну структуру з рівномірним розподілом кристалічної фази, що мінімізує мікронапруги та покращує механічні властивості.

Мета дослідження – вивчення впливу каталізаторів кристалізації на формування структури літійалюмосилікатних склокристалічних матеріалів та їхні механічні характеристики, зокрема ударостійкість, твердість і тріщиностійкість.

Механізм дії каталізаторів кристалізації:

- $\text{TiO}_2$  – стимулює утворення нуклеаційних центрів, забезпечує рівномірний розподіл зародків кристалів і формує тонкодисперсну структуру;
- $\text{ZrO}_2$  – стабілізує кристалічну фазу, підвищує міцність і знижує залишкові внутрішні напруги;
- $\text{SnO}_2$  – зменшує в'язкість скломатриці, забезпечує контрольований ріст кристалів та запобігає утворенню дефектів;
- $\text{LiF}_2$  – знижує температуру плавлення, сприяє однорідності структури, що покращує прозорість і зменшує залишкові напруги.

Завдяки введенню каталізаторів формується тонкодисперсна кристалічна структура, де кристали  $\beta$ -сподумену рівномірно розподіляються у матриці. Рівномірний розподіл кристалів дозволяє ефективно розсіювати ударну енергію, знижуючи ризик утворення мікротріщин. Структурна однорідність сприяє підвищенню загальної стабільності матеріалу під час багаторазових ударних навантажень.

Вплив на механічні властивості:

- Твердість – оптимізована структура забезпечує високі показники твердості (HV), що є критичним для руйнування загострених елементів снаряду;
- Коефіцієнт тріщиностійкості ( $K_{IC}$ ) – Завдяки рівномірній кристалізації матеріал набуває підвищеної стійкості до розповсюдження тріщин, що значно покращує його ударостійкість;
- Модуль пружності – стабільна структура дозволяє досягти високого модуля пружності, що сприяє ефективному розподілу ударної енергії по всій об'ємній структурі матеріалу.

Оптимальне використання каталізаторів кристалізації ( $\text{TiO}_2$ ,  $\text{ZrO}_2$ ,  $\text{SnO}_2$  та фториди) дозволяє отримати склокристалічні матеріали з тонкодисперсною, однорідною кристалічною структурою, що забезпечує підвищену механічну міцність, твердість і ударостійкість. Це є важливим досягненням для розробки матеріалів, призначених для бронезахисту, оскільки дозволяє створювати легкі, але ефективні захисні елементи, здатні витримувати інтенсивні ударні навантаження без розповсюдження тріщин.

1. Брагіна Л.Л., Савцова О.В., Бабіч О.В., Соболев Ю.О. Структура та властивості склокристалічних матеріалів : монографія. Харків: ООО "Компанія СМІТ", 2016. 253 с.

2. Савцова О.В., Воронов Г.К., Фесенко О.І., Смирнова Ю.О. Високоміцні склокомпозиційні матеріали спеціального призначення : бронестійкі ситали : навч. посібник. Харків. нац. ун-т міськ. госп-ва ім. О. М. Бекетова. Харків: ХНУМГ ім. О. М. Бекетова, 2021. 162 с.

## ВПЛИВ МОРФОЛОГІЇ ПОВЕРХНІ СВІТЛОКОНВЕРТОРІВ НА ОСНОВІ ЕВТЕКТИКИ $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{YAG}:\text{Ce}$ НА ЇХ СВІЛОТЕХНІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ

*Сірик Ю.В., Кривоногов С.І., Вовк О.М., Ніжанковський С.В.*

Інститут монокристалів НАН України, [lab15.oxydal@gmail.com](mailto:lab15.oxydal@gmail.com)

Світлоконвертери на основі евтектики  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{YAG}:\text{Ce}$  є перспективними матеріалами для створення ефективних потужних джерел білого світла [1]. Відомо що одним із факторів, які істотно впливають на світлотехнічні характеристики монокристалічних конвертерів  $\text{YAG}:\text{Ce}$ , є морфологія їх поверхні [2]. У цій роботі досліджено вплив шорсткості поверхні світлоконвертерів на їх світловий потік, координати кольору та індекс кольоропередачі світлоконвертерів на основі  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{YAG}:\text{Ce}$ .

Для експерименту використовували зразки розміром  $7 \times 7 \times 0.3$  мм з евтектики  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{YAG}:\text{Ce}$  яка була отримана методом горизонтальної спрямованої кристалізації (ГСК), при швидкості кристалізації 50 мм/год у захисному відновному середовищі ( $\text{Ar}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2$ ), концентрація  $\text{Ce}$  у шихті 0.25 ат. %. Зразки шліфували алмазним диском 1A1 250 $\times$ 15 $\times$ 76 АС 20 125/100 М2-01 100% (ГОСТ 16167-80), потім полірували алмазними порошками АСМ (ГОСТ 9206-80Е) з різною зернистістю від 40/28 мкм до 5/3 мкм або 3/2 мкм. Визначення шорсткості поверхні та вивчення її морфології робили методом скануючої атомно силової мікроскопії за допомогою атомно силового мікроскопа Solver P47H-PRO. Світлотехнічні характеристики визначали на стенді Інституту монокристалів НАН України. Стенд складався з джерела синього випромінювання - волоконно-оптичної лазерної системи FC-455-10W (CNI) ( $\lambda=455$  нм,  $P=2\text{W}$ ), яке освітлювало зразок за схемою на просвіт, зовнішньої інтегруючої сфери GL OPTI SPHERE 500 та спектрорадіометра GL-SPECTIS-4.0 (GL OPTIC). Аналізували світловий потік, координати кольору CIE 1931, корельовану колірну температуру (CCT) та індекс кольоропередачі (CRI).

Досліджувалися зразки з різною шорсткістю вхідної та вихідної поверхонь: 1. FP/FP (тонке полірування)  $Ra=7,6/7,6$  нм, 2. RP/RP (грубе полірування)  $Ra=20,8/20,8$  нм, 3. Gr/FP (шліфована вхідна, полірована вихідна)  $Ra=345,2/7,6$  нм та 4. FP/Gr (полірована вхідна, шліфована вихідна)  $Ra=7,6/345,2$  нм див. рис. Отримані результати наведені в таблиці показують, що шорсткість вхідної поверхні практично не впливає на світлотехнічні характеристики. Водночас збільшення шорсткості вихідної поверхні призводить до підвищення світлового потоку приблизно на 8%. Також спостерігається зміщення координат кольору у бік теплого білого світла. Проте зі збільшенням шорсткості вихідної поверхні індекс кольоропередачі знижується приблизно на 3,5%.

Результати дослідження свідчать про можливість підвищення ефективності світлоконверторів, а саме збільшення світлового потоку  $\Phi$ , шляхом зміни обробки поверхні без суттєвих втрат у кольорових характеристиках (CIE 1931 координати та CCT). Зменшення часу на полірування при виготовленні світлоконвертерів може бути доцільним, однак слід враховувати негативний вплив збільшення шорсткості поверхні конвертера на якість отриманого світла (CRI). Подальші дослідження мають бути спрямовані на оптимізацію шорсткості для досягнення найкращого балансу між ефективністю та якістю кольоропередачі.

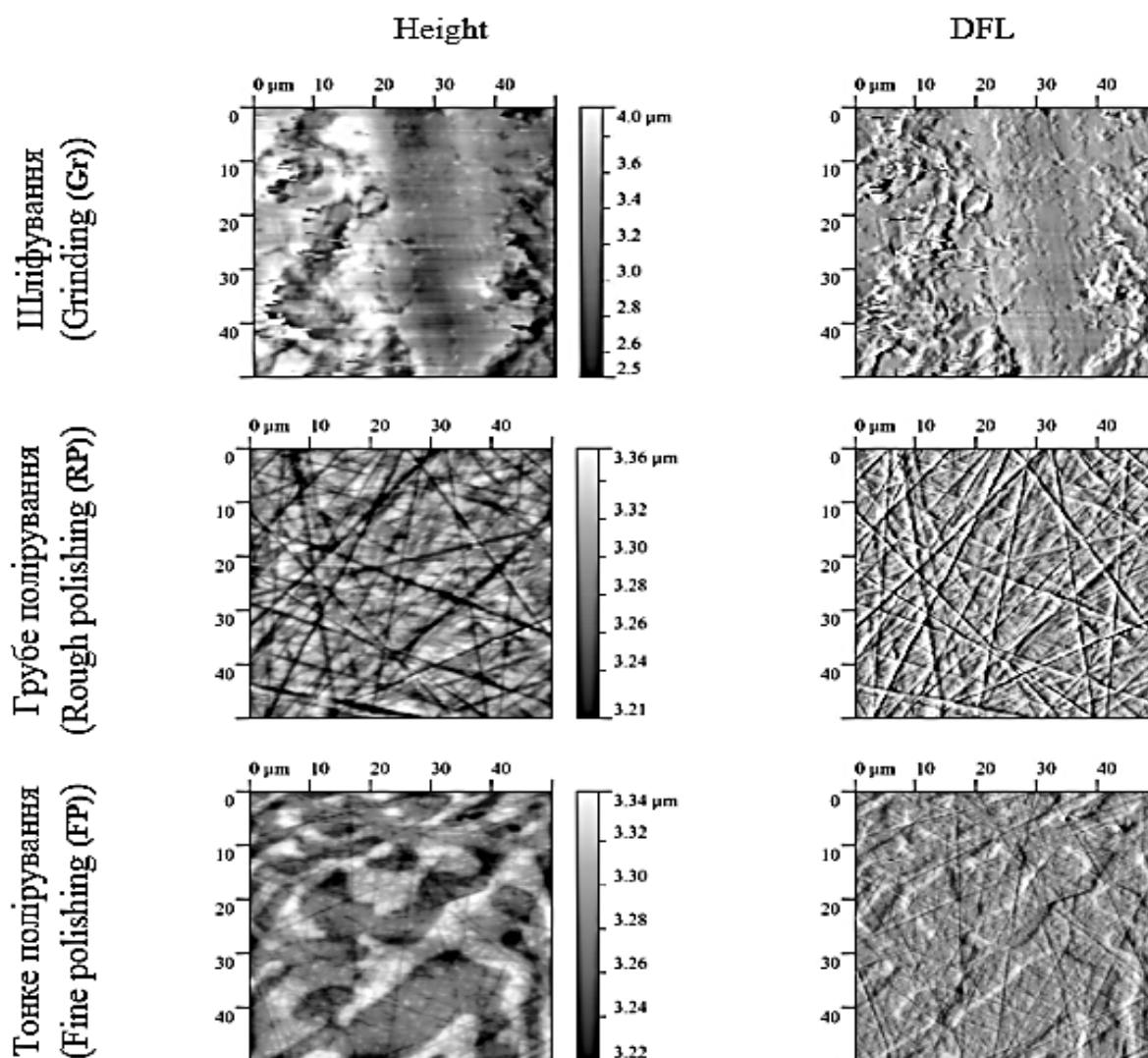


**Рис.** Зображення поверхні зразків евтектики  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{YAG}:\text{Ce}$  з різним ступенем обробки отримане за допомогою атомно-силового мікроскопа.

**Таблиця**

Світлотехнічні параметри конвертерів на основі евтектики  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{YAG}:\text{Ce}$  з різним ступенем обробки поверхні

| № та назва зразка | CIE 1931 координати |        | CCT, K | CRI, % | $\Phi$ , lm |
|-------------------|---------------------|--------|--------|--------|-------------|
|                   | x                   | y      |        |        |             |
| 1 (FP/ FP)        | 0,3170              | 0,3405 | 6153   | 64,5   | 299,        |
| 2 (RP/RP)         | 0,3183              | 0,3416 | 6150   | 64,5   | 300,        |
| 3.1 (Gr/FP)       | 0,3201              | 0,3431 | 6060   | 64,2   | 306,        |
| 3.2 (FP/Gr)       | 0,3358              | 0,3753 | 5392   | 61,9   | 324,        |

1. Shakhno, T. Zorenko, S. Witkiewicz-Łukaszek, M. Cieszko, Z. Szczepański, O. Vovk, S. Nizhankovskyi, Yu. Siryk, Yu. Zorenko.  $\text{Ce}^{3+}$  Doped  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -YAG Eutectic as an Efficient Light Converter for White LEDs. – *Materials*. – 2023. – V.16. I.7. – P.2701.

2. Nizhankovskyi, S.V., Tan'ko, A.V., Savvin, Y.N., Krivonogov S.I., Budnikov A.T., Voloshin A.V. Single crystalline YAG:Ce phosphor for powerful solid-state sources of white light. The influence of production conditions on luminescence properties and lighting characteristics. – *Opt. Spectrosc.* – 2016. – V.120. – P.915–921.



# ВПЛИВ УМОВ СИНТЕЗУ НА СТРУКТУРУ ТА СОРБЦІЙНІ ВЛАСТИВОСТІ КРЕМНЕЗЕМІВ: РОЛЬ ФУНКЦІОНАЛЬНОГО СИЛАНУ ТА ЦИКЛІЧНОГО ОЛІГОСАХАРИДУ ЯК КОМПОНЕНТІВ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ СУМІШІ

Трофимчук І.М., Роїк Н.В.

Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, [trofymchuk\\_iryna@ukr.net](mailto:trofymchuk_iryna@ukr.net)

Золь-гель метод одержання функціональних кремнеземів залишається актуальним серед великої кількості дослідників, які працюють у напрямку синтезу матеріалів з покращеними фізико-хімічними характеристиками для практичного застосування. Властивості таких кремнеземів безпосередньо залежать від експериментальних умов їх одержання. Відомо, що введення функціональних силанів та допоміжних реагентів, мольне співвідношення кремнеземних прекурсорів, температура реакційної суміші та особливості обробки гідрозолів істотно впливають на характеристики золь-гель розчину, а тому визначають структуру та властивості кінцевого продукту. Зокрема, можна одержати матеріали з покращеною термічною стійкістю, низькими значеннями констант діелектричної провідності, удосконаленими гідрофобними чи гідрофільними характеристиками для збільшення ефективності процесів сорбції, каталізу чи для застосування в біомедичній галузі [1, 2].

У даній роботі представлено одностадійний золь-гель синтез функціональних кремнеземів у результаті гідролізу та конденсації тетраетоксисилану (ТЕОС) чи його суміші з (3-хлоропропіл)триетоксисиланом (ХПТЕОС) у присутності  $\beta$ -циклодекстрину ( $\beta$ -ЦД) (рис. 1).

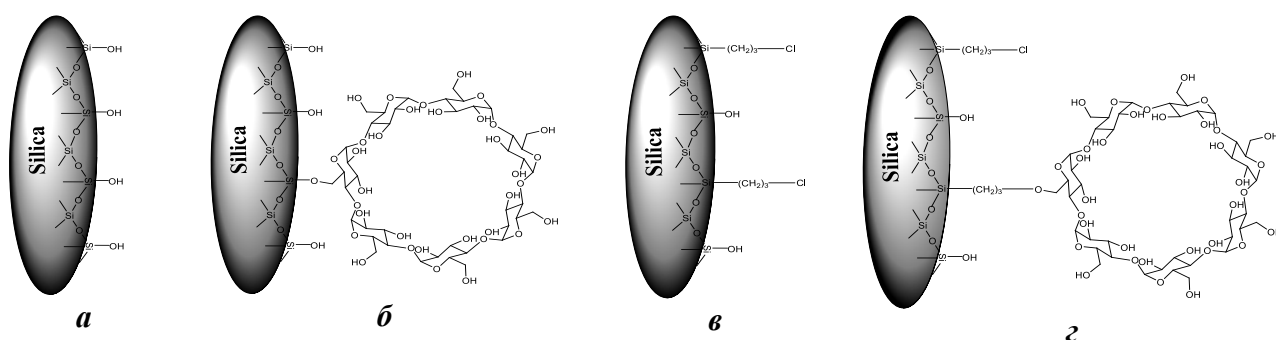


**Рис. 1.** Типи функціональних груп на поверхні синтезованих кремнеземів, одержаних гідролізом і конденсацією ТЕОС (а),  $\beta$ -ЦД/ТЕОС (б) ХПТЕОС/ТЕОС (в) та  $\beta$ -ЦД/ХПТЕОС/ТЕОС (г).

Досліджено вплив експериментальних умов (складу і мольного співвідношення вихідних реагентів, температури, гідротермальної обробки) на будову та структуру синтезованих золь-гель кремнеземів. Одержані матеріали охарактеризовано методами ІЧ спектроскопії, низькотемпературної адсорбції-десорбції азоту, термогравіметричного, хімічного та СЕМ аналізу. Вивчено вилучення бензену з газової фази та фенолу з водного розчину окремими типами синтезованих кремнеземів для аналізу впливу хімічного складу поверхні (наявності закріплених функціональних груп) та пористої структури матеріалу на ефективність сорбції.

Показано, що в результаті поліконденсації ТЕОС при додаванні циклічного олігосахариду закріплення функціональних груп  $\beta$ -ЦД на поверхні кремнезему відбувається завдяки утворенню гідролітично нестійких Si-O-C зв'язків. Багатократне промивання синтезованих матеріалів водою призводить до зменшення кількості хімічно зв'язаного циклодекстрину з 17.55 до 2.68 мкмоль/г. При цьому на ІЧ спектрах спостерігається зменшення інтенсивності смуг поглинання, що відповідають коливанням зв'язків, характерним для олігосахаридних груп. Видалення нанорозмірних фрагментів з поверхні кремнеземних носіїв чітко візуалізується на СЕМ зображеннях (Рис. 26). Гідролітично стійкі

C–O–C зв'язки можна одержати шляхом гідролізу та конденсації двох типів силанів (*TEOS* та *ХПТЕОС*) з додаванням до реакційної суміші  $\beta$ -ЦД. При температурі реакційної суміші 70 °С та мольному співвідношенні *ХПТЕОС*:*TEOS* = 1 : 5 було синтезовано  $\beta$ -ЦД/*ХПТЕОС*/*TEOS* кремнезем з розвинутою питомою поверхнею ( $S_{\text{ВЕТ}} = 396 \text{ м}^2/\text{г}$ ) та вмістом закріплених поверхневих олігосахаридних груп, що сягає 4.83 мкмоль/г. Показано, що зменшення температури реакційної суміші до 20 °С призводить до її розшарування та неможливості отримання кремнеземного матеріалу із закріпленими олігосахаридними групами, тоді як збільшення до 150 °С у поєднанні з гідротермальною обробкою – до руйнування  $\beta$ -ЦД фрагментів. За оптимальних синтетичних умов (температура суміші 70 °С) при збільшенні кількості доданого *ХПТЕОС* та  $\beta$ -ЦД під час гідролізу та поліконденсації *TEOS* спостерігається незначне зростання концентрації закріплених олігосахаридних груп на поверхні кремнезему (до 4.94 мкмоль/г), але при цьому матеріал не має розвинутої пористості ( $S_{\text{ВЕТ}} < 10 \text{ м}^2/\text{г}$ ).

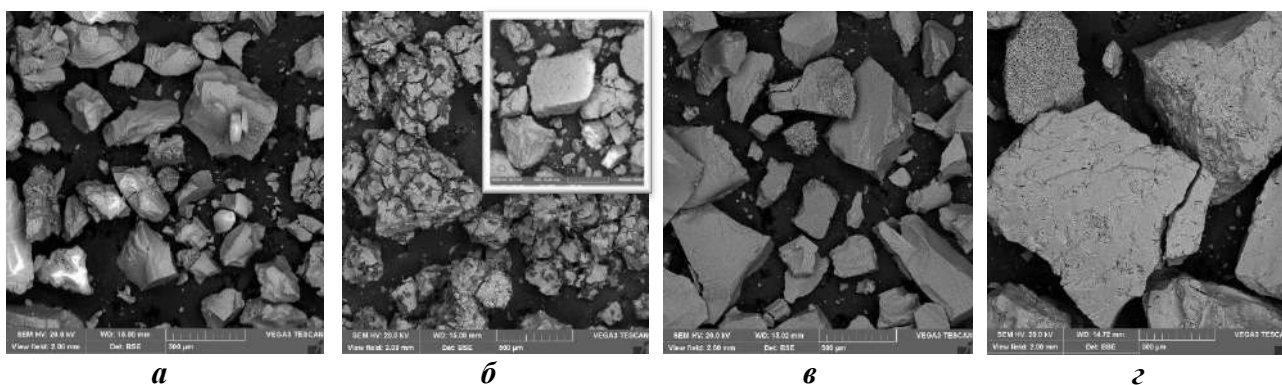


**Рис. 2.** СЕМ зображення золь-гель кремнеземів, синтезованих з *TEOS* (а),  $\beta$ -ЦД/*TEOS* (б) (відмитий зразок у верхньому куті), *ХПТЕОС*/*TEOS* (в) та  $\beta$ -ЦД/*ХПТЕОС*/*TEOS* (г).

Встановлено, що навіть невелика кількість закріплених на поверхні олігосахаридних фрагментів має позитивний вплив на ефективність процесу сорбції ароматичних сполук. Для неупорядкованих  $\beta$ -CD-вмісних кремнеземів, одержаних гідролізом та поліконденсацією *TEOS* та *CPTEOS*, на процес сорбції бензену з газової фази впливає пориста структура і хімія поверхні матеріалу, тоді як при сорбції фенолу з водного середовища визначальною є наявність специфічних центрів сорбції на поверхні кремнезему (рис. 3).

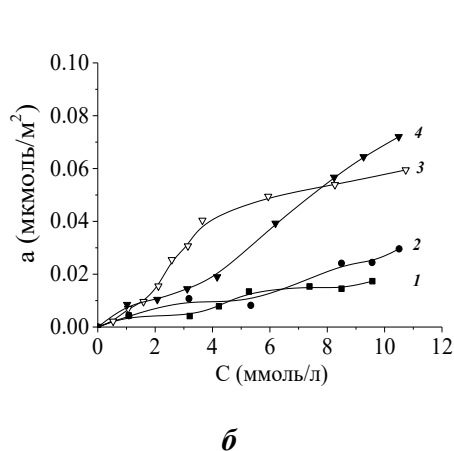
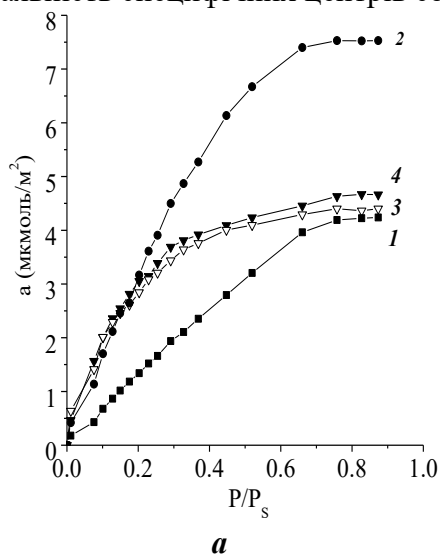


**Рис. 3.** Ізотерми сорбції бензену з газової фази (а) та фенолу з водних розчинів (б) на *TEOS* (1),  $\beta$ -ЦД/*TEOS* (2), *ХПТЕОС*/*TEOS* (3) та  $\beta$ -ЦД/*ХПТЕОС*/*TEOS* (4) кремнеземах.

1. El-Nahhal I.M., El-Ashgar N.M. A review on polysiloxane-immobilized ligand systems: synthesis, characterization and applications // *J. Organomet. Chem.*–2007.–692(14).–P. 2861–2886.
2. Wieszczycka K., Staszak K., Wozniak-Budych M.J., Litowczenko J., Maciejewska B.M. Surface functionalization–The way for advanced applications of smart materials // *Coord. Chem. Rev.*–2021.– 436. – P. 213846.



## АДСОРБЕНТИ З ДОВГОПОЛУМЕНЕВОГО ВУГІЛЛЯ, ОКИСНЕНОГО ПЕРОКСИДОМ ВОДНЮ

Фролова І.Б., Тамаркіна Ю.В., Редько А.В., Кучеренко В.О.

Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАН України,  
[ytamarkina@gmail.com](mailto:ytamarkina@gmail.com)

Дослідження лужної активації викопного вугілля різного ступеня метаморфізму показало [1], що збільшення вмісту структурного кисню прекурсора сприяє розвитку питомої поверхні кінцевого продукту – нанопористого адсорбенту (НА), а збільшення площі поверхні зазвичай покращує адсорбційні властивості НА. Підвищення вмісту кисню можна досягти обробкою вугілля різними окисниками, зокрема пероксидом водню, який найбільше відповідає принципам "зеленої хімії".

Мета роботи – визначення впливу пероксидного окиснення довгополуменового вугілля на адсорбційні властивості НА, отриманих лужною активацією. Тестовими адсорбатами (АД) обрано 4-хлорфенол (ХФ), барвник метиленовий блакитний (МБ) та Pb(II), які є типовими представниками екотоксикантів та використовуються найчастіше.

Дослідження виконано на зразку вугілля з розміром частинок 0.16-0.25 мм, вологістю 10.9%, зольністю 1.8%, елементним складом органічної речовини (% daf): C 78.6; H 5.5; N 1.9; S 1.2; O 12.8 (за різницею). Окиснення вугілля виконували пероксидом водню (60%) протягом 24 год ( $22 \pm 2^\circ\text{C}$ ) при співвідношеннях  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{C}$  вугілля  $R_{\text{OX}} = 0\text{--}1.0$  моль/моль. Окиснені зразки активували KOH (1.0 г/г) термопрограмованим (4 град/хв) нагріванням до  $800^\circ\text{C}$ , ізотермічною витримкою 1 год, охолодженням, відмивкою від луку та сушінням [2]. Питому поверхню  $S$  ( $\text{m}^2/\text{g}$ ) визначали за кількістю адсорбованого йоду [3]. Зразки НА позначено як НА( $R_{\text{OX}}$ ). Адсорбційну ємність  $A_{\text{AD}}$  (ммоль/г), де АД – 4-хлорфенол (ХФ), метиленовий блакитний (МБ) або Pb(II) в водних розчинах визначали за методиками [4].

При окисненні вугілля спостерігається приріст ваги  $\Delta m$ , величина якого залежить від співвідношення  $R_{\text{OX}}$  (рис. 1). В інтервалі  $R_{\text{OX}} \leq 0.4$  моль/моль вага зразків збільшується, а в інтервалі  $R_{\text{OX}} = 0.4\text{--}1.0$  моль/моль змінюється мало. Аналіз ІЧ-спектрів виявив зміни молекулярної будови вугілля внаслідок окиснення аренових фрагментів ( $\text{ArH} \rightarrow \text{Ar-OH}$ ), метильних груп ( $\text{Ar-CH}_3 \rightarrow \text{Ar-COOH}$ ) та алканових фрагментів ( $\text{Ar-CH}_2\text{-R} \rightarrow \text{Ar-C(O)-R}$ ,  $\text{Ar-CH}_2\text{-R} \rightarrow \text{Ar-C(O)-O-R}$ ,  $\text{Ar-CH}_2\text{-R} \rightarrow \text{Ar-O-R}$ ). Збільшення вмісту кисневих груп зазвичай збільшує реакційну здатність вугілля по відношенню до лугів та суттєво впливає на властивості НА. Зі збільшенням ступеня окисленості вугілля вихід НА знижується з 50.2% до 44.6% (рис. 2), що описується кореляційною залежністю  $Y = 50.2 - 5.6 \cdot R_{\text{OX}}$  ( $R^2 = 0.933$ ).

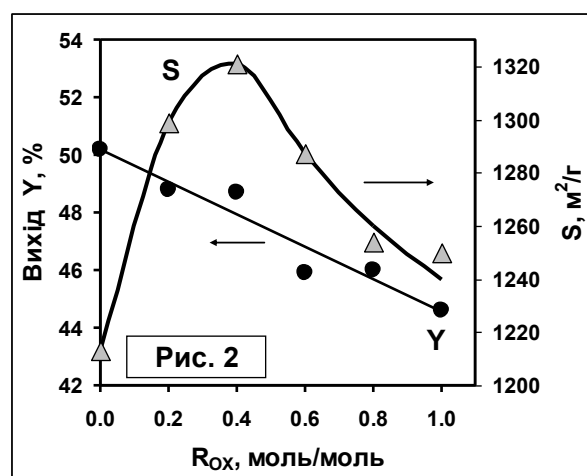
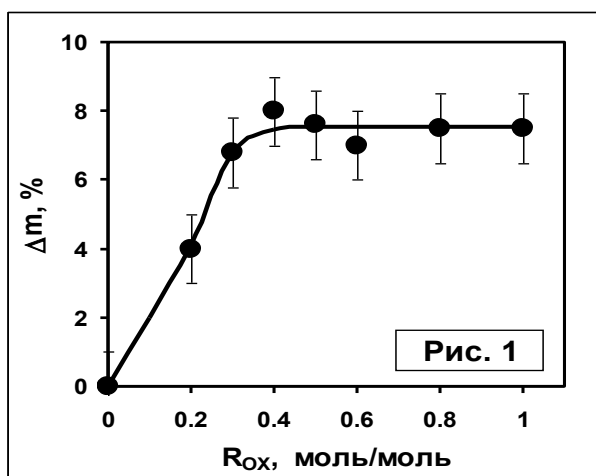


Рис. 1. Приріст ваги вугілля при окисненні пероксидом водню

Рис. 2. Вихід та питома поверхня НА із вугілля, окисненого пероксидом водню

Питома площа поверхні зразків АВ варіюється у вузькому інтервалі  $S = 1213\text{--}1321 \text{ м}^2/\text{г}$ . Проглядається екстремальна залежність питомої поверхні від співвідношення  $R_{\text{OX}}$  (рис. 2) з максимумом у зразка НА(0.4). Тобто, окиснення з невеликою кількістю  $\text{H}_2\text{O}_2$  сприяє підвищенню питомої поверхні, а при вищих вагових співвідношеннях реагенту до вугілля спостерігається негативний ефект.

Для серії зразків НА виміряно адсорбційні ємності за ХФ, МБ та катіонами Рb(II) з водних розчинів при початковій концентрації адсорбату  $C_{\text{AD}(0)} = 5 \text{ ммоль/л}$ , температурі  $25^\circ\text{C}$  та вмісту НА у водному розчині –  $1 \text{ г/л}$  (таблиця).

**Таблиця**

**Адсорбційні ємності зразків НМ**

| Ємність                   | Зразок НА |         |         |         |         |         |
|---------------------------|-----------|---------|---------|---------|---------|---------|
|                           | НА(0)     | НА(0.2) | НА(0.4) | НА(0.6) | НА(0.8) | НА(1.0) |
| $A_{\text{ХФ}}$ , ммоль/г | 3.66      | 3.19    | 3.18    | 2.96    | 2.52    | 2.45    |
| $A_{\text{МБ}}$ , ммоль/г | 0.72      | 0.63    | 0.61    | 0.62    | 0.57    | 0.51    |
| $A_{\text{Рb}}$ , ммоль/г | 0.71      | 0.73    | 0.71    | 0.79    | 0.85    | 0.95    |

Зі зростанням співвідношення  $R_{\text{OX}}$  адсорбційна ємність за ХФ знижується у відповідності до лінійного рівняння  $A_{\text{ХФ}} = 3.585 - 1.183 \cdot R_{\text{OX}}$  ( $R^2 = 0.943$ ). Ємність за МБ також знижується практично лінійно  $A_{\text{МБ}} = 0.697 - 0.174 \cdot R_{\text{OX}}$  ( $R^2 = 0.879$ ) і варіюється у вузьких межах  $A_{\text{МБ}} = 0.51\text{--}0.72 \text{ ммоль/г}$ . Ємність за катіонами свинцю лінійно зростає відповідно до рівняння  $A_{\text{Рb}} = 0.236[\text{H}_2\text{O}_2/\text{C}] + 0.674$  ( $R^2 = 0.851$ ). Виміряні ємності є досить поширеними. Згідно з літературними даними ємності найчастіше знаходяться в наступних інтервалах:  $A_{\text{ХФ(е)}} = 0.33\text{--}2.52 \text{ ммоль/г}$  [5],  $A_{\text{Рb(е)}} = 0.029\text{--}1.42 \text{ ммоль/г}$  [6, 7],  $A_{\text{МБ(е)}} = 0.021\text{--}2.58 \text{ ммоль/г}$  [8], так що отримані зразки НА мають досить високі адсорбційні ємності. Отримані результати дозволяють вважати синтезовані вуглецеві матеріали як ефективні адсорбенти для очищення водних середовищ від екоотоксикантів.

1. Sabierova V.A., Tamarkina Yu.V., Kucherenko V.A. Efficiency of thermal shock in the thermal alkaline conversion of fossil coals into nanoporous materials. – *Solid Fuel Chemistry*. – 2021. – V.55. I.2. – P.110–116.

2. Кучеренко В.О., Тамаркіна Ю.В., Абакумов О.О. Формування мікропористої структури довгополуменового вугілля при лужній активації. Вплив температури. – *Хімія, фізика та технологія поверхні*. – 2024. – Т.15. № 2. – С.241–254.

3. Marsh H., Yan D.S., O'Grady T.M., Wennerberg A. Formation of active carbons from cokes using potassium hydroxide. – *Carbon*. – 1984. – V.22. Is.6. – P.603–611.

4. Сабєрова В.О., Тамаркіна Ю.В., Редько А.В., Кучеренко В.О. Адсорбційні властивості нанопористих вуглецевих матеріалів, отриманих лужною активацією з тепловим ударом – *Технології та інжиніринг*. 2024. – №4(21). – С.111–124.

5 Chen C. Geng X.. Huang W. Adsorption of 4-chlorophenol and aniline by nanosized activated carbons. – *Chem. Eng. J.* – 2017. – V.327. – P.941-952.

6. Asuquo E., Martin A., Nzerem P., Siperstein F., Fan X. Adsorption of Cd(II) and Pb(II) ions from aqueous solutions using mesoporous activated carbon adsorbent: Equilibrium, kinetics and characterisation studies. – *J. Environ. Chem. Eng.* – 2017. – V.5, I.1. – P.679–698.

7. Ghorbani M., Seyedin O., Aghamohammadhassan M. Adsorptive removal of lead (II) ion from water and wastewater media using carbon-based nanomaterials as unique sorbents: A review. – *J. Environ. Manage.* – 2020. – V.254. – 109814.

8. Jasri K., Abdulhameed A.S., Jawad A.H., Al Othman Z.A., Yousef T.A., Al Duaij O.K. Mesoporous activated carbon produced from mixed wastes of oil palm frond and palm kernel shell using microwave radiation-assisted  $\text{K}_2\text{CO}_3$  activation for methylene blue dye removal: Optimization by response surface methodology. – *Diamond and Related Materials*. – 2023. – V.131. – 109581.

## ВПЛИВ ФУНКЦІОНАЛІЗАЦІЇ САЖІ НА СТАБІЛЬНІСТЬ ЇЇ КОЛОЇДНИХ СИСТЕМ У ВОДНО-СПИРТОВОМУ СЕРЕДОВИЩІ

*Хора О.В.<sup>1,3</sup>, Андрійко Л.С.<sup>1,2</sup>, Маринін А.І.<sup>4</sup>, Горєлов Б.М.<sup>1</sup>, Гаврилюк Н.А.<sup>1,3</sup>,  
Золотаренко Ан.Д.<sup>1,3</sup>, Щур Д.В.<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>Інститут хімії поверхні ім.О.О. Чуйка НАН України, [o.khora@ukr.net](mailto:okhora@ukr.net)

<sup>2</sup>Університет геологічних наук, Узбекистан

<sup>3</sup>Інститут проблем матеріалознавства ім.І.М. Францевича НАН України,

<sup>4</sup>Національний університет харчових технологій, Україна

Вивчення електричних властивостей поверхні, зокрема під час дослідження адсорбції, адгезії, агрегативної стійкості дисперсних систем, структуроутворення в матеріалах та інших процесів наразі досить пріоритетним напрямком у розумінні стабільності колоїдних систем, електрокінетичних явищ і взаємодії частинок у суспензіях [1, 2]. Експериментальне визначення значення дзета-потенціалу ( $\zeta$ -потенціал) є вирішальним для аналізу структури та реакційної здатності функціоналізованих наноматеріалів на основі вуглецю. Таким чином, метою даної роботи є дослідження  $\zeta$ -потенціалу колоїдних систем вихідної(нативної) сажі, сажі після окиснення [3], а також окисненої сажі після термообробки при температурі 600 °С.

Вимірювання дзета-потенціал і розподіл частинок за розміром проводили у водно-спиртовому середовищі (у співвідношенні вода-спирт 1:1), методом лазерної кореляційної спектроскопії (ЛКС) за допомогою приладу Zetasizer Nano ZS (Malvern Instruments, United Kingdom). Суспензії зразків вихідної сажі, сажі після окиснення 5%  $\text{KMnO}_4$  та додаткової термічної обробки з концентрацією твердої фази 0,02 мас.% попередньо обробляли ультразвуком 22 кГц протягом 5 хв з подальшим регулюванням рН в діапазоні від 2 до 11 додаванням 0,1 М  $\text{HCl}$  чи 0,1 М  $\text{NaOH}$ , після чого суспензії витримували протягом 24 год. для встановлення рівноваги.

Дослідження показали, що вихідна сажа без додаткової обробки в кислому середовищі ( $\text{pH} = 2,42\text{--}3,50$ ) має позитивне значення  $\zeta$ -потенціалу. рН ізоелектричної точки дорівнює 3,50 (рис. 1, а). При подальшому підвищенні рН середовища до сильно лужного ( $\text{pH} = 11,50$ ) абсолютне значення  $\zeta$ -потенціалу збільшується до -17,3 мВ. Для окисненого зразка сажі спостерігається негативне значення електрокінетичного потенціалу від -5,1 до -16,7 мВ у всьому досліджуваному діапазоні рН. Додаткова термічна обробка окисненого зразку сажі призводить до суттєвих змін  $\zeta$ -потенціалу в кислому середовищі – позитивне значення  $\zeta$ -потенціалу зростає до +8,33 мВ, дещо зміщується рН ізоелектричної точки до 3,9. Це може бути пов'язано з протонуванням поверхні частинок сажі при взаємодії карбоксильних ( $\text{COOH}$ ) та гідроксильних поверхневих груп ( $\text{OH}$ ) з протонами хлористоводневої кислоти. При  $\text{pH} = 11,78$   $\zeta$ -потенціал досягає значення -15,9 мВ. В цьому діапазоні рН ймовірно відбувається депротонування поверхневих функціональних груп, що призводить до збільшення негативного значення  $\zeta$ -потенціалу [4, 5]. Отже, одержані дані свідчать про те, що частинки досліджуваних зразків сажі мають слабе відштовхування і здатні до агрегації та седиментації, тобто досліджувані системи не є стабільними.

Слід відмітити, що суспензії вихідної та окисненої сажі мають рН близько нейтрального – 6,34-6,41, а суспензії сажі після додаткової термічної обробки складає 3,4. Це впливає на розподіл частинок сажі за розмірами (РЧР) у рідкому дисперсійному середовищі. Так, розмір частинок зразків вихідної сажі у водно-спиртовому середовищі носить переважно бімодальний характер. При цьому розмір частинок відносно об'єму є мікронним – основний максимум відповідає 1616 нм (рис. 1, в) із незначним плечем, що відповідає за наявність частинок розміром 5000 нм. Подібні дані спостерігаються і для окисненої сажі після термічної обробки. Зміщення рН середовища в кислу область при додаванні 0,1М  $\text{HCl}$  призводить до суттєвої агрегації частинок вихідної сажі, про що свідчить інтенсивний максимум на кривих розподілу при  $\text{pH} = 2,42$ , що пов'язано зі зміною значення електрокінетичного потенціалу в даній області рН на позитивне та його близьким значенням до рН ізоелектричної точки. В лужному середовищі  $\text{pH} = 11,50$  відбувається руйнування

агломератів частинок сажі до 315 нм відносно об'єму та 140 нм відносно кількості частинок за рахунок збільшення негативного значення  $\zeta$ -потенціалу в лужному середовищі (рис.1, в-д).

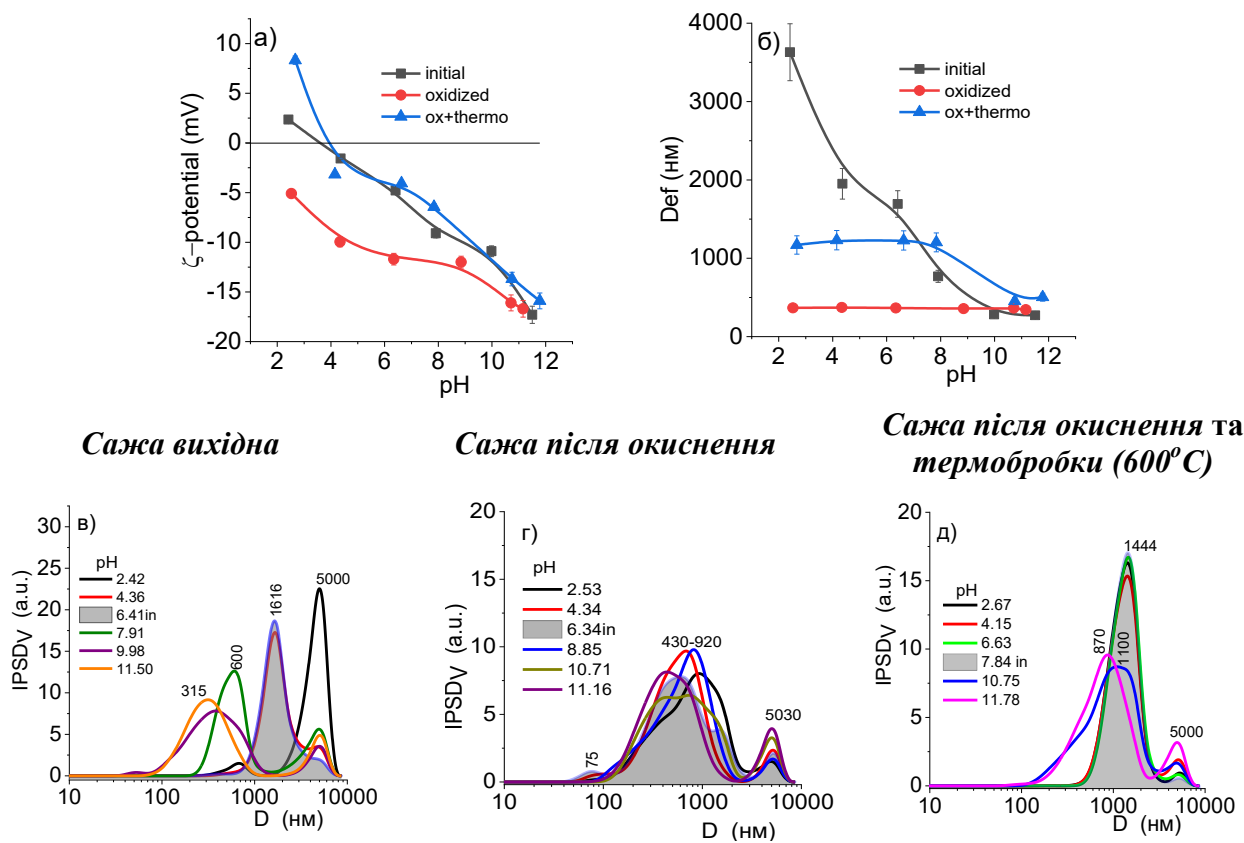


**Рис. 1.** Залежність дзета-потенціалу (а) та ефективного діаметру (б) частинок сажі (визначеного за інтенсивністю розсіювання світла) частинок зразків сажі від рН водно-спиртового середовища (■ - вихідна, ● – окислена, ▲ – окислена+термообробка); (в,г,д) розподіл частинок за розміром відносно об'єму частинок сажі від рН ( $C_{\text{сажі}} = 0,02$  мас. %).

Для зразків окисненої сажі після термічної обробки таких суттєвих змін при переході до кислого середовища не спостерігається, що може бути пов'язано з тим, що для цього зразка не відбувається переполюсації електрокінетичного потенціалу при зміні рН середовища. Для окисненої сажі після термічної обробки, як і для вихідної, також спостерігається зменшення розмірів агломератів частинок в сильно лужному середовищі (рис. 1, в-д).

Значення ефективного діаметра, розрахованого з інтенсивності розсіяного світла за даними ЛКС, демонструють істотне збільшення розмірів агломератів частинок вихідної сажі у кислому середовищі від 1690 нм (без додавання 0,1 М HCl) до 3630 нм (при рН = 2,41), тобто майже в 2 рази, що може бути пов'язане з кількома процесами: протонуванням/депонуванням поверхні, що впливають на електростатичні взаємодії частинок, зміною товщини подвійного електричного шару, а також утворенням водневих зв'язків між частинками сажі [6, 7]. Внаслідок цих процесів відбувається інтенсивна агломерація частинок в кислому середовищі. Для зразка окисненої сажі після термообробки ефективний діаметр складає 1170 нм в кислому середовищі.

Зміна рН середовища в лужну і сильно лужну область призводить до зменшення ефективного діаметра частинок вихідної і окисненої сажі після термообробки до 270 нм та 500 нм, відповідно, ймовірно за рахунок того, що в лужному середовищі посилюється процес дисоціації поверхневих гідроксильних груп, що створює умови для посилення



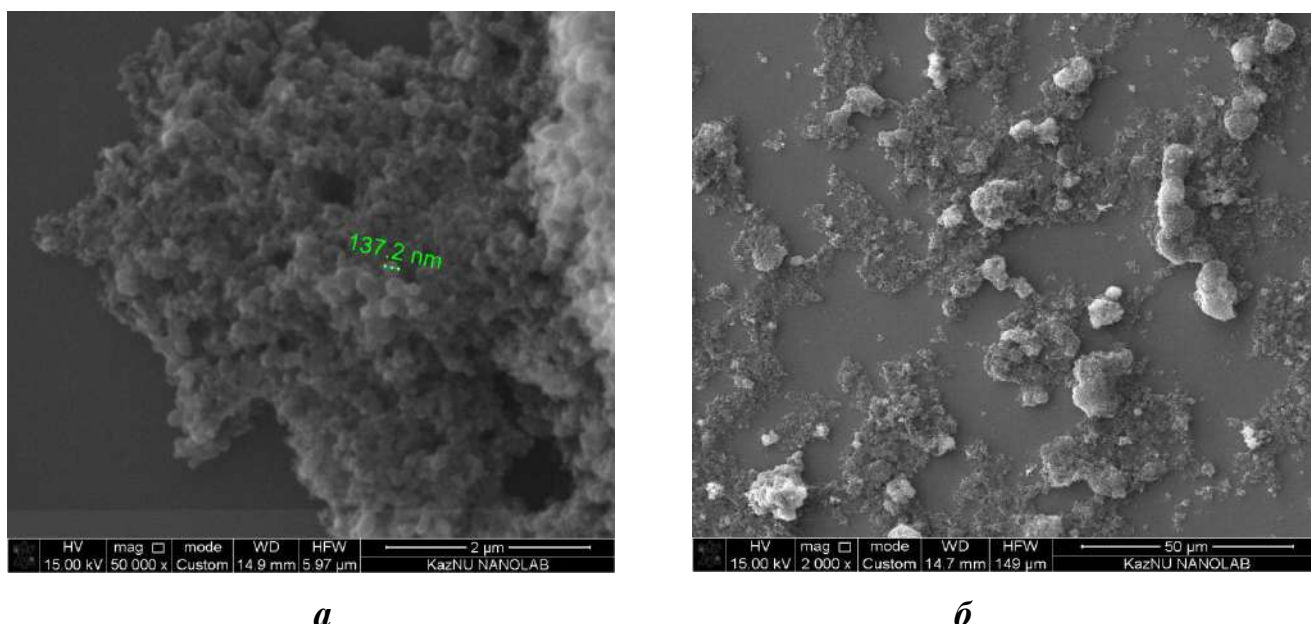


**Рис. 2.** СЕМ-зображення вихідної (а) і окисненої (б) сажі.

електростатичного відштовхування між частинками. Для зразка окисненої сажі ефективний діаметр частинок не змінюється у всьому досліджуваному діапазоні рН і становить близько 350 нм.

На СЕМ-зображеннях (рис. 2) спостерігаються помітні морфологічні зміни сажі після окиснення в порівнянні з вихідною.

Отже, найнижче значення дзета-потенціалу для окисненої форми спостерігається в усьому досліджуваному діапазоні рН. При зменшенні кислотності середовища дзета-потенціал зменшується як для вихідної так і для окисненої сажі, а також для окисненої сажі після термообробки.

1. Hunter R.J. Zeta Potential in Colloid Science. – London: Academic Press, 1981. – 286.
2. Gun'ko V.M., Andriyko L.S., Zarko V.I., Marynin A.I., Olishevskiy V.V., Janusz W. Effects of dissolved metal chlorides on the behavior of silica nanoparticles in aqueous media. – *Cent. Eur. J. Chem.* – 2014. – V.12. I.4. – P.480-491. <https://doi.org/10.2478/s11532-013-0386-1>
3. Хора О.В., Гаврилюк Н.А., Міщенко В.М., Дем'яненко Є.М., Сігарьова Н.В., Терещ М.І., Золотаренко Ан.Д., Золотаренко Ол.Д., Щур Д.В., Горелов Б.М. Функціоналізація вуглецевих наповнювачів для створення полімерних композитів // Матеріали конференції VII “Всеукраїнська наукова конференція актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи”, 19 квітня, 2023. Житомир, Україна. – С. 83-84.
4. Gun'ko V.M., Zarko V.I., Leboda R., Chibowski E., 2001. Aqueous suspension of fumed oxides: particle size distribution and zeta potential. – *Adv. Colloid Interface Sci.* – 2001. – V.91. II-P. 112.
5. Adamson A.W., Gast A.P. Physical Chemistry of Surface. – New York: Wiley, 6th edition, 1997. – 387.
6. Goncharuk O.V., Andriyko L.S., Malysheva M.L., Korotych O.I., Marynin A.I., Zarko V.I., Ukrainets A.I., Gun'ko V.M. Influence of Indifferent Electrolytes on Formation of Coagulative Structures in Aqueous Silica Dispersions. – *French-Ukrainian Journal of Chemistry.* – 2017. – V.5. I.2. – P.40-48.
7. Andriyko L., Kurbanov M., Siora I., Petrik I., Marynin A., Tulaganov S. The influence of the aqueous media acidity on the electrokinetic potential, aggregation and adsorption properties of silica nanoparticles synthesized from metallurgical wastes. – *Journal of Molecular Liquids.* – 2023. – V.392. I.1. – P.123513.

# **НЕОРГАНІЧНА ТА ФІЗИЧНА ХІМІЯ**



# IR SPECTRAL ANALYSIS OF THE FUNCTIONAL GROUP CHARACTERISTICS OF PHOSPHORITES FOR THE DEVELOPMENT OF BIOFERTILIZERS BASED ON THEM

*Andriyko L.S.<sup>1,3</sup>, Tagaev I.A.<sup>2</sup>, Rakhmatullaeva L.B.<sup>2</sup>, Toshburiev Sh.O.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> Chuiko Institute of Surface Chemistry, NAS of Ukraine, [andriykolyuda@gmail.com](mailto:andriykolyuda@gmail.com)

<sup>2</sup> Navoi Innovation University, Uzbekistan

<sup>3</sup> University of Geological Sciences, Uzbekistan

Currently, the production of phosphorus-containing fertilizers in the Republic is limited by the quality of locally available phosphorite from the Central Kyzylkum deposit. This raw material is low in phosphorus and contains a significant amount of undesirable impurities, such as carbonates and chlorine. Due to these characteristics, it is unsuitable for producing high-concentration phosphorus fertilizers. Low-grade phosphorite ore and slime accumulate in large quantities in tailing storage facilities, necessitating new approaches for further processing and utilization.

Activated sludge (AS) is a complex substance composed of a microbial community involved in wastewater treatment, forming an amphoteric colloidal system. It contains approximately 70–90% organic matter, which is part of living organisms represented by 12 main types of protozoa and microorganisms. The primary activators of sludge are bacteria, with up to  $2 \times 10^{14}$  bacteria per cubic meter. These bacteria form clusters surrounded by mucus. The sludge biocenosis hosts numerous species from the genera *Pseudomonas*, *Nitrosomonas*, *Nitrobacter*, *Bacillus*, and others. These microorganisms, in turn, are consumed by flagellates, sarcodines, sucking ciliates, and ciliated protozoa, leading to the clarification and sedimentation of the sludge [1].

To address this issue, a task was set to utilize and transform insoluble minerals, specifically granular francolite ( $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{F}, \text{O})$ ) and calcite ( $\text{CaCO}_3$ ), which are present in low-grade phosphorites of the Central Kyzylkum region. This transformation was achieved using the microflora of activated sludge and biochemical methods applied in municipal wastewater treatment. This biotechnological processing method is based on the ability of certain microorganisms to utilize not only pollutants but also some insoluble mineral compounds found in phosphorites, converting them into a soluble form under specific conditions. During the treatment of phosphorite slime with activated sludge in a liquid-phase solid residue system, optimal growth conditions were maintained. To facilitate aerobic processes, reactors were designed to mimic aeration tanks in wastewater treatment facilities. Biological purification was conducted with minimal energy consumption relative to the mass of removed substances.

Analyses of the initial activated sludge and AS samples after interaction with phosphorites was carried out at the Research Institute of General and Inorganic Chemistry of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan. The results confirmed that the chemical composition of activated sludge is rich in essential macroelements. It contains 11.44% nitrate nitrogen, 13.35% soluble phosphorus pentoxide, 0.95% potassium oxide, 16.21% soluble oxide compounds, and 1.90% magnesium oxide, all of which are readily available for plant uptake in organic form.

Infrared (IR) spectra of activated sludge and phosphorites were analyzed under different mixing conditions, creating an environment conducive to active microbial processes with the application of aeration. Figure 1a presents the IR spectrum of activated sludge, illustrating the distribution of various functional groups and chemical compounds. Humic compounds were detected across the entire spectral range, spanning wavelengths from 500 to 4000  $\text{cm}^{-1}$ . Phosphorus-containing compounds ( $\text{P-O}$ ,  $\text{P=O}$ ,  $\text{P=S}$ ,  $\text{P-O-P}$ ,  $\text{O-P-O}$ ) were identified in the 500–1000  $\text{cm}^{-1}$  area. Nitrogen-containing compounds were represented by  $\text{KNO}_3$ , with a peak at 1000  $\text{cm}^{-1}$ , as well as ammonium, amine, and ammonia groups, which exhibited absorption in the 2400–3500  $\text{cm}^{-1}$  range. Potassium compounds were detected in the form of  $\text{KNO}_3$ , with peaks at 1000 and 1600  $\text{cm}^{-1}$ . Macroelements were distributed over a broad wavelength range and are likely incorporated into aromatic compounds.

Analysis of the IR spectra of phosphorites (Fig. 1b) reveals the presence of the following types of bonds:  $\text{P-O-C}$ ,  $\text{P=O}$ ,  $\text{P-O-P}$ , and  $\text{P-O-Al}$  in the 1200–900  $\text{cm}^{-1}$  range;  $\text{P-F}$  with characteristic peaks between 900–800  $\text{cm}^{-1}$ ;  $\text{P-C}$  bonds appearing in the 720–680  $\text{cm}^{-1}$  area;

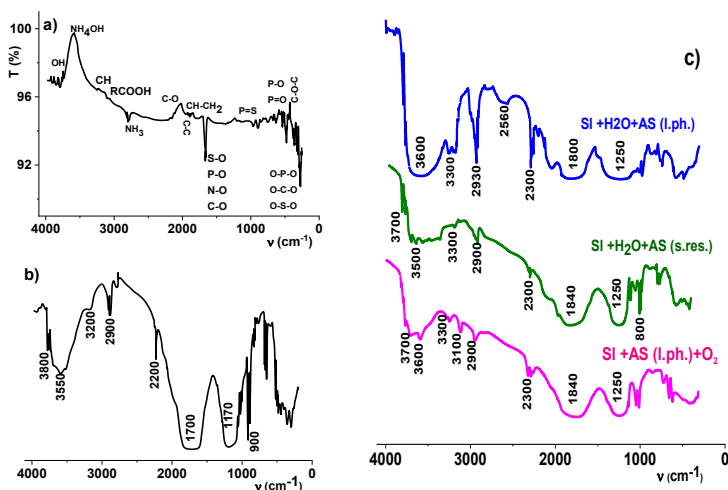


**Fig. 1.** IR spectrum of initial activated sludge, and phosphorite slime (SI) treated by AS (l.ph. – liquid phase, s.res. – solid residue).

The IR spectrum of phosphorite slime after interaction with activated sludge (Fig. 1c) changes significantly due to the sorption of organic and inorganic components, as well as chemical transformations of insoluble forms of minerals into soluble ones. This includes sorption of humic substances, formation of new phosphate and organometallic complexes, and interaction with carbonates and silica. The most noticeable changes are in the ranges of 3600–3000  $\text{cm}^{-1}$  (–OH, –NH), 1700–1400  $\text{cm}^{-1}$  (carbonates, organic compounds), 1200–900  $\text{cm}^{-1}$  (phosphates), 900–400  $\text{cm}^{-1}$  (metal phosphates, Si–O).

The obtained results showed that it is more profitable to use phosphorite slime than low-grade phosphorite ore, since the finely dispersed fraction and primary washing of sludge resulted in faster adaptation of the AS microflora to sludge and more intensive destruction of calcite. For phosphorite ore, intensive changes during air aeration occur on the 4th–6th day, and for slime – on the 4th day. This is evidenced by a significant decrease in phosphorite grains and calcite structure compared to the control variants.

The results of the study of sludge sediments after processing with low-grade phosphorites showed several significant changes in the mineral structure of the processed mixture with the formation of soluble phosphoric anhydride –  $\text{P}_2\text{O}_5$ , calcium, and magnesium oxides. These compounds have different degrees of solubility in water and adjacent environments. It was also found that the carbon dioxide formed in the process was released from the calcite mineral ( $\text{CaCO}_3$ ). Processes indicating the passage of ammonification and denitrification stages were noted, evidence of which is the presence of nitrates ( $\text{NO}_2$ ) and nitrites ( $\text{NO}_3$ ) in the sediment. Centrifugation of sludge sediments with phosphorites showed an increase in the content of phosphorus compounds in the liquid phase by more than 1.5 times.

Thus, the application of the proposed biotechnological method for breaking down insoluble minerals in low-grade phosphorites and their waste not only enables the development of a fundamentally new technology but also presents a cost-effective and environmentally sustainable approach to fertilizer production. This method results in the formation of high-quality organo-mineral fertilizers, which significantly enhance plant growth and development by improving nutrient availability and soil fertility. The economic and ecological benefits of this approach make it a promising alternative for phosphorite processing and agricultural applications.

functional groups P–Cl and P=O–S with absorption peaks at 520–460  $\text{cm}^{-1}$ ; phosphate ions ( $\text{PO}_4^{3-}$ ) detected within 1100–100  $\text{cm}^{-1}$ ; additionally, Si–O–Si bonds correspond to absorption bands at 1090–1020  $\text{cm}^{-1}$ , while carbonate ions ( $\text{CO}_3^{2-}$ ) are observed in the 1450–1410  $\text{cm}^{-1}$  region.

Based on the obtained data, phosphorite is confirmed to contain not only fluorapatite (characteristic bands at 900–1700  $\text{cm}^{-1}$ ) but also other mineral phases, including merwinite and forsterite (460–466  $\text{cm}^{-1}$ ), quartz (1085–2090  $\text{cm}^{-1}$ ), phosphosiderite (790–797  $\text{cm}^{-1}$ ), and several other compounds.

## INFLUENCE OF THE NOVEL TECHNOLOGIES ON THE DEVELOPMENT OF PYRAZOLE COORDINATION CHEMISTRY

*Davydenko Y.M., Vynohradov O.S., Pavlenko V.A.*

Taras Shevchenko National University of Kyiv, [davydenko300808@gmail.com](mailto:davydenko300808@gmail.com)

The development of pyrazole coordination chemistry has been significantly accelerated by the integration of novel technologies, particularly artificial intelligence (AI), advanced spectroscopic techniques, and computational chemistry tools. Pyrazoles, as versatile five-membered heterocycles, play a critical role in the design of coordination compounds due to their diverse electronic properties and ability to form stable complexes with metal ions [1]. One of the most impactful advancements is the use of AI-driven modeling and predictive analytics in ligand design. Machine learning algorithms have enhanced our ability to predict the coordination behavior of pyrazole-based ligands with various metal ions, enabling targeted synthesis. AI tools assist in optimizing reaction conditions and screening large chemical spaces for promising ligand candidates, significantly reducing experimental workload and time [2]. Furthermore, high-resolution spectroscopic techniques, such as X-ray diffraction (XRD) and nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy, have enabled detailed structural elucidation of pyrazole complexes. These methods allow for precise determination of ligand-metal binding modes, electronic interactions, and geometric configurations, contributing to a deeper understanding of structure-function relationships [3]. Computational chemistry plays a pivotal role in advancing pyrazole coordination chemistry. Density functional theory (DFT) and molecular dynamics simulations provide insights into the electronic structures, thermodynamic stabilities, and reactivities of metal-pyrazole complexes. These tools not only predict the properties of novel compounds but also guide experimental chemists in the rational design of coordination systems with tailored functionalities [4]. Additionally, green chemistry technologies have been incorporated into the synthesis of pyrazole-based coordination compounds. Microwave-assisted synthesis and solvent-free methods align with sustainability goals while improving reaction efficiency and yield. Such approaches are crucial for meeting global demands for sustainable and scalable chemical processes [5]. Integrating these novel technologies has enabled the development of metal-pyrazole complexes with diverse applications, including catalysis, drug design, and materials science. For instance, transition metal-pyrazole complexes exhibit catalytic activity in organic transformations, while their photophysical properties make them suitable candidates for optoelectronic materials.

In conclusion, novel technologies are transforming the landscape of pyrazole coordination chemistry, fostering innovation and aligning its development with sustainable practices. These advancements expand the fundamental knowledge of coordination chemistry and unlock new avenues for practical applications in science and industry.

1. Zhang D., Xu Y. Machine Learning in Coordination Chemistry: Accelerating the Design of Ligands and Complexes // *Chemical Reviews*. – 2020. – 120(10). - 5296-5318.
2. Costa R. G., Braga S. S. Pyrazole-based Ligands: Synthesis, Coordination Chemistry, and Applications // *Coordination Chemistry Reviews*. – 2019. – 392. – 19-33.
3. Bailey P. J., Gossage R. A. Sustainability in Coordination Chemistry: Green Synthesis Approaches // *Inorganic Chemistry Frontiers*. – 2021. – 8(14). – 3442-3459.
4. Yang C., Luo Q. The Role of DFT in Metal-Ligand Complexes: A Guide for Experimental Chemists // *Journal of Molecular Modeling*. 2020. – 28(5). – 129-142.
5. Müller C., Weigand J. Spectroscopic Techniques in Coordination Chemistry: Advances and Applications // *Inorganica Chimica Acta*. 2018. – 472. – 34-47.

# PHYSICOCHEMICAL ANALYSIS OF LIQUID MIXTURES. METHOD OF BINARY ADDITIVE QUASI-SOLVATES

*Efimov P.V.*

V.N. Karazin Kharkiv National University, [pavel.v.efimov@karazin.ua](mailto:pavel.v.efimov@karazin.ua)

The method of binary additive quasi-solvates (BAQS) a new approach for analyzing the physicochemical properties of solutions is proposed [1]. Quasi-solvate  $Q_{ij}$  is a hypothetical two-particle structure in which one particle  $i$  is the ‘solute’ and the other particle  $j$  is the ‘solvent’. A set of similar quasi-solvates has the macroscopic property  $F_{ij}$ . The solution is an additive mixture of quasi-solvates with weight functions  $w_{ij}$ .

$$F = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n F_{ij} w_{ij} \quad , \quad (1)$$

Two models have been developed within the BAQS method: with symmetric weight functions (BAQS/S) and with asymmetric weight functions (BAQS/A).

The BAQS/S model can describe multi-component systems:

$$F(x) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left( \bar{F}_{ij}^{\infty} + F_{ji} \right) \frac{x_i x_j^2}{x_i + x_j} \quad (2)$$

The possibility of predicting the properties of multicomponent solutions from data for two-component systems is considered. On the example of volumetric properties of non-electrolyte solutions the possibilities of the method are shown. Effective limiting partial molar volumes of components for mixtures of non-electrolytes are determined. Applications to other solution properties are shown.

The BAQS/A model was used to calculate weight functions for two-component systems:

$$w_{ij} = 2x_i \frac{\bar{F}_{ij} - F_{ii}}{\bar{F}_{ij}^{\infty} - F_{ii}} \quad (3)$$

$$w_{ii} = x_i - \frac{w_{ij} + w_{ji}}{2} \quad (4)$$

The difference in weight functions for BAQS/S and BAQS/A models  $\delta_{ij}$  characterizes the specificity of interparticle interactions. A comparison  $\delta_{ij}$  for various properties of the studied systems using the example of molar volumes and molar heat capacities shows that, despite the difference in the amplitude of the deviations, general patterns are observed in the distribution of the weight functions of quasi-solvates. Parameters  $\delta_{ij}$  show which interactions between components predominate. However, the interpretation of the results obtained requires special caution. The relationship of the BAQS method with other approaches remains to be studied.

Each of the proposed models has its own advantages and limitations.

BAQS/S: describes molar volumes of mixtures, especially for aprotic systems, can be used to predict properties of multicomponent systems, effective on small datasets. Limitations: applicability to other solution properties remains questionable, model parameters differ from those obtained by the independent method, approximation accuracy is inferior to empirical models.

BAQS/A: applicable for any solution properties, informative and illustrative. Limitations: very sensitive to the choice of approximating equation, difficult to interpret results, developed only for two-component systems.

1. Efimov P. Analysis of volumetric properties of liquid mixtures: I. Method of binary additive quasi-solvates. *Kharkiv University Bulletin. Chemical Series.* – 2023. – (41). – 32–41.

## SYNTHESIS AND LUMINESCENCE PROPERTIES OF MATERIALS BASED ON $\text{Eu}^{3+}$ -DOPED $\text{Ba}_3\text{Tb}(\text{PO}_4)_3/\text{SiO}_2$

*Khomenko O.V.<sup>1</sup>, Terebilenko K.V.<sup>2</sup>, Dotsenko V.P.<sup>1</sup>, Berezovskaya I.V.<sup>1</sup>, Efrayushina N.P.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>A.V. Bogatsky Physico-chemical Institute, NAS of Ukraine, [phosphates@bigmir.net](mailto:phosphates@bigmir.net)

<sup>2</sup>Taras Shevchenko National University of Kyiv, Ukraine.

In recent years double phosphates of the general formula  $\text{M}^{\text{II}}_3\text{Ln}(\text{PO}_4)_3$ , where  $\text{M}^{\text{II}} = \text{Sr}^{2+}$ ,  $\text{Ba}^{2+}$ ;  $\text{Ln} = \text{Y}^{3+}$ ,  $\text{Gd}^{3+}$ ,  $\text{Tb}^{3+}$ , have attracted increased attention due to the prospects for their use as phosphors for white light-emitting diodes. Our focus on the material of the composition  $\text{Ba}_3\text{Tb}(\text{PO}_4)_3:\text{Eu}^{3+}$  is caused by a possibility of enhancing the  $\text{Eu}^{3+}$  emission intensity due to the sensibilisation effect of  $\text{Tb}^{3+}$  ions.  $\text{Ba}_3\text{Tb}(\text{PO}_4)_3$  is most often obtained by solid-phase reactions at a high temperature of  $\geq 1200^\circ\text{C}$ . The main disadvantages of this method are relatively large particle sizes and low homogeneity of the final products. The aim of this work was to obtain a composite material based on  $\text{Eu}^{3+}$ -doped  $\text{Ba}_3\text{Tb}(\text{PO}_4)_3$  with a high particle dispersion while maintaining a high luminescence intensity. In order to reduce particle agglomeration, two approaches were applied in this work:

1. "wet chemistry" method, namely thermolysis of a complex precursor for decreasing the synthesis temperature;

2. using of nanosized silicon oxide  $\text{SiO}_2$  as a spatial barrier to particle agglomeration.

The precursor is a complex mixture of barium, terbium, europium and ammonium hydroxides and salts containing metals and phosphorus in a molar ratio corresponding to  $\text{Ba}_3\text{Tb}(\text{PO}_4)_3:\text{Eu}_x^{3+}$  ( $x = 0.01, 0.001$ ). The method for obtaining the precursor from an aqueous solution is described in detail in Ref. [1]. The resulting precursor was mixed with  $\text{SiO}_2$  and calcined at  $790^\circ\text{C}$ . To study the effect on the luminescent properties of  $\text{Ba}_3\text{Tb}(\text{PO}_4)_3:\text{Eu}_x^{3+}$ , two types of silicon dioxide were selected:  $\text{SiO}_2$  (Aldrich) with a particle size of 10-20 nm and Aerosil A-150 (1-200 nm). The silicon dioxide content varied from 95 to 20%.

The diffraction patterns of the obtained samples contain both  $\text{Ba}_3\text{Tb}(\text{PO}_4)_3$  reflections and a wide halo from amorphous silicon dioxide. This confirms that  $\text{SiO}_2$  does not chemically interact during the firing with other components of the mixture. As can be seen from the typical diffraction pattern of the obtained sample (Fig. 1), the main part of the reflections corresponds to the  $\text{Ba}_3\text{Tb}(\text{PO}_4)_3$  phase (JCPDS No. 43-0640). However, trace amounts of  $\text{Ba}_3(\text{PO}_4)_2$  and crystalline  $\text{SiO}_2$  were also detected. The luminescence spectra of  $\text{Ba}_3\text{Tb}(\text{PO}_4)_3:\text{Eu}^{3+}/\text{SiO}_2$  have a complex structure, a typical one is shown in Fig. 2. The spectrum consists of several groups of bands: at 540-547 nm caused by  $^5\text{D}_4 \rightarrow ^7\text{F}_j$  transitions in  $\text{Tb}^{3+}$  ions, as well as bands at 577-710 nm are due to significantly contribution of  $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_j$  ( $j = 0, 1, 2, 3, 4$ ) transitions in  $\text{Eu}^{3+}$  ions in addition to transitions in  $\text{Tb}^{3+}$  ions. Also, a wide band in the 400-465 nm range is observed in the spectra. It was found that it is caused by the presence of  $\text{SiO}_2$  and its intensity is higher for the samples with Aerosil A-150. In the luminescence excitation spectrum of  $\text{Eu}^{3+}$  ions in  $\text{Ba}_3\text{Tb}(\text{PO}_4)_3/\text{SiO}_2$  at  $\lambda_{\text{em}} = 592$  nm, in addition to the narrow bands of  $4\text{f}^6 \rightarrow 4\text{f}^6$  transitions in  $\text{Eu}^{3+}$  ions ( $\lambda_{\text{max}} = 395$  nm), bands of  $4\text{f}^8 \rightarrow 4\text{f}^7 5\text{d}$  and  $^7\text{F}_j \rightarrow ^5\text{D}_{3,4}$  transitions in  $\text{Tb}^{3+}$  ions are observed (Fig. 2,2). This suggests the presence of effective energy transfer from  $\text{Tb}^{3+}$  ions to  $\text{Eu}^{3+}$  ions. This conclusion is also confirmed by the study of the luminescence decay kinetics. The band in the 230-300 nm range is a superposition of the  $2\text{p } \text{O}^{2-} \rightarrow 4\text{f}^6 \text{ Eu}^{3+}$  CTB and the bands of  $4\text{f}^8 \rightarrow 4\text{f}^7 5\text{d}$  transitions in  $\text{Tb}^{3+}$  ions. With the exception of the band in the 400-465 nm region, the luminescence properties of the samples of the composition  $\text{Ba}_3\text{Tb}(\text{PO}_4)_3:\text{Eu}^{3+}/\text{SiO}_2$  are in good agreement with those studied previously [1] for pure  $\text{Ba}_3\text{Tb}(\text{PO}_4)_3:\text{Eu}^{3+}$ . The intensity of the final materials emission is proportional to the content of  $\text{Eu}^{3+}$ -doped  $\text{Ba}_3\text{Tb}(\text{PO}_4)_3$ . Hence, the presence of  $\text{SiO}_2$  during the synthesis does not have a negative affect the emission of  $\text{Eu}^{3+}$  and  $\text{Tb}^{3+}$  ions, so  $\text{SiO}_2$  could be used to reduce particle aggregation of final materials.



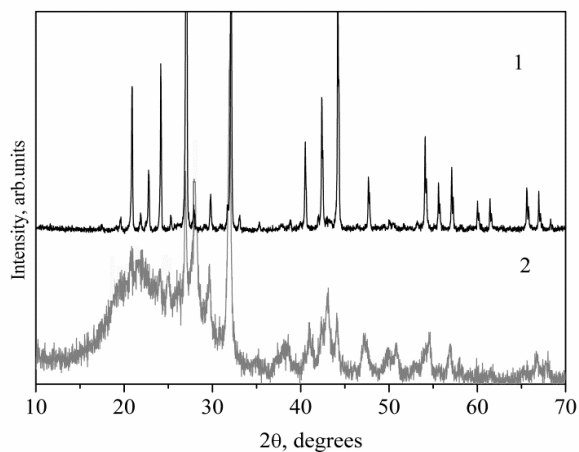


**Fig. 1.** Comparison of XRD patterns of single-phase  $\text{Ba}_3\text{Tb}(\text{PO}_4)_3$  (JCPDS № 43-0640) (1) and composite material  $\text{Ba}_3\text{Tb}(\text{PO}_4)_3:\text{Eu}^{3+}$  80 % +  $\text{SiO}_2$  Aerosil A-150 20 % (2).

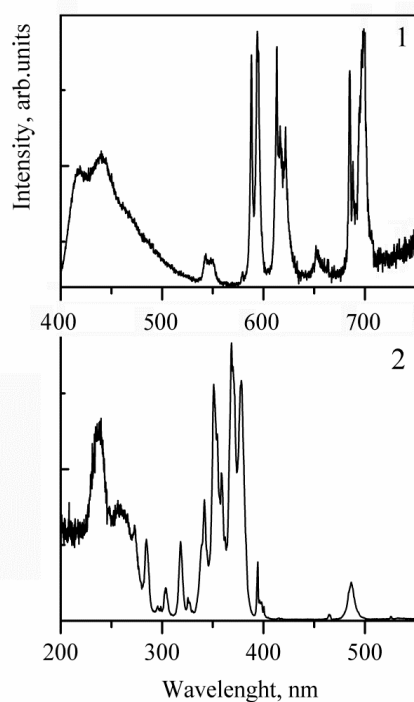


**Fig. 2.** Emission and excitation spectra of composite material  $\text{Ba}_3\text{Tb}(\text{PO}_4)_3:\text{Eu}^{3+}$  80 % +  $\text{SiO}_2$  Aerosil A-150 20 % at 293 K. Spectra recorded at  $\lambda_{\text{exc}} = 380$  nm (1) and  $\lambda_{\text{em}} = 592$  nm (2).

1. Structure and Luminescent Features of  $\text{Ba}_3\text{Tb}(\text{PO}_4)_3$  Doped with  $\text{Eu}^{3+}$  Ions / O.V. Khomenko, I.V. Zatovsky, N.P. Efryushina, V.P. Dotsenko // *Theoretical and Experimental Chemistry*. – 2015. – Vol. 51, № 3. – P. 185-189.



# SYNTHESIS AND THERMODYNAMIC PARAMETERS OF DISSOLUTION OF 1-CYCLOHEXYL-2-METHYL-5-PHENYL-1H-PYRROLE-3-CARBOXYLIC ACID IN ALCOHOLS

*Kostiuk R.<sup>1</sup>, Horak Yu.<sup>2</sup>, Obushak M.<sup>2</sup>, Sobeckho I.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup> Lviv Polytechnic National University, Lviv, Ukraine, [Rostyslav.R.Kostiuk@lpnu.ua](mailto:Rostyslav.R.Kostiuk@lpnu.ua)

<sup>2</sup> Ivan Franko National University of Lviv, Lviv, Ukraine

Analyzing global trends in the pharmaceutical industry, an increasing interest in substances containing a pyrrole fragment has been noted. This is due to their biological activity, particularly antioxidant, anti-inflammatory, and antibacterial properties, making them promising for use in medicinal formulations. The high reactivity of pyrrole is attributed to its aromatic structure, which readily interacts with various electrophilic agents [1].

This paper explores the interaction between solvents and solutes, which forms the foundation of purification techniques, particularly recrystallization from solution [2], as well as the synthesis of compounds of this class. Investigating the interaction of substances with solvents, which act as reaction media, represents a novel scientific approach aimed at optimizing the production of high-purity final compounds in the pharmaceutical industry.

The thermodynamic parameters of the solubility of 1-cyclohexyl-2-methyl-5-phenyl-1H-pyrrole-3-carboxylic acid in 1-butanol, 2-butanol, 1-propanol, and 2-propanol were determined.

1-Cyclohexyl-2-methyl-5-phenyl-1H-pyrrole-3-carboxylic acid **5** was synthesized as shown in Figure 1.

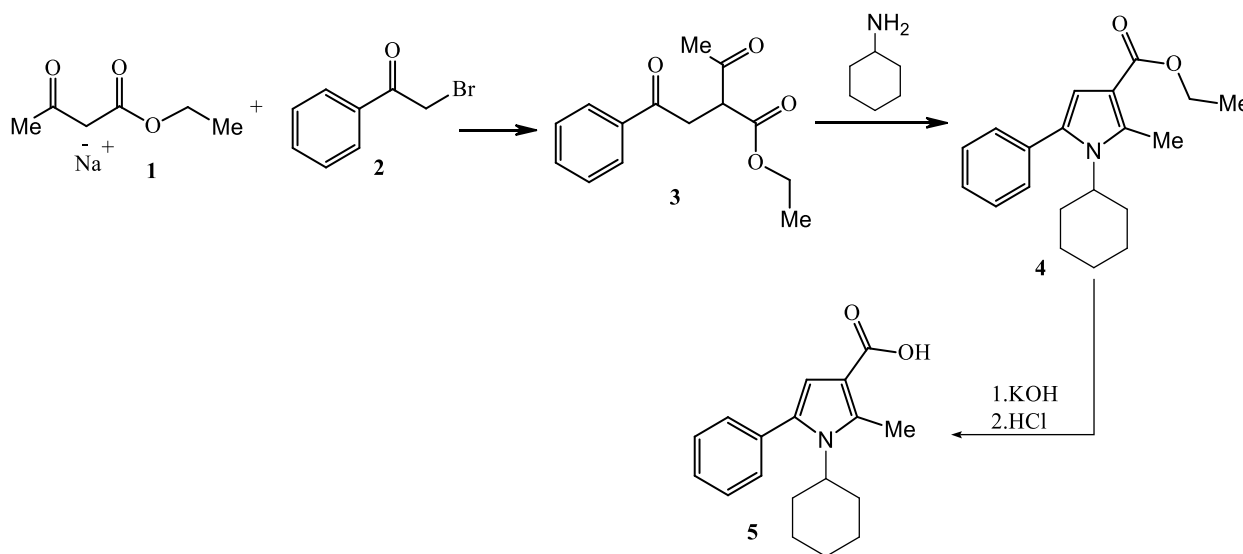


**Fig. 1.** Scheme of the synthesis of 1-cyclohexyl-2-methyl-5-phenyl-1H-pyrrole-3-carboxylic acid **5**.

For the solubility study, representatives of alcohols, which are easily volatile substances, were used. Such as 1-propanol and 2-propanol, which are less toxic than methanol and have similar properties to ethanol, do not form an azeotropic mixture with water and are more readily available. And representatives of higher boiling point, such as 1-butanol which are boiling at 390.85 K and 2-butanol at 411 K.

Table 1 shows the results of calculating the thermodynamic parameters of the dissolution process at 298.15 K.

Table 1

Thermodynamic functions of solubility of 1-cyclohexyl-2-methyl-5-phenyl-1*H*-pyrrole-3-carboxylic acid in organic solvents at 298.15 K

| Solvent    | X <sub>2</sub><br>(298.15) | $\Delta_{sol}H$ ,<br>kJ/mol | $\Delta_{sol}S$ ,<br>J/(mol·K) | $\Delta_{mix}H$ ,<br>kJ/mol | $\Delta_{mix}S$ ,<br>J/(mol·K) |
|------------|----------------------------|-----------------------------|--------------------------------|-----------------------------|--------------------------------|
| 1-Propanol | 0.0082                     | 47.3±1.2                    | 118.8±4.3                      | 14.6±2.3                    | 61.2±5.9                       |
| 1-Butanol  | 0.0123                     | 25.79±0.59                  | 49.9±2.0                       | -6.9±2.9                    | -7.5±4.5                       |
| 2-Propanol | 0.0054                     | 30.86±0.61                  | 60.0±2.1                       | -1.8±2.8                    | 2.6±4.5                        |
| 2-Butanol  | 0.0105                     | 12.99±0.30                  | 5.6±1.0                        | -19.7±2.0                   | -51.8±4.1                      |

The results of the study of the thermodynamic parameters of the solubility of 1-cyclohexyl-2-methyl-5-phenyl-1*H*-pyrrole-3-carboxylic acid in organic solvents are given in Table 2 for the values of  $\Delta_{mix}H$  and the  $\Delta_{mix}S$  are negative values, except for 1-propanol, since the destruction of primary bonds in solvents and the test acid requires less energy than is released during the formation of new ones. Moreover, for 2-propanol, the values of the thermodynamic parameters of mixing are not significantly less than zero, so the new bonds formed are stronger than the original ones. The highest value of the entropy of mixing is observed in a solution for 1-propanol, due to the formation of hydrogen bonds between the polar hydroxyl group in the alcohol and the carbonyl group in the substance under study. The negative values of enthalpy of mixing in solutions of 1- and 2-butanol are associated with the nature of higher alcohols, since an increase in the length of the hydrocarbon radical causes a decrease in polarity, which directly affects the value of the enthalpy of mixing.

1. Ivan B.-C., Barbuceanu S.-F., Hotnog C. M., Anghel A. I., Ancuceanu R. V., et al. New Pyrrole Derivatives as Promising Biological Agents: Design, Synthesis, Characterization, in Silico, and Cytotoxicity Evaluation // *Int. J. Mol. Sci.* – 2022. – Vol. 23, – No. 16. - 8854.

2. Du C. The solubility of ethyl candesartan in mono solvents and investigation of intermolecular interactions // *Liquids*. 2022. – Vol, 2. – No. 4. – P. 404–412.

## TOXIC Cr(VI) IONES PHOTOREDUCTION IN WATER ENVIRONMENTS VIA W<sup>n+</sup>/TiO<sub>2</sub> FILMS ACTIVATED BY PLASMA IRRADIATION

*Petrik I.S.<sup>1</sup>, Eremenko A.M.<sup>1</sup>, Smirnova N.P.<sup>1</sup>, Frolova E.K.<sup>2</sup>,  
Khomych V.O.<sup>2</sup>, Kolomys O.F.<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>Chuiko Institute of Surface Chemistry, NAS of Ukraine, Ukraine, [irinapetrik@ukr.net](mailto:irinapetrik@ukr.net)

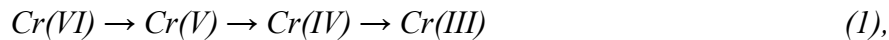
<sup>2</sup>Institute of Physics, NAS of Ukraine, Ukraine,

<sup>3</sup>V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, Ukraine

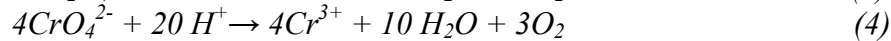
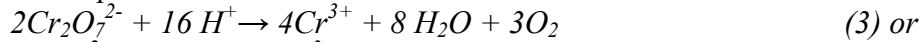
Processes of photocatalytic water purification from contamination such as transition metal ions using photocatalysts based on TiO<sub>2</sub> are becoming more and more widespread. Cr (VI) is one of the most common and toxic. At the same time, the modification of the structure of TiO<sub>2</sub> ions of some transition metals sharply increases its photocatalytic activity. To increase the photocatalytic activity of TiO<sub>2</sub> different approaches are used: modification of the electronic structure by doping with metal ions that shift the absorption towards the visible part of the spectrum, increase of the specific surface area using templating agents, pore formers as well as plasma irradiation treatment. Transition metal ions in the TiO<sub>2</sub> structure improve the efficiency of charge separation, reducing the rate of their recombination. One of these dopants is tungsten, the ionic radius of which is close to that of titanium, while isomorphic substitution of titanium for tungsten in the lattice of titanium dioxide occurs.

The aim of this work is to obtain mesoporous W<sup>n+</sup>/TiO<sub>2</sub> films and study the influence of such factors as dopant concentration, plasma irradiation treatment, and the presence of an electron donor (Na<sub>2</sub>EDTA) on the photocatalytic activity in the Cr<sup>6+</sup> ions reduction reaction under UV irradiation.

Photocatalytic properties of nanocrystalline  $W^{n+}/TiO_2$  films with anatase-type structure were investigated in the process of toxic  $Cr^{6+}$  ions to non-toxic  $Cr^{3+}$  reduction in the presence of  $Na_2EDTA$  as an electron donor under UV irradiation. The photoreaction follows a three-electron mechanism:

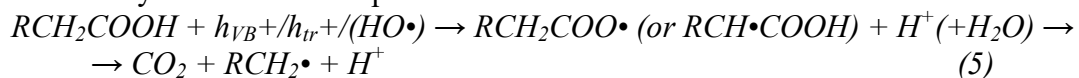


General reaction at  $pH = 2$



The intermediate products of the reaction  $Cr(V)$  and  $Cr(IV)$  have a short lifetime, so they are not recorded in the absorption spectra of the irradiated solution.

As was reported by [1], in the presence of EDTA as hole scavenger more efficient than  $H_2O$  the  $Cr(VI)$  photocatalytic reduction proceed much faster. Strong reducing organic radicals formed from EDTA by oxidation by holes or  $HO\cdot$  Eqs. (5) can be considered as a second factor that increases the efficiency of the reduction process:



An important advantage of this system is the formation of soluble  $Cr(III)$ -EDTA complexes and prevention of  $Cr(III)$  deposition on the  $TiO_2$  surface.

The valence states of tungsten in the structure of the films can additionally accelerate the reaction. There is also an assumption that these active centers can be oxygen vacancies that are actively formed in the structure of doped titanium dioxide when tungsten atoms are embedded in its lattice [2]. However, their concentration increases disproportionately to the concentration of the dopant, after reaching the maximum value it decreases.

It is shown in this work, for  $W^{n+}/TiO_2$  films with a dopant concentration above 1% (Fig. 1 b), the changes in the spectra differ from those for the photoreaction with pure  $TiO_2$  (Fig. 1a) and from films with low dopant concentrations. The intensity of the band at 256 nm decreases from the beginning of the reaction, but over time, the band in the 240 nm region begins to grow with the appearance of isosbestic points 214 nm and 261 nm. At the same time, the reaction rate, controlled by the decrease in the intensity of the  $Cr^{6+}$  band, remains high. This indicates a different reaction mechanism from that characteristic of pure  $TiO_2$  films. A similar pattern is observed for films activated by plasma treatment.

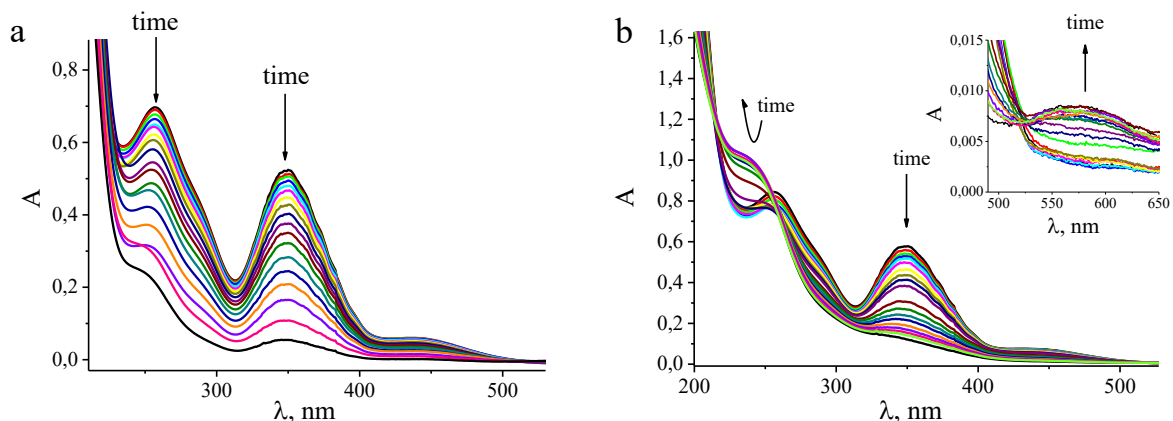
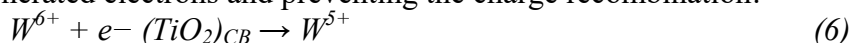


**Fig.1.** Changes in the absorption spectra of the  $K_2Cr_2O_7$  solution over time under UV irradiation in the presence of  $W^{n+}/TiO_2$  0.1% (a) and  $W^{n+}/TiO_2$  10% (b) films.

For the photocatalytic system Cr(VI) – Na<sub>2</sub>EDTA – TiO<sub>2</sub> – UV light, the synergism of photocatalytic reduction and oxidation processes is inherent, so an productive photocatalytic system for wastewater treatment can be realized if both half-reactions, oxidation and reduction, proceed with the same efficiency. The additional formation of electron acceptor centers leads to an increase in the rate of oxidation of the organic electron donor, that is, the rate of the oxidation half-reaction increases, initial amount of Na<sub>2</sub>EDTA is quickly exhausted and the reaction slows down. After new portion of Na<sub>2</sub>EDTA addition the efficiency of the photoreduction process increases dramatically.

All W<sup>n+</sup>/TiO<sub>2</sub> samples show better photoreduction efficiency than the undoped titania films, and that 5-7 mol% W-doped TiO<sub>2</sub> photocatalyst achieves the highest efficiency reducing the half-reaction time by more than eight times. W<sup>n+</sup>/TiO<sub>2</sub> films can be used repeatedly in photocatalysis, the same W<sup>n+</sup>/TiO<sub>2</sub> 5% film did not lose its activity during eight cycles of irradiation.

Tungsten doping can promote the charge pair separation efficiency of TiO<sub>2</sub> photocatalysts by trapping of photogenerated electrons and preventing the charge recombination:



The oxidation of W<sup>5+</sup> to W<sup>6+</sup> by the oxygen present in the reaction mixture can again trap the electrons thus increases the photocatalytic activity. A growing level of dopant shortened the electron-hole pair distance that have detrimental effect due to tunneling between trapped charge carriers and their effective recombination:



The photocatalytic activity of the films irradiated in the Ar:H =1:1 plasma flow exceeds that of similar non-irradiated samples. For pure TiO<sub>2</sub>, the half-reaction time for the reduction of chromium ions is reduced by 16 times, and for doped samples by approximately two times. And although the growth of photoactivity after irradiation with a plasma stream for doped films is lower than for original titanium dioxide, the use of irradiation for all samples increases the efficiency of the photocatalytic reaction.

1. Meichtry J. M., Colbeau-Justin C., Custo G., Litter M.I. Preservation of the photocatalytic activity of TiO<sub>2</sub> by EDTA in the reductive transformation of Cr(VI). Studies by Time Resolved Microwave Conductivity. - *Catal. Today*. – 2014. - V224. – P. 236-243

2. Li Y., Walsh A.G., Li D., Do D., Ma H., Wang C., Zhang P., Zhang X. W-Doped TiO<sub>2</sub> for photothermocatalytic CO<sub>2</sub> reduction - *Nanoscale*. - 2020. - V.12. – P. 17245- 17252.

## ELECTROLYTE COMPONENTS EFFECT ON THE VANADIUM-CONTAINING COATINGS COMPOSITION

*Sakhnenko M., Zhelavskaya Y., Proskurina V., Korohodska A., Rudneva S.*

National Technical University “Kharkiv Polytechnic Institute”, [juliazhelavskaya@gmail.com](mailto:juliazhelavskaya@gmail.com)

Many studies have been devoted to clarifying the forms of the vanadium state in aqueous solutions, but this issue is still far from being fully resolved.

The variety of vanadium ionic forms in solutions leads to the formation of a large number of compounds with other metals where ratio metals-vanadium varies significantly. In addition to that, vanadium ions are known for their ability to form complex compounds with inorganic and organic ligands.

The electrodeposition of cobalt-vanadium coatings from the complex citrate electrolytes with a content of 0,1 mol·dm<sup>-3</sup> vanadium (in terms of metal) in the form of V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> or VOSO<sub>4</sub> was investigated in the current work.

The process was carried out with a current density of 5–15 A·dm<sup>-2</sup> via the galvanostatic mode using cobalt anode at 35–40 °C and pH = 3–3,5. The obtained coating thickness was 9–12 μm. Before electrodeposition, the surface of copper electrodes with an area of 2 cm<sup>2</sup> was polished and degreased.

The chemical composition of the coatings was determined via the energy-dispersive X-ray spectroscopy results, using an Oxford INCA Energy 350 microanalyzer integrated into the scanning electron microscope system (SEM). Electrolysis in galvanostatic mode was performed using stabilized DC power supply B5-47.

It is known that organic acids reduce pentavalent vanadium to trivalent and tetravalent vanadium with the formation of vanadyl-ions [1]. Adding vanadium oxide (V) to a solution of sodium citrate results in the formation of a yellow solution containing vanadate ions, which includes pentavalent vanadium. Over time, the color changed to green and then to dark blue, which may indicate the reduction of vanadium (V) compounds to vanadium (III) with the formation of vanadium (III) complex ions  $[V(C_6H_5O_7)_2]^{3-}$ . This solution of mentioned vanadium (III) complex ion oxidizes by air to form oxovanadium (IV) citrate complexes  $[VO(C_6H_5O_7)_2]^{4-}$  [2, 3].

To prepare the citrate electrolyte, vanadyl sulfate  $VOSO_4$  was used instead of vanadium(V) oxide  $V_2O_5$  [2]. This electrolyte is easier to prepare and stable during operation. This is achieved due to the high vanadyl sulfate solubility in water and the vanadium and cobalt facilitated complexation with citrate ions. Oxovanadium (IV) citrate complexes  $[VO(C_6H_5O_7)_2]^{4-}$  are formed immediately after adding vanadyl sulfate to a sodium citrate solution. The use of vanadyl sulfate also allows to obtain the coatings with a high vanadium content (Fig1). The resulting electrodeposited coatings have a satisfactory quality: uniform, microcrystalline, light-gray, semi-shiny, and rough (Fig 2).

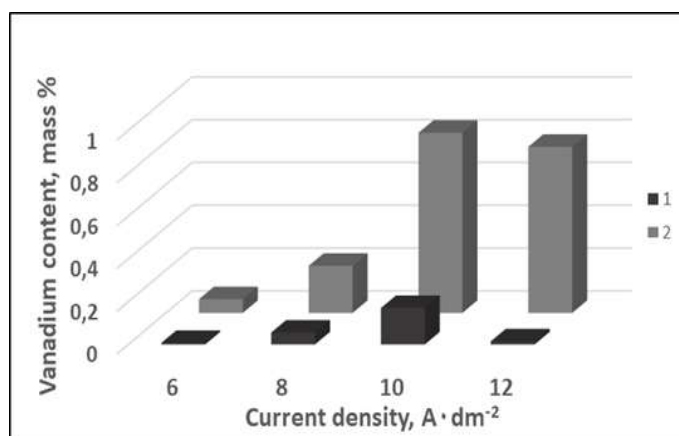


**Fig.1.** Dependence of vanadium content in the coating on current density for electrolytes containing: 1-  $V_2O_5$ ; 2-  $VOSO_4$ .

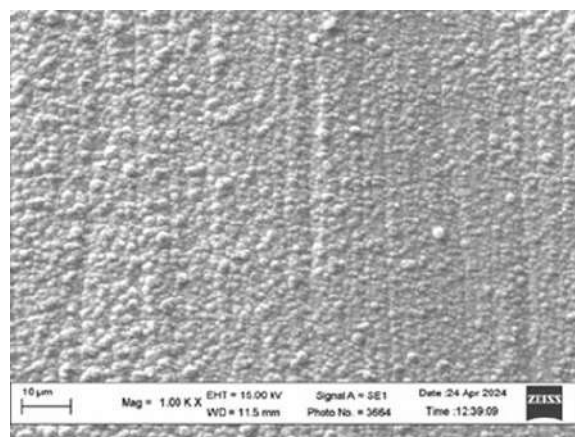


**Fig. 2.** Surface morphology of cobalt- vanadium coating.

The maximum vanadium content in the cobalt-vanadium coatings was achieved at a current density of  $10 \text{ A} \cdot \text{dm}^{-2}$  for both electrolytes: 0,017 and 0,84 mass % for electrolytes containing  $V_2O_5$  or  $VOSO_4$  respectively. Vanadyl sulfate can be recommended for the preparation of the electrolyte for the vanadium-containing coatings deposition.

1. Kolesnik K.V., Mysov O.P., Kalashnikov S.H. Rivnovazhni protsesy utvorennia polivanadativ. Rivnovaha u systemi  $V_2O_5$ - $H_2O$ - $H_2C_2O_4$  // *Voprosy Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii*. – 2013. – № 4. – P.119-123.

2. Sakhnenko M.D., Zhelavska Yu.A., Zyubanova S.I., Horokhivska N.V., Rudneva S.I. Cobalt-vanadium coating deposition via programmed electrolysis mode // *Voprosy khimii i khimicheskoi tekhnologii*. –2024. – No. 3. – P. 165-170.

3. Selbin J., Morpurgo L. Spectral studies of low symmetry oxovanadium (IV) complexes. // *J. Inorg. Nucl. Chem.* –1965. – V. 27. – P. 673-678.



### EXPERIMENTAL AND ANALYTICAL ENERGETIC STUDY OF 3-(5-PHENYL-1-(FURAN-2-YLMETHYL)-1H-PYRROL-2-YL)PROPANOIC ACID

*Shevchenko D.S.<sup>1</sup>, Horak Yu. I.<sup>2</sup>, Obushak M.D.<sup>2</sup>, Pyshna D.B.<sup>1</sup>, Sobechko I.B.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Lviv Polytechnic National University, Ukraine, [dmytro.s.shevchenko@lpnu.ua](mailto:dmytro.s.shevchenko@lpnu.ua)

<sup>2</sup>Ivan Franko National University of Lviv, Ukraine

The values of the enthalpies of combustion ( $\Delta_c H_{298.15}^0$ ) and formation in the condensed state ( $\Delta_f H_{298.15}^0(cr)$ ) are one of the quantitative fundamental energy characteristics of compounds. To ensure optimal industrial-scale synthesis and processing processes, the key factor is the availability of reliably determined thermodynamic parameters of combustion and formation in the condensed state. In the pharmaceutical industry, organic compounds capable of exhibiting biological activity are one of the components in the production of drugs. Part of them consists of a group of polysubstituted pyrrole derivatives, in particular arylpyrroles. Compounds of this group are capable of exhibiting antibacterial, anti-inflammatory, analgesic and antitumour effects [1]. Such diversity of biological activity is explained by the increased ability of pyrrole to participate in electrophilic substitution reactions with the formation of a number of new derivatives [2]. That is why the scientific community continues to explore new ways of synthesis, as such compounds have the potential to be used as components of drugs with new pharmacological properties. Among a number of arylpyrrole derivatives, in work [3] by predicting the therapeutic effect for 3-(5-phenyl-1-(furan-2-ylmethyl)-1H-pyrrol-2-yl)propanoic acid, pharmacophore properties were established for the treatment of hypertension, multiple sclerosis, colitis, and systemic lupus erythematosus.

The lack of available data on the fundamental thermodynamic parameters of combustion and formation for 3-(5-phenyl-1-(furan-2-ylmethyl)-1H-pyrrol-2-yl)propanoic acid motivated us to perform the first experimental thermodynamic study for this compound.

The determination of  $\Delta_c H_{298.15}^0$  and  $\Delta_f H_{298.15}^0(cr)$  was carried out by using the bomb combustion calorimetry with the precision combustion calorimeter B-08-MA. Before the beginning of the experimental studies, a series of combustions of standard reference benzoic acid was carried out to determine the energy equivalent of the calorimetric system ( $W = 10347 \pm 7$  J/V). Under normal conditions, the acid under study is in a solid aggregate state. Therefore, each sample was powdered in a chalcedony mortar, tableted, placed in a platinum cup and tied with a cotton thread before the experiments. To the bottom of the calorimetric bomb 1 ml of distilled water was added. A cup with the acid was placed inside the bomb, and then filled with oxygen to 30 atmospheres. The ignition of each sample was carried out using cotton thread through nichrome wire by discharging capacitors.

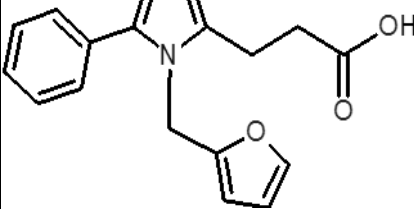
After each combustion experiment, combustion by-products were analysed to quantify carbon mono- and dioxide, soot and nitric acid. The mass of  $CO_2$  produced during combustion was determined by the standard Rossini method using absorption tubes with a weighing accuracy of  $\pm 2 \cdot 10^{-4}$  g. The molecule of the acid under study contains a nitrogen atom, which is why the aqueous solution at the bottom of the calorimetric bomb was titrated with a 0.1N KOH solution to quantify the formed  $HNO_3$ . Soot formed and deposited on the side surfaces of the platinum cup. Its weight was determined by weighing it before and after the cup was calcined on an open burner with an accuracy of  $\pm 5 \cdot 10^{-6}$  g.

Based on the results of the experiments, the value of the standard enthalpy of combustion of the acid under study was determined ( $\Delta_c H_{298.15}^0 = -9083.9 \pm 3.0$  kJ/mol). Based on it, the standard value of  $\Delta_f H_{298.15}^0(cr)$  was calculated, which was  $-428.9 \pm 3.0$  kJ/mol. The described methodology for determining the thermodynamic parameters of compounds involves the use of high-precision experimental equipment and qualified researchers to process experimental data. For this reason, a common analytical method for calculating the enthalpy of formation in the condensed state, namely the Domalski method, was applied. The following table shows the group contributions that were used for the calculation.



Table

Group contributions of the Domalski method, kJ/mol

|  | Group                                                            | $\Delta_f H_{298.15}^0$<br>(cr) | Group                                    | $\Delta_f H_{298.15}^0$<br>(cr) |
|-----------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------|---------------------------------|------------------------------------------|---------------------------------|
|                                                                                   | C <sub>b</sub> – (C <sub>b</sub> ) <sub>2</sub> (H)              | 6.53                            | C – (C)(CO)(H) <sub>2</sub>              | –27.90                          |
|                                                                                   | C <sub>b</sub> – (C <sub>d</sub> )(C <sub>b</sub> ) <sub>2</sub> | 20.27                           | CO – (C)(O)                              | –153.60                         |
|                                                                                   | C <sub>d</sub> – (C <sub>b</sub> )(C <sub>d</sub> )(N)           | –3.95                           | O – (CO)(H)                              | –282.15                         |
|                                                                                   | C <sub>d</sub> – (C <sub>d</sub> ) <sub>2</sub> (H)              | 17.53                           | C – (C)(C <sub>d</sub> )(H) <sub>2</sub> | –21.60                          |
|                                                                                   | N – (C <sub>d</sub> ) <sub>2</sub> (C)                           | 88.92                           | Cd – (Cd)(O)(H)                          | 25.50                           |
|                                                                                   | C <sub>d</sub> – (C <sub>d</sub> )(C)(N)                         | –3.95                           | O – (Cd) <sub>2</sub>                    | –157.30                         |
|                                                                                   | C – (N)(C <sub>b</sub> )(H) <sub>2</sub>                         | –33.31                          | Furan ring                               | 10.70                           |
|                                                                                   | C – (O)(C <sub>d</sub> )                                         | 27.91                           | Pyrrole ring                             | –17.84                          |

According to the group contributions by the Domalski method, the calculation of the enthalpy of formation in the condensed state gives  $\Delta_f H_{298.15}^0$  (cr) = –426.3 kJ/mol. This method results in a slight deviation (2.6 kJ/mol) from the experimentally determined value. The deviation may be due to the presence of a furan substituent in the first position of the pyrrole ring, which causes some tension in the molecule and the possible formation of an intramolecular hydrogen bond.

In conclusion, the experimental results of the fundamental thermodynamic parameters for 3-(5-phenyl-1-(furan-2-ylmethyl)-1H-pyrrol-2-yl)propanoic acid obtained by bomb combustion calorimetry are useful for optimisation calculations of synthesis and processing processes. Additionally, with regard to environmental considerations for the management of expired pharmaceuticals containing carbon, hydrogen, oxygen and nitrogen atoms, information on the calorific value of the acid under study will be useful for disposal by combustion in boilers to ensure a balanced use of energy released during heat exchange processes [4].

1. Bharathi Hassan Ganesh, Raj A. G., Baladhandapani Aruchamy, Pandurangan Nanjan, Drago, C., & Ramani, P Pyrrole: A Decisive Scaffold for the Development of Therapeutic Agents and Structure-Activity Relationship // *ChemMedChem*. – 2023. - 19(1).

2. Ji Ram V., Sethi A., Nath M., Pratap R. Five-Membered Heterocycles // *The Chemistry of Heterocycles*. 2019. - 149–478.

3. Sitar A., Shevchenko D., Matiichuk V., Skrypska O., Lesyuk O., Khomyak S., Lytvyn R., Sobechko I., Synthesis of 3-(1R-5-phenyl-1-N-pyrrol-2-yl)propanoic acids and prediction of their biological activity // *Visnyk of the Lviv University. Series Chemistry*. - 65(1). - 223–230.

4. Zhuang X., Song Y., Zhan H., Yin X., & Wu C. (2019). Synergistic Effects on the Co-Combustion of Medicinal Biowastes with Coals of Different Ranks // *Renewable Energy*. -2019. - 140. - 380–389.

## SPECTROSCOPY AND ELECTROCHEMICAL BEHAVIOUR OF HETEROMETALLIC Cu/Cd AND Cu/Zn COMPLEXES WITH AN O-VANILLIN-DERIVED LIGAND

*Vassilyeva O.Y., Buvaylo E.A., Kokozay V.N.*

Taras Shevchenko National University of Kyiv, [olha.vasylieva@knu.ua](mailto:olha.vasylieva@knu.ua)

In our ongoing research on the molecular design and applications of heterometallic complexes, new combinations of metal centres and suitable ligands are explored in search of factors governing the resulting functional properties [1, 2]. Two novel heterometallics, [Cu<sup>II</sup>Cd<sup>II</sup>CIL(*o*-Van)(OAc)]·3H<sub>2</sub>O (**1**) and [Cu<sup>II</sup><sub>2</sub>Zn<sup>II</sup>Cl<sub>2</sub>L<sub>2</sub>(*o*-Van)(OAc)] (**2**), were synthesised by the interaction of a copper powder, Cd(II) or Zn(II) acetate and HL formed *in situ* in the Schiff base condensation of



display clear irreversible oxidation peaks at +0.73 V for both compounds. A similar behaviour was observed in the case of the electrochemical response of the Fe(III) complex with *o*-vanillin [FeCl(*o*-Van)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)] measured in the same conditions, where the irreversible peak at +0.71 V in the anodic scan was associated with the oxidation of the *o*-vanillin ligand [4]. In the CVs of both complexes, the ill-defined oxidation waves at  $E_{pa} \sim +0.42$  V coupled with corresponding reduction waves at  $E_{pc} \sim +0.40$  V demonstrating the non-equivalent current intensity of cathodic and anodic peaks indicate a quasi-reversible redox process which can be related to the  $L^-$  ligand.

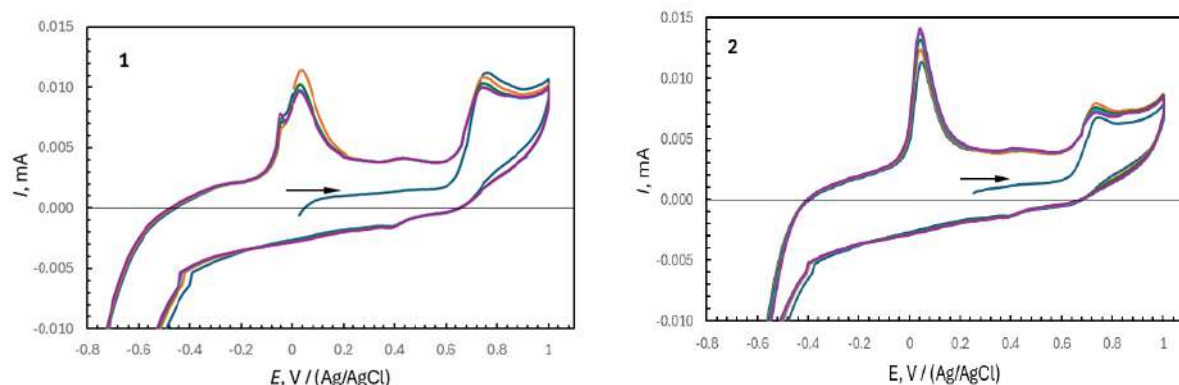


**Fig. 3.** CV of **1** and **2**, 0.1 mM in methanol mixed with 0.1 M acetate buffer (pH 4) and NaClO<sub>4</sub> (70:28:2) as supporting electrolyte at a glassy carbon electrode and Ag/AgCl as reference electrode (scan rate: 100 mV s<sup>-1</sup>;  $T = 298$  K).

During the first cycle, in the backward scans the reduction of Cu<sup>2+</sup> to Cu<sup>0</sup> occurs at potentials lower than -0.40 V and is followed by a reoxidation process at 0.033 (**1**) and 0.045 V (**2**). The reduction from Cu<sup>2+</sup> to Cu<sup>0</sup> is superimposed with the solvent reduction peak evidenced by comparing the CVs of the complexes and supporting electrolyte solutions in methanol, while the reduction to Cu<sup>1+</sup> is not observed. This finding may be due to the presence of acetate ions in **1** and **2**, as it was reported that the Cu<sup>2+</sup>/Cu<sup>+</sup> redox process was not observed for the copper(II) acetate complex with bis(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)methane ligand [5]. During the anodic scan of the CV of **1**, a shoulder at -0.036 V is detected, which evolves into a separate peak in further cycles. The origin of the related oxidation process was not recognized.

1. Vassilyeva O.Y., Buvaylo E.A., Kokozay V.N., Skelton B.W., Sobolev A.N., Bieńko A., Ozarowski A. Ferro- vs. antiferromagnetic exchange between two Ni(II) ions in a series of Schiff base heterometallic complexes: what makes the difference? // *Dalton Trans.* – 2021. – 50, № 8. – P. 2841–2853.
2. Nesterova O.V., Kasyanova K.V., Makhankova V.G., Kokozay V.N., Vassilyeva O.Y., Skelton B.W., Nesterov D.S., Pombeiro A.J. Stereospecific sp<sup>3</sup> C–H oxidation with *m*-CPBA: a Co<sup>III</sup> Schiff base complex as pre-catalyst vs. its Co<sup>III</sup>Cd<sup>II</sup> heterometallic derivative // *Appl. Catal. A: Gen.* – 2018. – 560. – P. 171–184.
3. Sydoruk T.V., Buvaylo E.A., Kokozay V.N., Vassilyeva O.Yu., Skelton B. Bis{1-2-methoxy-6-[(methylimino)methyl]phenolato}bis{2-methoxy-6-[(methylimino)methyl]phenolato} dicopper(II) // *Acta Cryst.* – 2013. – E69, № 10. – m551-m552.
4. Nesterova O.V., Vassilyeva O.Y., Skelton B.W., Bieńko A., Pombeiro A.J., Nesterov D.S. A novel *o*-vanillin Fe (III) complex catalytically active in C–H oxidation: exploring the magnetic exchange interactions and spectroscopic properties with different DFT functionals // *Dalton Trans.* – 2021. – 50, № 41. – P. 14782–14796.
5. Sandoval-Rojas A.P., Ibarra L., Cortés M.T., Macias M.A., Suescun L., Synthesis and characterization of copper(II) complexes containing acetate and N, N-donor ligands, and their electrochemical behavior in dopamine detection // *J. Electroanal. Chem.* – 2017. – 805. – P. 60–67.

## THERMODYNAMICS OF PHASE EQUILIBRIA OF SYSTEMS POLYETHYLENE GLYCOL – SODIUM TARTRATE – WATER

*Yukhno G.D., Krasnopyorova A.P., Efimova N.V.*

V.N. Karazin Kharkiv National University, [alla.p.krasnopyorova@karazin.ua](mailto:alla.p.krasnopyorova@karazin.ua)

The search for new extraction systems for the isolation and concentration of substances is one of the most important and urgent scientific and practical problems of modern physical chemistry. New systems should be as effective as traditional ones, and at the same time more environmentally friendly, not contain toxic extractants and solvents, and waste solutions should be easily recycled or destroyed. Two-phase aqueous systems based on water-soluble polymers that do not contain organic solvents, which are usually volatile, explosive and toxic, meet these requirements most fully. Such water-soluble polymers include polyethylene glycol (PEG), a cheap, accessible and non-toxic polymer, which, when salted out of aqueous electrolyte solutions, forms a second liquid phase. By its chemical nature, polyethylene glycol is a nonionic linear polyether with terminal hydroxyl groups, and the properties of polyethylene glycol as an extractant are close to the properties of low-molecular ethers and alcohols. Therefore, these systems can be successfully used for the extraction and concentration of metals from aqueous media.

However, it is impossible to draw an unambiguous conclusion from the data available in the literature about which salts and at what concentrations are capable of forming heterogeneous systems with PEG, and how various factors affect the processes of phase formation.

The paper presents experimental studies of the conditions for the formation of aqueous two-phase systems based on sodium tartrate and polyethylene glycols of various molecular weights (2000, 4000, 6000) and the influence of various factors (solution pH, glycol molecular weight, temperature) on the process; the results of studying an aqueous two-phase system containing polyethylene glycols 2000, 4000 or 6000, sodium tartrate and water at temperatures of 298.15 K, 308.15 K, 318.15 K.

Binodal curves were constructed by turbidimetric titration with visual control of cloud points. Based on the experimental data, phase diagrams were constructed that reflect the influence of the polymer molecular weight, temperature and pH of the medium on the position of binodal curves in the studied systems. It was shown that the experimental curves coincide with those theoretically calculated using the Sechenov (1) and Banroft (2) equations with a high degree of accuracy:

$$\ln\left(\frac{c_p^{top}}{c_p^{bot}}\right) = k_p(c_p^{bot} - c_p^{top}) + k_s(c_s^{bot} - c_s^{top}) \quad (1)$$

$$\left(\frac{w_3^{bot}}{w_2^{bot}}\right) = k_2 \left(\frac{w_3^{top}}{w_1^{top}}\right)^r \quad (2)$$

It has been established that an increase in temperature and molecular weight of the polymer leads to an increase in the heterogeneity region.

It has been shown that an increase in the degree of polymerization of polyethylene glycol promotes earlier formation of a heterogeneous system at the same concentration compared to a polymer with a lower molecular weight.

When studying the effect of the acidity of the medium on phase equilibria, it was shown that as the transition to a more alkaline region occurs, an increase in the heterogeneity regions on the corresponding phase diagrams is observed. It should be considered that two effects are at work here. An analysis of the effect of temperature showed that its increase also promotes earlier phase separation.

The thermodynamic mixing functions and thermodynamic interaction parameters were calculated within the framework of the Flory-Huggins theory, which is based on a number of assumptions [1].

To find the values of the generalized parameters of polymer-mixed solvent interactions as a function of the system composition, a procedure for determining the concentration of components in coexisting phases was developed.

By preliminary calculation of generalized thermodynamic parameters of interaction in wide concentration ranges, individual parameters of salt – water and salt – polymer interaction, as well as  $\Delta\chi$  – effect at different temperatures were calculated.

Based on the obtained results, it was found that with increasing temperature,  $\Delta\chi$  – effect also increases, i.e. the difference in interaction energies in polymer – water and salt – water systems also increases, which causes earlier stratification.

Based on the calculated thermodynamic parameters of interaction, the Gibbs energy ( $\Delta G_{\text{mix}}$ ), enthalpy ( $\Delta H_{\text{mix}}$ ) and entropy ( $\Delta S_{\text{mix}}$ ) of mixing were calculated.

It was shown that the process of formation of a heterogeneous system in polyethyleneglycol – sodium tartrate – water systems is mainly due to a positive change in enthalpy when mixing the components.

1. Zafarani-Moattar M.T., Tolouei S. Liquid liquid equilibria of aqueous two-phase systems containing polyethylene glycol 4000 and di-potassium tartrate, potassium sodium tartrate, or di-potassium oxalate: Experiment and correlation. – *Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry*. – 2008. – V. 32. – P. 655-660.

### СИСТЕМИ $\text{La}(\text{Pr})_2\text{Se}_3 - \text{In}_2\text{Se}_3 - \text{SnSe}_2$

*Блашко Н.М., Марчук О.В.*

Волинський національний університет імені Лесі Українки, [Blashko.Nazarii@vnu.edu.ua](mailto:Blashko.Nazarii@vnu.edu.ua)

Вивчення багатокомпонентних систем та кристалічної структури нових сполук є ключовим етапом у створенні баз даних матеріалів з заданими властивостями. Такий підхід дозволяє глибше зрозуміти взаємодії між компонентами, їхню структурну організацію та вплив на фізико-хімічні характеристики матеріалів.

Вивчення систем  $\text{La}(\text{Pr})_2\text{Se}_3 - \text{In}_2\text{Se}_3 - \text{SnSe}_2$  є одним із етапів з'ясування природи та закономірностей хімічної взаємодії компонентів у системах  $\text{R}_2\text{X}_3 - \text{C}^{\text{III}}_2\text{X}_3 - \text{D}^{\text{IV}}\text{X}_2$  ( $\text{R} - \text{PЗМ}$ ;  $\text{C}^{\text{III}} - \text{Ga, In}$ ;  $\text{D}^{\text{IV}} - \text{Si, Ge, Sn}$ ;  $\text{X} - \text{S, Se}$ ) і умов утворення та існування нових тетраарних нецентросиметричних фаз [1–6]. У роботі представлено результати дослідження фазових рівноваг у зазначених квазіпотрійних системах за температури 770 К з метою пошуку нових матеріалів і тетраарних фаз, що можуть бути використані у напівпровідникових технологіях.

Вихідними компонентами досліджуваних систем є бінарні напівпровідникові сполуки, кристалічна структура яких вивчена та описана у літературі [7–15]. Також у літературних джерелах існують відомості про утворення тернарних сполук у відповідних бінарних системах [16–19]. Ця інформація наведена в таблиці.

Синтез сплавів для дослідження фазових рівноваг проводили з простих речовин із вмістом основного компонента не менше 99,99 ваг. % в електричній муфельній печі з програмним управлінням технологічними процесами МП-30. Загальна маса вихідної шихти становила 1,0 г. Синтез здійснювали у вакуумованих до залишкового тиску ( $10^{-2}$  Па) кварцевих контейнерах згідно технологічного режиму: нагрів до температури 700 °С зі швидкістю 40 °С/год; витримка 10 годин за температури 700 °С; нагрів до температури 1100 °С зі швидкістю 12 °С/год; витримка 2 години за температури 1100 °С; охолодження до температури 500 °С зі швидкістю 6 °С/год; гомогенізуючий відпал 240 годин за температури 500 °С; гартування контейнерів із синтезованим матеріалом у воду за кімнатної температури (без розбивання контейнера). Рентгенофазовий аналіз зразків проводили за дифрактограмами, що були отримані в межах  $2\Theta = 10 - 80^\circ$  на рентгенівській установці ДРОН 4-13 з параметрами зйомки:  $\text{CuK}_\alpha$ -випромінювання; крок сканування – 0,05°, експозиція у кожній точці – 4 с.



Кристалографічні характеристики бінарних та тернарних сполук систем  
 $\text{La}(\text{Pr})_2\text{Se}_3 - \text{In}_2\text{Se}_3 - \text{SnSe}_2$

| Сполука                                     | Структурний тип                 | Просторова група | Періоди комірки, Å |                    |          | Лі-ра  |
|---------------------------------------------|---------------------------------|------------------|--------------------|--------------------|----------|--------|
|                                             |                                 |                  | <i>a</i>           | <i>b</i> ; $\beta$ | <i>c</i> |        |
| $\text{La}_2\text{Se}_3$                    | $\text{Th}_3\text{P}_4$         | $I\bar{4}3d$     | 9.0521             | —                  | —        | [7, 8] |
| $\text{Pr}_2\text{Se}_3$                    | $\text{Th}_3\text{P}_4$         | $I\bar{4}3d$     | 8.9117             | —                  | —        | [9]    |
| $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$             | $\text{Bi}_2\text{Te}_3$        | $R\bar{3}m$      | 4.00               | —                  | 28.33    | [10]   |
| $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$             | —                               | $P6_3$           | 16.00              | —                  | 19.24    | [11]   |
| $\beta\text{-In}_2\text{Se}_3$              | —                               | $P6_3/mmc$       | 4.03               | —                  | 19.10    | [12]   |
| $\gamma\text{-In}_2\text{Se}_3$             | $\text{Al}_2\text{S}_3$         | $P6_1$           | 7.11               | —                  | 19.34    | [13]   |
| $\delta\text{-In}_2\text{Se}_3$             | $\text{Ta}_2\text{S}_2\text{C}$ | $P\bar{3}m1$     | 4.03               | —                  | 9.56     | [14]   |
| $\text{SnSe}_2$                             | $\text{CdI}_2$                  | $P\bar{3}m1$     | 3.811              | —                  | 6.136    | [15]   |
| $\text{La}_3\text{In}_{1.67}\text{Se}_7$    | $\text{La}_3\text{CuSiS}_7$     | $P6_3$           | 10.50              | —                  | 6.50     | [16]   |
| $\text{La}_4\text{In}_{4.72}\text{Se}_{13}$ | —                               | $Pbam$           | 12.445             | 22.146             | 4.1969   | [17]   |
| $\text{Pr}_3\text{InSe}_6$                  | $\text{ScU}_3\text{S}_6$        | $Pnnm$           | 17.4130            | 14.275             | 4.109    | [18]   |
| $\text{Pr}_3\text{InSe}_6$                  | —                               | $P2_1/c$         | 4.109              | 14.275; 109.27°    | 17.891   | [19]   |

Для визначення фазового складу синтезованих сплавів використовували теоретично розраховані дифрактограми вихідних бінарних та тернарних сполук. Обробку даних здійснювали за допомогою пакету програм Powder Cell 2.4 [20].

Проведені дослідження дали змогу побудувати ізотермічні перерізи діаграм стану квазіпотрійних систем  $\text{La}(\text{Pr})_2\text{Se}_3 - \text{In}_2\text{Se}_3 - \text{SnSe}_2$  за температури 770 К, які представлено на рис. 1-2. Найбільша розчинність спостерігається на основі  $\text{In}_2\text{Se}_3$  та  $\text{SnSe}_2$  (~25 мол. %).

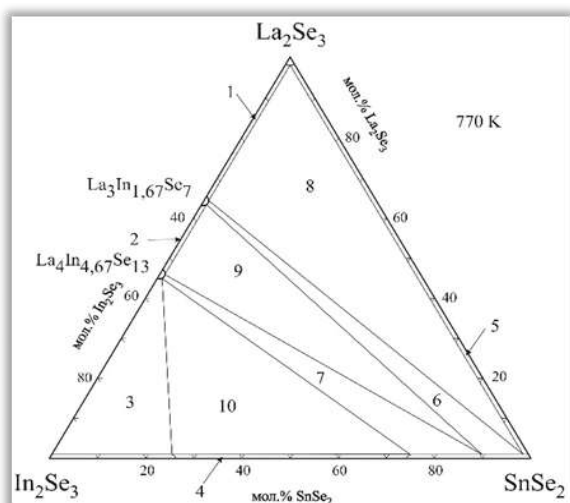


**Рис. 1.** Ізотермічний переріз системи  $\text{La}_2\text{Se}_3 - \text{In}_2\text{Se}_3 - \text{SnSe}_2$ :

1 –  $\text{La}_2\text{Se}_3 + \text{La}_3\text{In}_{1.67}\text{Se}_7$ ; 2 –  $\text{La}_3\text{In}_{1.67}\text{Se}_7 + \text{La}_4\text{In}_{4.67}\text{Se}_{13}$ ; 3 –  $\text{In}_2\text{Se}_3 + \text{La}_4\text{In}_{4.67}\text{Se}_{13}$ ; 4 –  $\text{In}_2\text{Se}_3 + \text{SnSe}_2$ ; 5 –  $\text{La}_2\text{Se}_3 + \text{SnSe}_2$ ; 6 –  $\text{SnSe}_2 + \text{La}_3\text{In}_{1.67}\text{Se}_7$ ; 7 –  $\text{SnSe}_2 + \text{La}_4\text{In}_{4.67}\text{Se}_{13}$ ; 8 –  $\text{La}_2\text{Se}_3 + \text{SnSe}_2 + \text{La}_3\text{In}_{1.67}\text{Se}_7$ ; 9 –  $\text{SnSe}_2 + \text{La}_3\text{In}_{1.67}\text{Se}_7 + \text{La}_4\text{In}_{4.67}\text{Se}_{13}$ ; 10 –  $\text{In}_2\text{Se}_3 + \text{SnSe}_2 + \text{La}_4\text{In}_{4.67}\text{Se}_{13}$ .

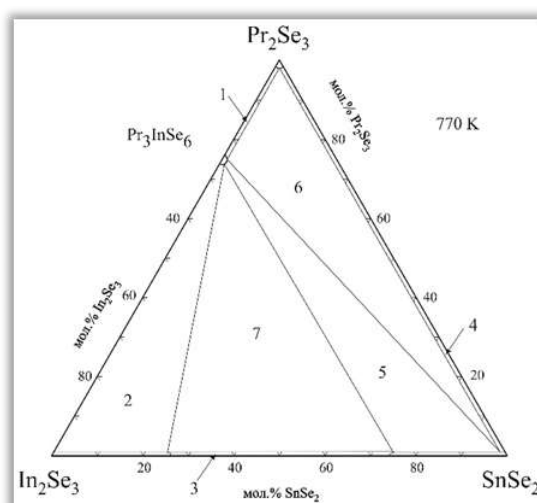


**Рис. 2.** Ізотермічний переріз системи  $\text{Pr}_2\text{Se}_3 - \text{In}_2\text{Se}_3 - \text{SnSe}_2$ :

1 –  $\text{Pr}_2\text{Se}_3 + \text{Pr}_3\text{InSe}_6$ ; 2 –  $\text{In}_2\text{Se}_3 + \text{Pr}_3\text{InSe}_6$ ; 3 –  $\text{In}_2\text{Se}_3 + \text{SnSe}_2$ ; 4 –  $\text{Pr}_2\text{Se}_3 + \text{SnSe}_2$ ; 5 –  $\text{SnSe}_2 + \text{Pr}_3\text{InSe}_6$ ; 6 –  $\text{Pr}_2\text{Se}_3 + \text{SnSe}_2 + \text{Pr}_3\text{InSe}_6$ ; 7 –  $\text{In}_2\text{Se}_3 + \text{SnSe}_2 + \text{Pr}_3\text{InSe}_6$ .

Ізотермічний переріз діаграми стану системи  $\text{La}_2\text{Se}_3 - \text{In}_2\text{Se}_3 - \text{SnSe}_2$  представляє собою сукупність двох двофазних рівноваг  $\{\text{SnSe}_2$  (ПГ  $P\bar{3}m1$ ; 164) +  $\text{La}_3\text{In}_{1.67}\text{Se}_7$  (ПГ  $P6_3$ ; 173)} і  $\{\text{SnSe}_2$  (ПГ  $P\bar{3}m1$ ; 164) +  $\text{La}_4\text{In}_{4.67}\text{Se}_{13}$  (ПГ  $Pbam$ ; 55)} та трьох трифазних полів  $\{\text{La}_2\text{Se}_3$  (ПГ  $I\bar{4}3d$ , 220) +  $\text{SnSe}_2$  (ПГ  $P\bar{3}m1$ ; 164) +  $\text{La}_3\text{In}_{1.67}\text{Se}_7$  (ПГ  $P6_3$ ; 173)},  $\{\text{SnSe}_2$  (ПГ  $P\bar{3}m1$ ; 164)



+  $\text{La}_3\text{In}_{1.67}\text{Se}_7$  (ПГ  $P6_3$ ; 173) +  $\text{La}_4\text{In}_{4.67}\text{Se}_{13}$  (ПГ  $Pbam$ ; 55)} і  $\{\text{In}_2\text{Se}_3$  (ПГ  $P6_1$ ; 169) +  $\text{SnSe}_2$  (ПГ  $P\bar{3}m1$ ; 164) +  $\text{La}_4\text{In}_{4.67}\text{Se}_{13}$  (ПГ  $Pbam$ ; 55)}.

Ізотермічний переріз діаграми стану системи  $\text{Pr}_2\text{Se}_3 - \text{In}_2\text{Se}_3 - \text{SnSe}_2$  представляє собою двофазну рівновагу  $\{\text{SnSe}_2$  (ПГ  $P\bar{3}m1$ ; 164) +  $\text{Pr}_3\text{InSe}_6$  (ПГ  $Pnnm$ ; 58)} що триангулює концентраційний трикутник на два трифазних поля  $\{\text{Pr}_2\text{Se}_3$  (ПГ  $I43d$ , 220) +  $\text{SnSe}_2$  (ПГ  $P\bar{3}m1$ ; 164) +  $\text{Pr}_3\text{InSe}_6$  (ПГ  $Pnnm$ ; 58)} і  $\{\text{In}_2\text{Se}_3$  (ПГ  $P6_1$ ; 169) +  $\text{SnSe}_2$  (ПГ  $P\bar{3}m1$ ; 164) +  $\text{Pr}_3\text{InSe}_6$  (ПГ  $Pnnm$ ; 58)}.

1. Блашко Н.М., Марчук О.В., Коржов А.А. Система  $\text{Pr}_2\text{Se}_3 - \text{Ga}_2\text{Se}_3 - \text{GeSe}_2$ . Збірник матеріалів VIII Всеукраїнської наукової конференції “Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи”. Житомир: 1 травня 2024 р. 2024. с.106-108.

2. Блашко Н.М., Марчук О.В. Система  $\text{Pr}_2\text{Se}_3 - \text{Ga}_2\text{Se}_3 - \text{SnSe}_2$ . Збірник матеріалів VII Міжнародної (XVII Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених “Хімічні проблеми сьогодення”. Вінниця: 19-21 березня 2024 р. 2024. с.44.

3. Блашко Н.М., Марчук О.В. Система  $\text{Pr}_2\text{Se}_3 - \text{Ga}_2\text{Se}_3 - \text{SnSe}_2$ . Збірник матеріалів VII Міжнародної науково-практичної конференції молодих учених, студентів та аспірантів “Актуальні проблеми розвитку природничих та гуманітарних наук”. Луцьк: 10 листопада 2023 р. 2023. с.166-168.

4. Блашко Н.М., Олексеюк І.Д., Гулай Л.Д., Марчук О.В. Фазові рівноваги в системі  $\text{Pr}_2\text{S}_3 - \text{In}_2\text{S}_3 - \text{GeS}_2$  за температури 770 К. Матеріали V Міжнародної науково-практичної конференції молодих учених та студентів “Актуальні задачі сучасних технологій”. Тернопіль: 17-18 листопада 2016 р. 2016. с.36-37.

5. Блашко Н.М., Марчук О.В., Олексеюк І.Д. Системи  $\text{La}(\text{Pr})_2\text{S}_3 - \text{In}_2\text{S}_3 - \text{SnS}_2$  за 770 К. Збірник матеріалів Всеукраїнської наукової конференції “Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи”. Житомир: 17-18 травня 2017 р. 2017. с.86-88.

6. Chen M., Li P., Zhou L., Li L., Chen L. Structure change induced by terminal sulfur in noncentrosymmetric  $\text{La}_2\text{Ga}_2\text{GeS}_8$  and  $\text{Eu}_2\text{Ga}_2\text{GeS}_7$  and nonlinear-optical responses in middle infrared // *Inorg. Chem.* - 2011. - Vol. 50(24). - P.12402-12404

7. Basancon P., Adolphe C., Flahaut J., Laruelle P. Sur les varietes alpha et beta des sulfures  $\text{L}_2\text{S}_3$  des terres rares // *Mat. Res. Bull.* - 1969. - Vol. 4. - P.227-238.

8. Massalsky T.B. Binary Alloy Phase Diagrams, American Society for Metals // *Metal Park*. 1986. - Vol. 1. - P.3.

9. Folchmandt M., Schleid T. Single crystals of  $\text{C-La}_2\text{Se}_3$ ,  $\text{C-Pr}_2\text{Se}_3$  and  $\text{C-Gd}_2\text{Se}_3$  with cation-deficient  $(\text{Th}_3\text{P}_4)$ -type structure // *Z. Anorg. Allg. Chem.* - 2001. - Vol. 627. - P. 1411-1413.

10. Popovic S., Tonejc A., Grzeta-Plenkovic B., Trojko R. Revised and new crystal data for indium selenides // *J. Applied Crystallography*. - 1979. - Vol. 12. - P.416-420.

11. Semiletov S.A. Crystal structure of the low-temperature form of  $\text{In}_2\text{Se}_3$ . *Kristallografiya*. - 1961. - Vol. 6. - P.158-160.

12. De Blasi C., Manno D., Micocci G., Tepore A. Electron diffraction study of  $\text{In}_2\text{Se}_3$  melt grown crystals // *J. Crystal Growth*. - 1989. - Vol. 96. - P.947-952.

13. Likforman A., Carre D., Hillel R. Structure cristalline du seleniure d'indium  $\text{In}_2\text{Se}_3$  // *Acta Cryst. B*. - 1978. - Vol. 34. - P.1-5.

14. Likforman A., Guittard M. Chimie minerale. Diagramme de phases du systeme indium-selenium // *C. R. Acad. Sci.* - 1974. - Vol. 279. - P.33-35.

15. Liu Huifang, Chang L.Y. Phase relations in systems of tin chalcogenides // *J. Alloys Compd.* - 1992. - Vol. - 185(1). - P.183-190.

16. Patrie M., Guittard M. Chimie minerale. Sur les composes du type  $\text{Ce}_6\text{Al}_{10/3}\text{S}_{14}$  // *CR Hebd. Seances Acad. Sci. C*. - 1969. - Vol. 268. - P.1136-1138.

17. Gulay L.D., Huch M.R., Oleksyuk I.D., Pietraszko A. Crystal structures of the  $\text{R}_4\text{In}_{4.72}\text{Se}_{13}$  (R = La and Ce) compounds // *J Alloys Compd.* - 2007. - Vol. - 429. - P.216-220.

18. Aleandri L.E., Ibers J.A. Synthesis and structure of  $\text{Pr}_3\text{InSe}_6$ : corrigendum // *J. Solid State Chem.* - 1989. - Vol. - 81. - P.317-317.

19. Aleandri L.E., Ibers J.A. Synthesis and structure of  $\text{Pr}_3\text{InSe}_6$  // *J. Solid State Chem.* - 1989. - Vol. 79. - P.107-111.

20. Kraus W., Nolze G. POWDER CELL – a program for the representation and manipulation of crystal structures and calculation of the resulting X-ray powder patterns // *J. Appl. Cryst.* - 1996. - Vol. 29(3). - P.301-303.

# РЕАКЦІЇ НАСИЧЕНИХ ВУГЛЕВОДНІВ І БЕНЗОЛУ ТА АЛКІЛБЕНЗОЛІВ З ПЕРМАНГАНАТОМ КАЛІЮ У ВОДНИХ РОЗЧИНАХ

*Волкова Л.К., Онейда Й.О.*

Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАН України,  
[volkovalk@gmail.com](mailto:volkovalk@gmail.com)

Кінетику реакцій у водних розчинах перманганату калію ( $\text{KMnO}_4$ ) при  $\text{pH } 5 - 7$  і  $70^\circ\text{C}$  досліджено [1], визначено ізотопні ефекти водню (КІЕ), субстратні селективності, продукти окислення вуглеводнів насичених ( $\text{AlkH}$ , позначених стисло як  $\text{C}_3$ ,  $\text{C}_4$  і т. п.), алканів ( $n$ - $\text{AlkH}$ ) із лінійним ланцюгом зв'язків  $\text{C}-\text{C}$  у ряді від пропану  $\text{C}_3\text{H}_8$  до гексану  $n\text{-C}_6\text{H}_{14}$  ( $n\text{C}_6$ ), ізоалканів ( $i$ - $\text{AlkH}$ ) із розгалуженим ланцюгом  $\text{C}-\text{C}$  у ряді ізобутан  $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$  ( $i\text{C}_4$ ),  $i\text{-C}_5\text{H}_{12}$  ( $i\text{C}_5$ ); циклоалканів ( $c$ - $\text{AlkH}$ ),  $c\text{-C}_5\text{H}_{10}$  ( $c\text{C}_5$ ),  $c\text{-C}_6\text{H}_{12}$  ( $c\text{C}_6$ ),  $c\text{-C}_7\text{H}_{14}$  ( $c\text{C}_7$ ) та метилциклогексану ( $\text{MeC}_6\text{H}_{11}$ ); а також ароматичних ( $\text{ArH}$ ), бензолу  $\text{C}_6\text{H}_6$  і алкілзаміщених бензолу  $(\text{Alk})_n\text{C}_6\text{H}_{6-n}$ . За експериментальними даними зроблено наступні висновки [1]: 1) активною частинкою є аніон  $\text{MnO}_4^-$ ; 2)  $\text{MnO}_4^-$  атакує зв'язки  $\text{C}-\text{H}$  алкільних замісників  $\text{Me}$  ( $\text{CH}_3$ ),  $\text{Et}$  ( $\text{C}_2\text{H}_5$ ),  $i\text{-Pr}$  ( $(\text{CH}_3)_2\text{CH}$ ) та  $t\text{-Bu}$  ( $(\text{CH}_3)_3\text{C}$ ) у  $\text{AlkC}_6\text{H}_5$  ( $\text{AlkPh}$ ) та  $\text{Me}$  – у поліметилбензолах з відривом атома  $\text{H}$ , що узгоджується з великими КІЕ, які дорівнюють 13, 11, 17 для пар толуол/толуол- $d_8$ ,  $m$ -ксилол/ $m$ -ксилол- $d_{10}$ ,  $n$ -ксилол/ $n$ -ксилол- $d_{10}$  відповідно; в  $\text{AlkH}$  зв'язок  $\text{C}-\text{H}$  атакується кисневим лігандом – містком від  $\text{MnO}_4^-$  у лінійному або циклічному перехідному стані, що забезпечує для пари  $c\text{-C}_6\text{H}_{12}/c\text{-C}_6\text{D}_{12}$   $\text{KIE} = 5,4 \pm 0,8$ ; 3) вуглеводні насичені окислюються до кетонів, ароматичні – до відповідних бензолкарбонових кислот.

У даній роботі порівняно запропоновані механізми гомолізу  $\text{C}-\text{H}$  для реакцій  $\text{ArH}$  ( $\text{C}_6\text{H}_6$  і  $(\text{Alk})_n\text{C}_6\text{H}_{6-n}$ ) та  $\text{AlkH}$  ( $n$ -,  $iso$ -,  $cyclo$ -) у розчинах  $\text{KMnO}_4 - \text{H}_2\text{O}$  з використанням кореляційного аналізу залежностей [2] логарифмів вимірених констант швидкості вуглеводнів ( $\text{RH}$ ) із  $\text{MnO}_4^-$  (позначено  $k_-$ ) [1], а також «парціальних», віднесених до  $\text{C}-\text{H}$  однієї природи, констант швидкості ( $i\text{-}k_-$ ) від енергії гомолітичної дисоціації відповідних зв'язків  $\text{C}-\text{H}$  ( $D_{\text{C}-\text{H}}$ ) насичених або ароматичних у  $\text{C}_6\text{H}_6$ , (табл..)

**Таблиця**

Константи швидкості  $k_-$  (л/моль·с) у реакціях вуглеводнів у водному розчині  $\text{KMnO}_4$  при  $70^\circ\text{C}$  [1]. Величини  $D_{\text{C}-\text{H}}$  (ккал/моль) для найслабкішого зв'язку  $\text{C}-\text{H}$  у  $\text{RH}$

| №  | ArH                                                  | $D_{\text{C}-\text{H}}$ | ( $n_{\text{C}-\text{H}}$ ) | $k_- \cdot 10^2$ | AlkH                        | $D_{\text{C}-\text{H}}$ | ( $n_{\text{C}-\text{H}}$ ) | $k_- \cdot 10^3$ |
|----|------------------------------------------------------|-------------------------|-----------------------------|------------------|-----------------------------|-------------------------|-----------------------------|------------------|
| 1  | Бензол $\text{C}_6\text{H}_6$ , PhH                  | 112,9                   | 6                           | 0,0007           | $\text{C}_2\text{H}_6$      | 100,5                   | $p$ -, 6                    | <0,1             |
| 2  | Толуол MePh                                          | 89,7                    | $p$ -, 3                    | 1,3              | $\text{C}_3\text{H}_8$      | 98,1                    | $s$ -, 2                    | 1,6              |
| 3  | Етилбензол EtPh                                      | 85,4                    | $s$ -, 2                    | 17               | $\text{C}_4\text{H}_{10}$   | 98,3                    | $s$ -, 4                    | 3,2              |
| 4  | Ізопропілбензол ( $i\text{-Pr}$ )Ph                  | 84,3                    | $t$ -, 1                    | 18               | $\text{C}_5\text{H}_{12}$   | 99,2                    | $s$ -, 6                    | 5,8              |
| 5  | Третбутилбензол ( $t\text{-Bu}$ )Ph                  | 98,6                    | $p$ -, 9                    | 0,02             | $\text{C}_6\text{H}_{14}$   | 98                      | $s$ -, 8                    | 7                |
| 6  | $o$ -Ксилол $1,2(\text{Me})_2\text{C}_6\text{H}_4$   | 88,4                    | $p$ -, 6                    | 4                | $i\text{-C}_4\text{H}_{10}$ | 95,7                    | $t$ -, 1                    | 12               |
| 7  | $m$ -Ксилол $1,3(\text{Me})_2\text{C}_6\text{H}_4$   | 88,6                    | $p$ -, 6                    | 2,8              | $i\text{-C}_5\text{H}_{12}$ | 95,8                    | $t$ -, 1                    | 14               |
| 8  | $n$ -Ксилол $1,4(\text{Me})_2\text{C}_6\text{H}_4$   | 88,4                    | $p$ -, 6                    | 4,6              | $c\text{-C}_5\text{H}_{10}$ | 95,6                    | $s_c$ -, 10                 | 12,5             |
| 9  | Псевдокумол $1,2,4(\text{Me})_3\text{C}_6\text{H}_3$ | 89,4                    | $p$ -, 9                    | 6,4              | $c\text{-C}_6\text{H}_{12}$ | 99,5                    | $s_c$ -, 12                 | 7,3              |
| 10 | Мезитилен $1,3,5(\text{Me})_3\text{C}_6\text{H}_3$   | 89,1                    | $p$ -, 9                    | 9,2              | $c\text{-C}_7\text{H}_{14}$ | 94                      | $s_c$ -, 14                 | 31               |
| 11 | Дурол $1,2,4,5(\text{Me})_4\text{C}_6\text{H}_2$     | 88                      | $p$ -, 12                   | 25               | $\text{MeC}_6\text{H}_{11}$ | 94,3                    | $t_c$ -, 1                  | 23               |

На рис.1 представлено залежності у координатах  $\lg k_-$  від  $D_{\text{C}-\text{H}}$ , як для реакцій ароматичних вуглеводнів (лінії **1** і **3**), так і насичених (**2**). Із 10-и досліджених  $\text{AlkH}$  поза лінією **2** знаходяться нормальні  $\text{C}_4\text{H}_{10}$ ,  $\text{C}_5\text{H}_{12}$ ,  $\text{C}_6\text{H}_{14}$  і циклогексан із максимальною величиною  $D_{\text{C}-\text{H}}$ . Решта, пропан, ізобутан та  $i\text{-C}_5\text{H}_{12}$ , циклопентан і  $c\text{-C}_7\text{H}_{14}$  та метилциклогексан  $\text{MeC}_6\text{H}_{11}$ , тобто  $\text{AlkH}$ , що мають вторинні ( $\text{C}_{\text{sec}}-\text{H}$ ), третинні ( $\text{C}_{\text{tert}}-\text{H}$ ), а також циклічні вторинні ( $(\text{C}_{\text{sec}})_{\text{cyc}}-\text{H}$ ) і третинні ( $(\text{C}_{\text{tert}})_{\text{cyc}}-\text{H}$ ) зв'язки, описуються лінійною кореляцією з коефіцієнтом детермінації  $R^2 = 0,954$  (**2**). Алкілбензоли представлено 2-а залежностями з більш високими коефіцієнтами  $R^2$ , 0,988 для  $\text{Me}$ -,  $\text{Et}$ -,  $i\text{Pr}$ -,  $t\text{Bu}$ -бензолів та ксилолів (**1**) і 0,997 – для псевдокумолу, мезитилену і дуролу (**3**). Парціальні константи ( $i\text{-}k_-$ ) оцінили [2] із вимірених  $k_-$ , які, виходячи з принципу адитивності, є сумою добутоків

константи ( $i-k_H$ )<sub>-</sub> й кількості відповідних C<sub>i</sub>-H ( $n_{C_i-H}$ ), табл.

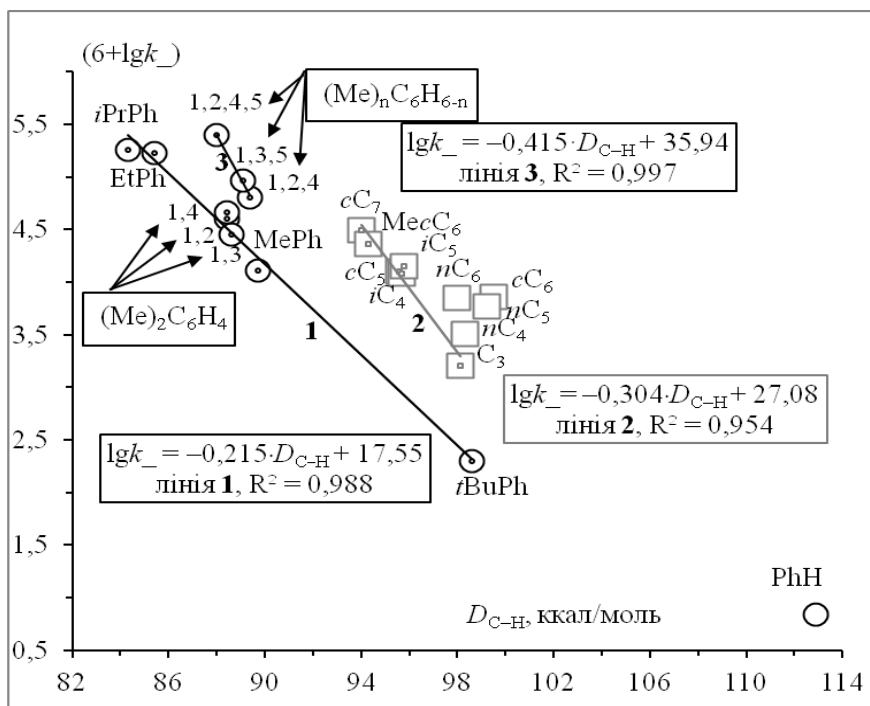


**Рис. 1.** Кореляція логарифма констант швидкості  $k_-$  в реакції  $MnO_4^-$  із алкілбензолами (лінії 1 і 3) та з алканами і циклоалканами (лінія 2).

На рис. 2 реакції  $MnO_4^-$  із усіма алкілбензолами досить добре описуються однією кореляцією  $lg(i-k_H)_-$  від  $D_{C_i-H}$ ,  $R^2 = 0.974$ , лінія 1, що узгоджується із гомолізом C-H, тоді як реакції з AlkH вимагають врахування інших механізмів, окрім відриву атома H.

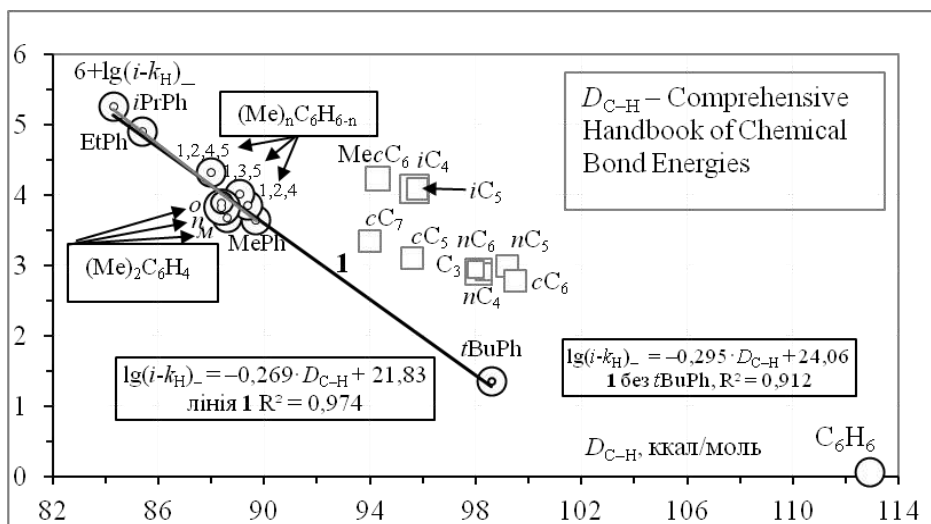


**Рис. 2.** Кореляції логарифмів  $(s-k_H)_-$ ,  $(t-k_H)_-$ ,  $(p-k_H)_-$  по зв'язках (C<sub>sec</sub>-H) для EtPh, (C<sub>tert</sub>-H) – i-PrPh, (C<sub>prime</sub>-H) для решти AlkH від їх  $D_{C_i-H}$  (лінія 1) та логарифмів  $(s-k_H)_-$  для n-алканів C<sub>3</sub>–C<sub>6</sub>,  $(s_c-k_H)_-$  – циклоалканів cC<sub>5</sub>–cC<sub>7</sub>,  $(t-k_H)_-$  – ізо-алканів C<sub>4</sub>, C<sub>5</sub>,  $(t_c-k_H)_-$  – MeC<sub>6</sub>H<sub>11</sub> від  $D_{C_i-H}$ .

1. Катализ. Механизмы гомогенного и гетерогенного катализа, кластерные подходы. Отв. ред. В.П. Кухарь. – К.: Наук. думка, 2002. – 541 с.

2. Волкова Л.К., Опейда Й.О. Кореляційний аналіз для вивчення механізму реакцій алкілбензолів із перманганатом калію. VIII Всеукраїнська наукова конференція «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи». Житомир. 2024. С.108-110.

## ДРУГЕ ПРАВИЛО ПОЛЯРНОСТІ ІЗОМОРФНИХ ЗАМІЩЕНЬ В АСИМЕТРИЧНИХ РЕГУЛЯРНИХ ТВЕРДИХ РОЗЧИНАХ

Гетьман Є.І., Радіо С.В.

НДЛ «Хімія поліоксометалатів і складнооксидних систем» науково-дослідної частини, Донецький національний університет імені Василя Стуса, Україна, [radio@donnu.edu.ua](mailto:radio@donnu.edu.ua)

Аналіз результатів експериментальних досліджень ізоморфних заміщень в асиметричних регулярних твердих розчинах систем  $\text{MgCO}_3\text{--CaCO}_3$ ,  $\text{MgO--CaO}$ ,  $\text{TiO}_2\text{--ZrO}_2$ ,  $\text{PbS--PbTe}$ ,  $\text{MnSe--PbSe}$ ,  $\text{MgS--CaS}$ ,  $\text{FeCO}_3\text{--CaCO}_3$ ,  $\text{BaTiO}_3\text{--CaTiO}_3$ ,  $\text{VC--NbC}$ , представлений раніше в [1], а також результати досліджень у вольфраматних системах  $\text{CaWO}_4\text{--SrWO}_4$ ,  $\text{CaWO}_4\text{--PbWO}_4$ ,  $\text{CaWO}_4\text{--BaWO}_4$  [2] (рис. 1–3), показали, що має місце не лише асиметрія куполів розпаду за кількістю розчиненої речовини (полярний або напрямлений ізоморфізм за Гольдшмідтом), але й за температурою розпаду (стабільності) твердих розчинів. Вона виявляється вищою для компонента з меншим радіусом заміщуваного катіона (наприклад, кальцію, що показано на рис. 1–3), що узгоджується з другим правилом полярності ізоморфних заміщень в асиметричних регулярних твердих розчинах, запропонованим нами в роботі [1].

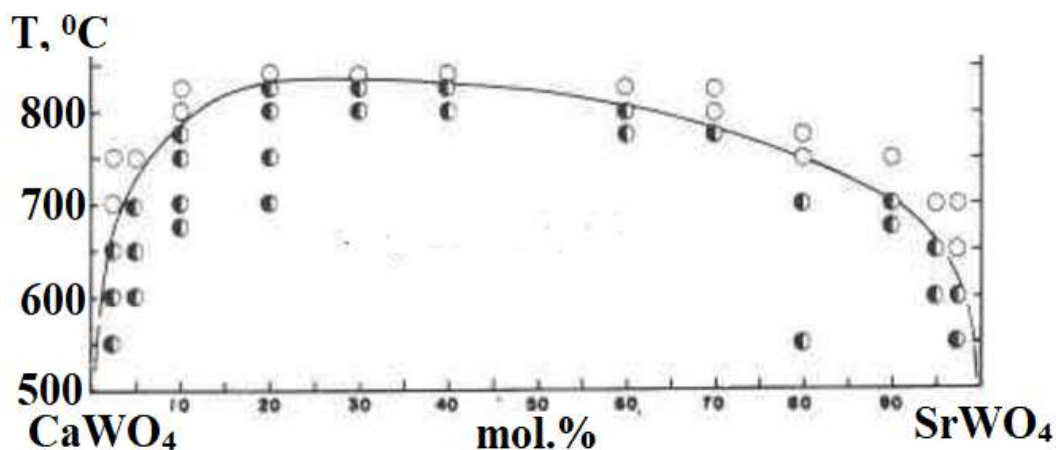


Рис. 1. Фазовий склад системи  $\text{CaWO}_4\text{--SrWO}_4$  [2].

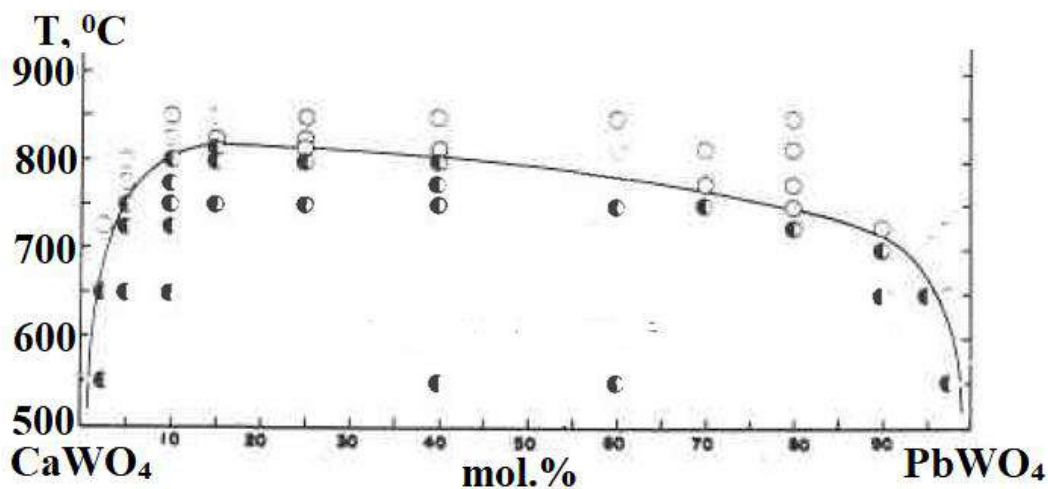


Рис. 2. Фазовий склад системи  $\text{CaWO}_4\text{--PbWO}_4$  [2].

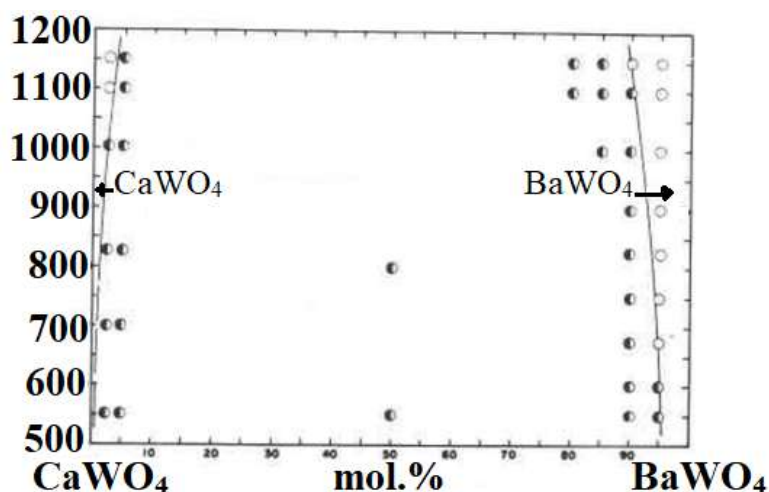


Рис. 3. Фазовий склад системи  $\text{CaWO}_4$ – $\text{BaWO}_4$  [2].

Як видно з рис. 4, проведені нами за методикою, описаною в [3], розрахунки температур розпаду залежно від складу систем  $\text{Ba}_{1-x}(\text{Na}_{0.5}\text{Ln}_{0.5})_x\text{MoO}_4$  (Ln – рідкісноземельний елемент) не лише підтвердили наявність вищезазначеного явища у всіх 14 системах  $\text{Ba}_{1-x}(\text{Na}_{0.5}\text{Ln}_{0.5})_x\text{MoO}_4$ , але й дозволили сформулювати друге правило полярності таким чином: «Температура розпаду асиметричного регулярного твердого розчину є вищою на основі компонента з меншим розміром заміщуваної структурної одиниці і нижчою – з більшим, а різниця температур при зростанні відмінностей в іонних радіусах заміщуваних структурних одиниць збільшується від кількох десятків до кількох сотень градусів».

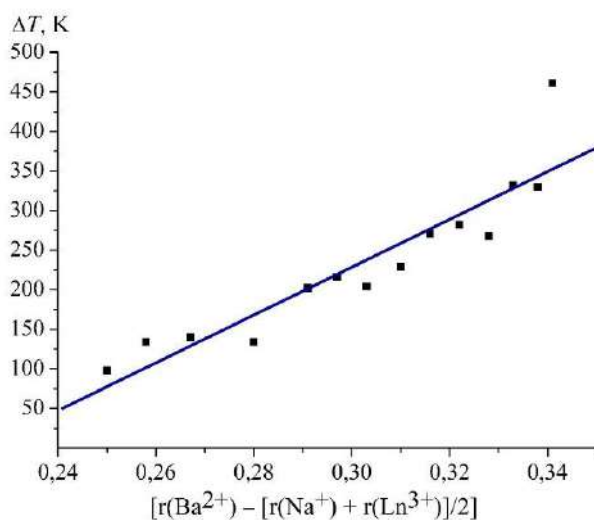


Рис. 4. Залежність різниць температур (K) розпаду твердих розчинів  $\text{Ba}_{1-x}(\text{Na}_{0.5}\text{Ln}_{0.5})_x\text{MoO}_4$  на основі  $\text{BaMoO}_4$  ( $x = 0.05$ ) та  $\text{Na}_{0.5}\text{Ln}_{0.5}\text{MoO}_4$  ( $x = 0.95$ ) від різниці радіусів іонів  $\text{Ba}^{2+}$  та напівсуми радіусів іонів  $\text{Na}^+$  та  $\text{Ln}^{3+}$ .

1. Get'man E., Radio S. Systems  $\text{Ba}_{1-x}(\text{Na}_{0.5}\text{Ln}_{0.5})_x\text{MoO}_4$  and the second rule of polarity of isovalent isomorphism. *Book of abstracts of XXI International Conference on Inorganic Chemistry Ukraine (XXI ICICU)*. – 2024. – Uzhhorod, June 3-6. – P. 107-108.
2. Chang L.L.Y. Solid Solutions of Scheelite with Other  $\text{R}^{\text{II}}\text{WO}_4$ -Type Tungstates. *American Mineralogist*. - 1967. Vol. 52, No. 3-4. - P. 427-435.
3. Urusov V.S. Energetic theory of miscibility gaps in mineral solid solutions. *Fortschr. Mineral.* - 1975. - Vol. 52. - P. 141-150.

# КІНЕТИКА ДЕГРАДАЦІЇ АЗОБРАВНИКІВ ЗА УЧАСТІ АМОΡФНИХ СПЛАВІВ НА ОСНОВІ АЛЮМІНІЮ

Головатюк А.Ю., Бойчишин Л.М.

Львівський національний університет імені Івана Франка, [Anton.Holovatiuk@lnu.edu.ua](mailto:Anton.Holovatiuk@lnu.edu.ua)

Аморфні металеві сплави (АМС) на основі алюмінію демонструють перспективні каталітичні та сорбційні властивості, наприклад в реакціях окиснення-деградації органічних барвників у лужному середовищі. Синтетичні азобарвники, такі як Brilliant black E151, широко застосовуються у харчовій промисловості через яскраве забарвлення та стабільність. Проте в стічних водах ці сполуки можуть створювати екологічні загрози. Тому досліджено деградацію азобарвника Brilliant black E151 в лужному середовищі за участі АМС системи Al-Ni-Co-Gd. Вивчено вплив концентрації барвника на спектральні характеристики розчину, на основі яких проведено розрахунки, наведені в таблиці. Основна ідея експериментів полягала у визначенні змін інтенсивності поглинання ( $D$ ) із часом у розчині в присутності АМС, фіксуючи зміни положення та інтенсивності характерних піків поглинання (УФ спектроскопія, діапазон 300-800 нм).

Таблиця

Кінетичні характеристики деградації барвника в лужному розчині в присутності АМС

| Час, хв | $D$ ,<br>(560нм) | $D$ ,<br>(390нм) | $C \times 10^6$ ,<br>моль/л<br>(560нм) | $C \times 10^6$ ,<br>моль/л<br>(390нм) | $\ln(C_0/C_t)$ ,<br>(560нм) | $\ln(C_0/C_t)$ ,<br>(390нм) | $(1/C_t) \times 10^5$<br>(560нм) |
|---------|------------------|------------------|----------------------------------------|----------------------------------------|-----------------------------|-----------------------------|----------------------------------|
| 10      | 0.226            | 0.138            | 8.81                                   | 5.73                                   | 0.126                       | 0.556                       | 1.135                            |
| 20      | 0.215            | 0.138            | 8.42                                   | 5.73                                   | 0.172                       | 0.556                       | 1.188                            |
| 30      | 0.213            | 0.140            | 8.35                                   | 5.79                                   | 0.180                       | 0.546                       | 1.198                            |
| 60      | 0.211            | 0.139            | 8.24                                   | 5.76                                   | 0.194                       | 0.551                       | 1.214                            |
| 90      | 0.208            | 0.139            | 8.17                                   | 5.76                                   | 0.202                       | 0.551                       | 1.224                            |
| 240     | 0.208            | 0.155            | 8.16                                   | 6.29                                   | 0.204                       | 0.463                       | 1.226                            |
| 1440    | 0.113            | 0.105            | 4.90                                   | 4.65                                   | 0.714                       | 0.765                       | 2.041                            |
| 4320    | 0.015            | 0.044            | 0.45                                   | 1.23                                   | 3.101                       | 2.095                       | 22.22                            |

Як видно з результатів наведених в таблиці, концентрація азобарвника Brilliant black E151 поступово зменшувалася в часі, на що вказує зниження інтенсивності максимуму поглинання в ділянці 560-570 нм. При цьому інтенсивність максимуму біля 390 нм спочатку зростав приблизно впродовж перших 4 год, а надалі також знижувався. Поясненням тимчасового зростання інтенсивності піку на 390 нм є ймовірне утворення проміжних продуктів, які мають підвищений коефіцієнт молярного поглинання в цій ділянці. Такі короткоживучі сполуки можуть накопичуватися на початкових стадіях руйнування азосполук, а з часом переходили в інші форми. За наявності АМС спостерігається прискорення деградації азобарвника за рахунок каталізу окисно-відновних реакцій на поверхні сплаву. Із не лінійних графічних залежностей,  $\ln(C_0/C_t) - t$  (модель першого порядку) та  $1/C_t - t$  (другий порядок), випливає, що в даній реакції спостерігається багатостадійний процес, де на різних часових інтервалах можуть переважати різні кінетичні механізми.

*This work was supported by the Simons Foundation (Award Number: 00014574).*



## ОСОБЛИВОСТІ ВЗАЄМОДІЇ КОМПОНЕНТІВ НА ПЕРЕРІЗАХ $RGe_2 - R'Ge_2$

*Дармонук О.Т., Шпирка З.М., Павлюк В.В.*

Львівський національний університет імені Івана Франка, [z.shpyrka@gmail.com](mailto:z.shpyrka@gmail.com)

Потрійні системи, що містять один спільний компонент – германій і два різних рідкісноземельних метали досліджено на перерізах, що відповідають їх дигерманідам [1–9]. Саме особливостями R-компонентів визначається характер взаємодії компонентів у цих системах, адже взаємно заміщуватись можуть лише вони. Умовно системи можна розділити на три групи.

До першої належать системи, в яких утворюються неперервні ряди твердих розчинів (НПТР), що зумовлене існуванням ізоструктурних дигерманідів:  $CeGe_2-RGe_2$  ( $R = La, Eu, Y, Gd, Tb$ ),  $DyGe_2-TbGe_2$ . При відхиленні атомних радіусів РЗМ менше 3 % та різниці електронегативностей, що прямує до нуля утворюються неперервні ряди твердих розчинів. До другої групи належать системи, які характеризуються утворенням обмежених твердих розчинів заміщення різної протяжності на основі бінарних германідів:  $ScGe_2-RGe_2$  ( $R = La, Ce, Nd, Sm, Gd, Tb$ ),  $CeGe_2-RGe_2$  ( $R = Ho, Lu$ ),  $SmGe_2-RGe_2$  ( $R = Gd, Tb$ ),  $PrGe_2-RGe_2$  ( $R = Tb, Lu$ ),  $GdGe_2-RGe_2$  ( $R = Dy, Ho, Tm$ ),  $DyGe_2-RGe_2$  ( $R = Y, Gd, Er$ ),  $HoGe_2-RGe_2$  ( $R = Tm, Lu$ ),  $TmGe_2-ErGe_2$ . Протяжність твердих розчинів при заміщенні одного РЗМ іншим визначається розмірами атомів, що взаємно заміщуються. Третя група – системи, в яких утворюються тернарні сполуки (відхилення атомного радіусу R-компонентів становить 2–3 % і більше):  $ScGe_2-RGe_2$  ( $R = Y, Dy$ ),  $NdGe_2-TmGe_2$ ,  $SmGe_2-RGe_2$  ( $R = Ho, Er, Tm, Lu$ ),  $DyGe_2-RGe_2$  ( $R = Sm, Ho, Tm, Lu$ ),  $LuGe_2-RGe_2$  ( $R = Nd, Gd$ ).

Слід зазначити, що кристалічні структури усіх відомих тернарних германідів, що утворюються на перерізах  $RGe_2 - R'Ge_2$ , де R і R' – рідкісноземельний метал церієвої або ітрієвої підгрупи, кристалізуються у структурних типах бінарних германідів або є їхніми похідними. Сполука  $Dy_{0,5}Ho_{0,5}Ge_{1,75}$  належить до структурного типу  $Sm_4Co_{1-x}Ge_7$ , який складається з фрагментів структурних типів  $\alpha-ThSi_2$ ,  $ZrSi_2$  і  $CeAl_2Ga_2$ . Тернарні германіди  $Sm_{0,625}Lu_{0,375}Ge_{1,85}$ ,  $Dy_{0,6}Lu_{0,4}Ge_2$ ,  $Dy_{0,67}Tm_{0,33}Ge_{1,85}$ ,  $Gd_{0,47}Lu_{0,53}Ge_{1,85}$  та  $Nd_{0,34}Tm_{0,66}Ge_{1,85}$  належать до структурного типу  $DyGe_{1,85}$ , а  $Sc_{0,24}Y_{0,76}Ge_{1,82}$  та  $Sc_{0,25}Dy_{0,75}Ge_{1,82}$  до – типу  $YGe_{1,82}$ .

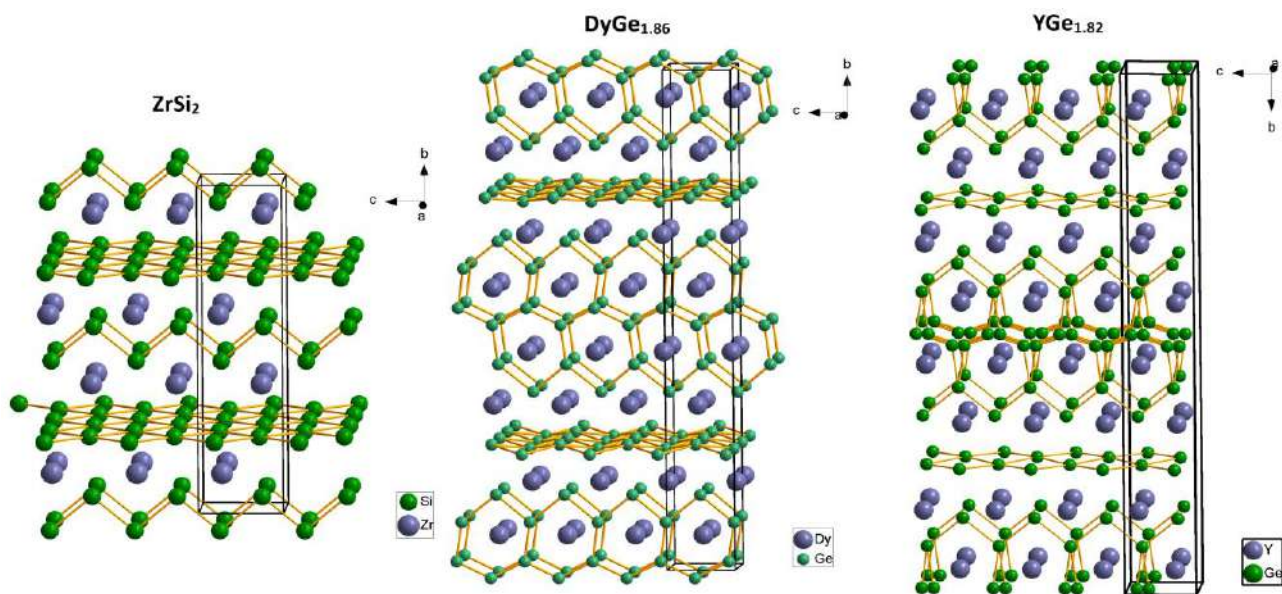


Рис. Шари атомів германію у структурах сполук  $ZrSi_2$ ,  $DyGe_{1,85}$  та  $YGe_{1,82}$ .

Структура сполуки  $\text{Nd}_{0,2}\text{Tm}_{0,8}\text{Ge}_{2,013}$  належить до типу  $\text{ErGe}_{2,16}$ , який є варіантом включення атомів Ge в структуру типу  $\text{ZrSi}_2$ . Кристалічні структури бінарних германідів  $\text{DyGe}_{1,85}$  і  $\text{YGe}_{1,82}$  можна представити як лінійну комбінацію фрагментів структурних типів  $\text{AlB}_2$  і  $\text{ZrSi}_2$ .

У структурі  $\text{AlB}_2$  атоми РЗМ розташовані у вершинах тригональних призм, які без пропусків заповнюють простір, атоми Ge – в центрах призм. Структура типу  $\text{ZrSi}_2$  аналогічна структурі  $\text{AlB}_2$ , але відрізняється взаємним розташуванням тригональних призм, зміщених одна відносно одної на  $\frac{1}{2}x$ . Три шари тригональних призм в структурі  $\text{DyGe}_{1,85}$  мають паралельне розміщення осей як і в структурному типі  $\text{AlB}_2$ . Подібність структури типу  $\text{DyGe}_{1,85}$  з  $\text{ZrSi}_2$  полягає в чергуванні стін тригональних призм і ланцюгів з атомів германію, а відмінність – в кількості шарів тригональних призм, що утворюють стіни ( $\text{ZrSi}_2$  – один шар,  $\text{DyGe}_{1,85}$  – три шари). На рисунку показано шари з атомів германію у структурах  $\text{ZrSi}_2$ ,  $\text{DyGe}_{1,85}$  та  $\text{YGe}_{1,82}$  відповідно. Сполука  $\text{Sm}_2\text{Dy}_2\text{Ge}_7$  є впорядкованою надструктурою до типу  $\text{Nd}_4\text{Ge}_7$ , який є дефектною похідною від  $\alpha\text{-ThSi}_2$ .

Якщо вважати, що визначальну роль в морфотропних переходах відіграє розмірний фактор, тобто атомний радіус РЗМ, то комбінуючи співвідношення кількостей атомів R-більшого розміру та атомів R-меншого розміру так, щоб їх усереднений атомний радіус був в межах допустимих для реалізації відповідного структурного типу бінарних сполук, можна передбачити імовірні склади нових тернарних германідів на перерізах  $\text{RGe}_2\text{-R}'\text{Ge}_2$ .

1. Bodak O.I., Shpyrka Z.M., Mokra I.R. Peculiarities of the interaction of the components in the system of two rare earth metals and germanium // *J. Alloys and Comp.* – 1997. – Vol. 247. – P. 217 – 222.

2. Шпирка З., Драб Л. Дослідження перетинів  $\text{DyGe}_2\text{-RGe}_2$ , де  $R\text{-Y, Gd, Tb, Ho, Er, Tm, Lu}$  // *Вісн. Львів. ун-ту. Серія хім.* – 2008. – Вип.49. – Ч. 1. – С. 98–102.

3. Гук Н., Шпирка З., Стародуб П. Дослідження системи  $\text{Er-Tm-Ge}$  в області 0,5-1,0 ат. частки Ge // *Вісн. Львів. ун-ту. Серія хім.* – 2009 – Вип.50. – С. 18–27.

4. Мельник Т., Шпирка З., Серкіз Р. Дослідження системи  $\text{Gd-Tm-Ge}$  при 870 К // *Вісн. Львів. ун-ту. Серія хім.* – 2011 – Вип. 52. – С. 3–13.

5. Шпирка З., Воротняк В., Павлюк В., Серкіз Р. Кристалічна структура сполуки  $\text{Dy}_{0,67}\text{Tm}_{0,33}\text{Ge}_{1,85}$  // *Вісн. Львів. ун-ту. Серія хім.* – 2012. – Вип. 53. – С. 66–71.

6. Шпирка З., Герман Н., Павлюк В. Дослідження перерізу  $\text{GdGe}_2\text{-LuGe}_2$  при 870 К // *Вісн. Львів. ун-ту. Серія хім.* – 2014 – Вип. 55. – С. 37–46.

7. Кравчук О., Шпирка З., Герман Н., Павлюк В. Дослідження квазібінарного перерізу  $\text{SmGe}_2\text{-LuGe}_2$  // *Вісн. Львів. ун-ту. Серія хім.* – 2018. Вип. 59, Ч. I. С. 83–89.

8. Шпирка З., Чех Ю., Юзів О., Герман Н., Серкіз Р., Павлюк В. Рентгеноструктурне дослідження сплавів на перерізах  $\text{RGe}_2\text{-LuGe}_2$  ( $R\text{-Pr, Nd}$ ) та  $\text{SmGe}_2\text{-R}'\text{Ge}_2$  ( $R'\text{-Gd, Tb, Ho, Er, Tm}$ ) // *Вісн. Львів. ун-ту. Серія хім.* – 2019. – Вип. 60. – С. 64–72.

9. Shpyrka Z., Kluziak K., Rożdżyńska-Kielbik B., Stetskiv A., Pavlyuk V.. The isothermal section of the phase diagram of  $\text{Sm-Dy-Ge}$  ternary system at 873 K // *J. Phase Equilib. Diff.* – 2018. – Vol. 39. – Issue 6. – P. 750-765.

3. Шпирка, В. Павлюк вдячні за фінансову підтримку Фонду Саймонса (Record ID: PD-Ukraine-00014574)

## СИНТЕЗ І КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА СПОЛУКИ $\text{Pr}_{11}\text{Co}_4\text{In}_9$

*Димитриаді Д.Г., Ничипорук Г.П., Каличак Я.М.*

Львівський національний університет імені Івана Франка, [halyna.nychyporuk@lnu.edu.ua](mailto:halyna.nychyporuk@lnu.edu.ua)

Взаємодія рідкісноземельних металів із  $d$ -перехідними металами та індієм приводить до утворення численних сполук різної стехіометрії і складності, які можуть бути цікавими об'єктами для сучасного матеріалознавства. Так, у системі  $\text{Pr-Co-In}$  відомо про існування п'яти тернарних сполук:  $\text{PrCoIn}_5$  (структурний тип  $\text{HoCoGa}_5$ ),  $\text{Pr}_2\text{CoIn}_8$  ( $\text{Ho}_2\text{CoGa}_8$ ),  $\text{PrCo}_2\text{In}$  ( $\text{HoCo}_2\text{Ga}$ ),  $\text{Pr}_3\text{Co}_9\text{In}_2$  (невідомий),  $\text{Pr}_{12}\text{Co}_6\text{In}$  ( $\text{Sm}_{12}\text{Ni}_6\text{In}$ ) [1, 2]. Під час дослідження цієї системи ми виявили існування ще однієї сполуки складу  $\text{Pr}_{11}\text{Co}_4\text{In}_9$ . Метою даної роботи є вивчення її кристалічної структури.

Сплави отримували за допомогою електродугового сплавляння компактних празеодиму, кобальту та індію з високим ступенем чистоти в атмосфері очищеного аргону під тиском  $0,5 \times 10^5$  Па. Склад контролювали шляхом порівняння маси зразка після плавлення з масою шихти. Гомогенізацію зразків проводили у вакуумованих кварцових ампулах за температури  $600^\circ\text{C}$  впродовж двох місяців, з наступним гартуванням у холодній воді без попереднього розбивання ампул.

Результати дослідження мікроструктури сплаву складу  $\text{Pr}_{33,3}\text{Co}_{33,3}\text{In}_{33,3}$ , на сканувальному електронному мікроскопі Tescan Vega 3 LMU вказали на наявність двох фаз, склад яких за даними EDX аналізу:  $\text{Pr}_{46,2}\text{Co}_{17,3}\text{In}_{36,5}$  (невідомо фаза) та  $\text{Pr}_{25,3}\text{Co}_{50,9}\text{In}_{23,8}$  (сполука  $\text{PrCo}_2\text{In}$ ). З метою розшифровки кристалічної структури невідомої сполуки синтезовано зразок відповідного складу, який досліджено на порошковому дифрактометрі STOE STADI P ( $\text{Cu K}\alpha_1$ -випромінювання). Склад сполуки, розташування та інтенсивності відбиттів на дифрактограмі дозволили висловити припущення про належність її структури до типу  $\text{Nd}_{11}\text{Pd}_4\text{In}_9$  [3].

Кристалічну структуру сполуки  $\text{Pr}_{11}\text{Co}_4\text{In}_9$  уточнено з використанням комплексу програм Fullprof: просторова група  $Cmmm$ ,  $a = 14,801(10)$ ;  $b = 22,119(14)$ ;  $c = 3,746(2)$  Å;  $V = 1226,4(1)$  Å<sup>3</sup>,  $R_{\text{Bragg}} = 0,087$ ;  $R_F = 0,063$ ;  $R_p = 0,033$ ;  $R_{\text{wp}} = 0,041$ , що підтверджує правильність наших припущень. Міжатомні віддалі добре узгоджуються з сумою відповідних атомних радіусів.

Координаційні числа атомів празеодиму знаходяться в межах від 12 до 16. Їм відповідають координаційні многогранники у вигляді пентагональних та тетрагональних призм з центрованими основами і деякими бічними гранями. Координаційні числа атомів індію знаходяться в межах від 12 до 14. Їм відповідають координаційні многогранники у вигляді тетрагональних призм з центрованими основами і деякими бічними гранями. Координаційні многогранники атомів кобальту – тригональні призми з центрованими бічними гранями (КЧ = 9). Сполука  $\text{Pr}_{11}\text{Co}_4\text{In}_9$  доповнює ряд ізоструктурних сполук  $\text{RZM}_{11}\text{Co}_4\text{In}_9$  [4].

*Г.Н. і Я.К. вдячні за фінансову підтримку фонду Simons Foundation (PD-Ukraine-00014574).*

1.Kalychak Ya. M., Zaremba V. I., Pöttgen R., Lukachuk M., Hoffmann R.–D. Rare Earth–Transition metal–Indides: *Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths* Ed. by K. A. Gschneidner, Jr., J.–C. G. Bünzli and V. K. Pecharsky. Elsevier B. - 2005. - V. 218 (34). - P. 1–133.

2.Gabay A.M., Hadjipanayis G.C. Phases and phase equilibria in cobalt-rich  $\text{Pr-Co-In}$  alloys for permanent magnets // *J. Alloys Compd.* - 2010. - Vol. 500. - P. 161–166.

3.Sojka L., Manyako M., Černý, Ivanyk M., Belan B., Gladyshevskii R., Kalychak Ya.  $\text{Nd}_{11}\text{Pd}_4\text{In}_9$  compound – A new member of the homological series based on  $\text{AlB}_2$  and  $\text{CsCl}$  type // *Intermetallics.* - 2008. - № 5. - P. 625–628.

4.Tyvanchuk Yu. B., Dzevenko M. V., Kalychak Ya. M.  $\text{R}_{11}\text{Co}_4\text{In}_9$  ( $R = \text{Gd, Tb, Dy, Ho, Er}$ ) – the first representatives of  $\text{Nd}_{11}\text{Pd}_4\text{In}_9$  structure type in  $R\text{-Co-In}$  systems // *Visn. Lviv. Univ., Ser. Khim.* - 2012. - Iss. 53. - P. 127–132.

## ОКИСНЕННЯ СУЛЬФОКСИДІВ ПЕРОКСИКИСЛОТАМИ В ОРГАНІЧНИХ РОЗЧИННИКАХ

*Дутка В.С.<sup>1</sup>, Мідяна Г.Г.<sup>2</sup>, Дутка Ю.В.<sup>2</sup>*

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

<sup>2</sup>Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії та вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАН України, [vdutka@ukr.net](mailto:vdutka@ukr.net)

Окиснення сульфоксидів до сульфонів пероксикислотами перебігає гладко і виходи продуктів реакції високі [1]. Інтерес до такого типу реакцій обумовлений практичною цінністю продуктів реакції. Механізм реакції окиснення сульфоксидів пероксикислотами маловивчений. В даній роботі наведені результати вивчення реакції окиснення сульфоксидів ПК в різних органічних розчинниках. Кінетичні криві окиснення ДМСО пероксидекановою кислотою (ПДК) - лінійні в координатах  $\ln(C_0/C_t)$  від  $t$ . За тангенсом кута нахилу залежностей були розраховані сумарні константи швидкості окиснення ( $k$ ), числові значення яких наведені в таблиці 1.

**Таблиця 1**

Ефективні константи швидкості окиснення ДМСО пероксидекановою кислотою в органічних розчинниках при різних температурах

| Розчинник      | $k \cdot 10^5, \text{с}^{-1}$ ( $\Delta k = \pm 0.03 k$ ) |       |      |       |       |
|----------------|-----------------------------------------------------------|-------|------|-------|-------|
|                | 298 К                                                     | 303 К | 308К | 313 К | 318 К |
| Оцтова кислота | 5.24                                                      | 7.08  | 9.70 | 13.5  | 16.3  |
| Пропанол-2     | 8.46                                                      | 12.5  | 17.4 | 23.0  | 36.8  |
| ДМФА           | 18.9                                                      | 24.4  | 33.0 | 43.8  | 54.6  |
| Ацетон         | 27,2                                                      | 35,6  | 45,2 | 56,0  | 66,6  |
| Хлороформ      | 27,8                                                      | 37,2  | 51,6 | 68,6  | 97,8  |
| Етилацетат     | 29,8                                                      | 37,6  | 48,0 | 64,0  | 80,0  |
| Дихлоретан     | 33,8                                                      | 45,0  | 62,8 | -     | 107   |
| Нітробензол    | 35,2                                                      | 48,4  | 69,4 | 98,4  | 133   |
| Тетрахлорметан | 38,4                                                      | 52,0  | 68,0 | 98,4  | 130   |
| Хлорбензен     | 40,4                                                      | 57,8  | 78,8 | 109   | 152   |
| Діоксан        | 46,8                                                      | 53,2  | 71,8 | 94,6  | 121   |
| Бензен         | 55,2                                                      | 68,0  | 87,6 | 106   | 145   |

Як свідчать отримані дані, реакційне середовище, в якому проводили окиснення ДМСО, впливає на числові величини  $k$ . Так при 298 К у розчині оцтової кислоти величина найменша і рівна  $5.24 \cdot 10^{-3} \text{с}^{-1}$ , а в бензені ця величина більш як в 10 разів вища. За температурною залежністю сумарних констант швидкості окиснення було розраховано ефективні енергії активації ( $E_{ак}$ ) процесу окиснення. Числові значення величин  $E_a$  та параметри перехідного стану наведені в таблиці 2.

Числові значення  $E_{ак}$  лежать в межах 37.7 до 53.9 кДж/моль. Між величинами перехідного  $\Delta H^\ddagger$  і  $\Delta S^\ddagger$  стану існує лінійний взаємозв'язок, що вказує на наявність компенсаційного ефекту. Лінійність залежності  $\Delta H^\ddagger = f(\Delta S^\ddagger)$  свідчить про складний характер впливу розчинника на реакцію окиснення ДМСО.

Ізокінетична температура, знайдена за нахилом залежності  $\Delta H^\ddagger$  від  $\Delta S^\ddagger$ , рівна  $323 \pm 5 \text{ К}$  і дещо вища за температуру наших дослідів. Варто відзначити, що швидкості окиснення сульфідів пероксикислотами значно вищі швидкостей окиснення сульфоксидів. Механізм окиснення сульфоксидів пероксикислотами включає дві стадії.

Таблиця 2

Активацийні параметри реакції окиснення диметилсульфоксиду ПДК  
в досліджуваних розчинниках

| Розчинник      | Енергія<br>активації,<br>$E_{ак}$ ,<br>кДж/моль;<br>$\Delta E = \pm 5,0$ | $\Delta H^\#$ ,<br>кДж/моль | $-\Delta S^\#$ ,<br>Дж/моль·К | $\Delta G^\#$ ,<br>кДж/моль |
|----------------|--------------------------------------------------------------------------|-----------------------------|-------------------------------|-----------------------------|
| Оцтова кислота | 44,9                                                                     | 42,4                        | 146                           | 85,8                        |
| Пропанол-2     | 53,9                                                                     | 51,4                        | 112                           | 84,6                        |
| ДМФА           | 43,2                                                                     | 40,7                        | 141                           | 82,7                        |
| Ацетон         | 36,1                                                                     | 33,6                        | 162                           | 81,8                        |
| Хлороформ      | 48,0                                                                     | 45,5                        | 121                           | 81,7                        |
| Етилацетат     | 39,4                                                                     | 36,9                        | 150                           | 81,5                        |
| Дихлоретан     | 46,7                                                                     | 44,2                        | 124                           | 81,2                        |
| Нітробензол    | 52,2                                                                     | 49,7                        | 105                           | 81,1                        |
| Тетрахлорметан | 44,7                                                                     | 42,2                        | 130                           | 80,9                        |
| Хлорбензол     | 52,3                                                                     | 49,8                        | 104                           | 80,8                        |
| Діоксан        | 42,7                                                                     | 40,2                        | 135                           | 80,4                        |
| Бензен         | 37,7                                                                     | 35,2                        | 150                           | 80,0                        |

Примітка. Величини  $\Delta H^\#$ ;  $\Delta S^\#$ ; и  $\Delta G^\#$  розраховані для 308 К.

На першій стадії швидко формується проміжна сполука ДМСО-ПДК. Цю стадію можна охарактеризувати константою рівноваги. У ході другої стадії проміжна сполука розкладаючись утворює продукти реакції - деканову кислоту і диметилсульфон. Друга стадія є повільною і визначає загальну швидкість процесу. На першу і другу стадію буде впливати розчинник у якому перебігає процес. У багатьох розчинниках процес окиснення перебігає кількісно, що дало змогу використати цей фактор для визначення сульфоксидів у різних середовищах

Для знаходження кореляційних залежностей між константами швидкості реакції окиснення ДМСО ПДК були знайдені кореляційні рівняння.

Для знаходження залежностей констант швидкості реакції окиснення сульфоксиду пероксидекановою кислотою ( $k$ ) і параметрів перехідного стану від основних властивостей розчинників було використане відоме рівняння [2, 3]:

$$\lg k = a_0 + a_1(n^2 - 1)/(n^2 + 2) + a_2(\varepsilon - 1)/(2\varepsilon + 1) + a_3B + a_4 E_T + a_5 \delta^2 + a_6 V_M \quad (1)$$

У рівнянні (1)  $n$  і  $\varepsilon$  – показник заломлення і діелектрична стала, які визначають їх поляризованість і полярність, відповідальних за неспецифічну сольватацію. Параметри  $B$  і  $E_T$ -основність за Пальмом [4] і електрофільність за Райхардтом [5] відповідно, які визначають здатність розчинників до кислотно-основної взаємодії, тобто специфічної сольватації. Величини  $\delta$  и  $V_M$  - параметр розчинності Гільдебрандта, квадрат якого пропорційний енергії когезії середовища, і мольний об'єм розчинника. Ці параметри відображають вплив структурних факторів.

Пошук кореляційних залежностей, які зв'язують основні фізико-хімічні властивості розчинників та сумарні константи швидкості окиснення ДМСО ДМСО при 303 К привів до шестипараметрового рівняння, а множинний коефіцієнт кореляції виявився рівним ( $R = 0,9797$ )

$$\lg k = 3.0299 + (4.8813 \pm 1.4321)f(n^2) + (1.6387 \pm 0.3388)f(\varepsilon) + (0.0011 \pm 0.0005)B - (0.0592 \pm 0.0085)E_T - (0.0014 \pm 0.0006)\delta^2 - (0.0064 \pm 0.0029)V_M \quad (2)$$

$N=12, R=0.9798, S \pm 0.0582, F 19.9728.$

Коефіцієнти парної кореляції ( $r_i$ ) відповідно рівні: 0.6307; -0.4321, -0.4321, -0.4570, -0.9101, -0.5059, 0.7740.

Виключення з розгляду малозначимих параметрів  $B$ ,  $\delta^2$ ,  $V_M$  і  $f(n)$  привело до двохпараметрового кореляційного рівняння з множинним коефіцієнтом кореляції рівним 0.9545.

$$\lg k = 3.5948 + (1.2007 \pm 0.3748)f(\varepsilon) - (0.0620 \pm 0.0065)E_T \quad (3)$$

$N=12, R=0.9545, S \pm 0.0868, F 38.6580.$

Отже на процес окиснення ДМСО пероксидекановою кислотою впливає основність та електрофільність середовища.

Для величин перехідного стану  $\Delta G^\ddagger$  отримали кореляційне рівняння (4) з коефіцієнтом множинної кореляції рівним 0.9758. Кореляційне рівняння має вигляд

$$\lg(\Delta G^\ddagger) = 1.8668 - (0.1698 \pm 0.0485)f(n) - (0.0468 \pm 0.0115)f(\varepsilon) - (0.0000 \pm 0.0000)B + (0.0018 \pm 0.0003)E_T - (0.0001 \pm 0.0000)\delta^2 - (0.0002 \pm 0.0001)V_M \quad (4)$$

$N=12, R=0.9860, S 0.0020, F 16.5837.$

Коефіцієнти парної кореляції ( $r_i$ ) відповідно рівні: -0.5955, 0.4769, 0.4196, 0.9173, 0.5176, -0.7444.

На величини  $\Delta G^\ddagger$  практично не впливають такі параметри розчинників як  $V_M$ ,  $\delta^2$  і  $B$ . Виключення цих параметрів з розгляду приводить до зменшення множинного коефіцієнта кореляції  $R$  до 0.9517 і отримуємо рівняння (5).

$$\lg(\Delta G^\ddagger) = 1.8627 - (0.0333 \pm 0.0304)f(n) - (0.0266 \pm 0.0123)f(\varepsilon) + (0.0017 \pm 0.0002)E_T \quad (5)$$

$N=12, R=0.9517, S 0.0028, F 1177.1582.$

Отже, на процес окиснення ДМСО пероксидекановою кислотою, у залежності від умов проведення процесу, впливає специфічна та неспецифічна сольватація обох реагентів.

1. Дутка В., Мідяна Г., Дутка Ю., Пальчикова О. Вплив органічних розчинників на швидкість окиснення сульфоксидів пероксикислотами // *Вісник Львівського ун-ту. Сер. хім.* - 2020. - Вип.61. Ч. 2. - С. 478 – 487.

2 Дутка В., Мідяна Г. Дутка Ю., Пальчикова О. Окиснення N, N-диметиланіліну пероксинонаною кислотою в органічних розчинниках // *Вісник Львівського університету. Серія хімічна.* - 2022. - вип.. 63. - С. 383 – 339.

3.. Дутка В., Мідяна Г., Дутка Ю., Пальчикова О. Окиснення нітрогеновмісних сполук пероксикислотами в різних органічних розчинниках // *Праці наукового товариства Серія хімічних наук.* - С. 34 – 46.

4. Koppel I.A., Palm V.A. *Advances in Linear Free Energy Relationships.* London; New York: Plenum Press. - 1972. - P. 203.

5. Reichardt C. *Solvent and Solvent Effects in Organic Chemistry.* Weinheim: Wiley- VCH. - 2003. - P. 199.



## БІМЕТАЛІЧНІ Ni-Fe НАНОКАТАЛІЗАТОРИ НА ОСНОВІ КОМПОЗИТНИХ КЕРАМІЧНИХ МАТЕРІАЛІВ ДЛЯ ГІДРОНЕНУВАННЯ CO<sub>2</sub> ДО МЕТАНУ

Дяченко А.<sup>1</sup>, Пригунова О.<sup>2</sup>, Борисенко М.<sup>1</sup>, Дуднік О.<sup>3</sup>, Іщенко О.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, [dyachenko.alla@yahoo.com](mailto:dyachenko.alla@yahoo.com)

<sup>2</sup>Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Україна

<sup>3</sup>Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України, Україна

Забезпечення суспільства новими чи вдосконаленими каталізаторами гідрування вуглекислого газу з метою його перетворення на високоенергетичні продукти, як то метан є важливим науковим та економічним завданням у сучасному суспільстві. Підвищення термостійкості каталізатора можливе шляхом закріплення активних центрів на поверхні термостабільного носія. Крім того, використання носія призводить до кращого диспергування активних центрів каталізатора по його поверхні, і як результат підвищує конверсію CO<sub>2</sub> та вихід CH<sub>4</sub>. Для досягнення кращого каталітичного ефекту біметалічну композицію NiFe наносили на поверхню композиційних керамічних матеріалів загального складу Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ZrO<sub>2</sub>-CeO<sub>2</sub> з різним співвідношенням компонентів, синтезованих гідротермальним методом [1].

Нанесення біметалічних часточок на поверхню кожного носія проводилося методом просочування з нітратних розчинів відповідних металів. Загальна кількість металів становила 20 мас% по відношенню до маси носія, а співвідношення між металами становило 80мас% Ni та 20 мас% Fe. Одержаний вологий субстрат сушили на повітрі протягом 4-6 годин при т-рі 250°C до повного висихання. В результаті термічної деградації нітратних комплексів металів кінцевий продукт містив нанесені на поверхню носія наночастинки оксидів металів. Їх подальше відновлення воднем протягом 2 годин при температурі 450°C призводить до формування металічних наночасточок металів, активація яких відбувається безпосередньо у реакторі перед проведення каталітичного експерименту. Структура каталізаторів у оксидній (до реакції) та металічній (після реакції) формах і відповідних носіїв досліджувалися методами низькотемпературної адсорбції азоту та рентгенофазового аналізу. Каталітична активність оцінювалася за ступенем перетворення CO<sub>2</sub> у метан та контролювалася хроматографічно у діапазоні температур перебігу реакції 25-450°C.

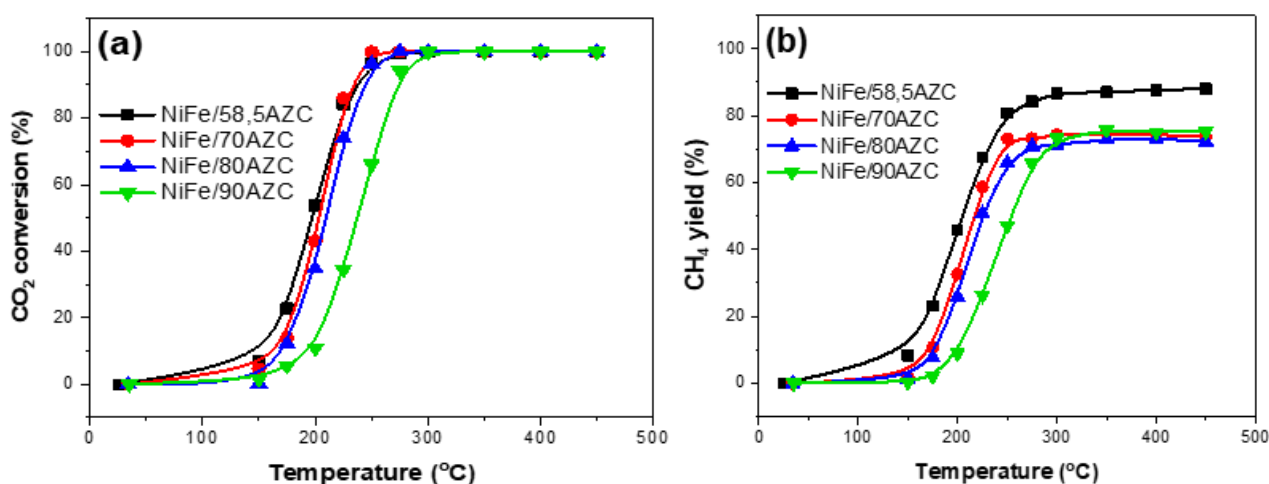


Рис. 1. Температурна залежність конверсії CO<sub>2</sub> (a) та виходу CH<sub>4</sub> (b) на NiFe/AZC композитних нанокаталізаторах.

Каталітична поведінка досліджуваних матеріалів є подібною. Особливістю цих каталізаторів є те, що утворення метану розпочинається за досить низької для такого процесу температури, 150 °C, з досягненням максимальної кількості (70-88%) в інтервалі температур

300-350 °С. Однак кількість утвореного метану відрізняється для різних композитів. Конверсія CO<sub>2</sub> на каталізаторі NiFe/58AZC розпочинається при 150 °С з утворенням 8% метану і стрімко зростає до 23% при 200 °С. Максимальний вихід метану для каталізатора NiFe/58AZC становить 88% у порівнянні з 73-76% для інших досліджуваних каталізаторів (Рис.1).

Текстурні характеристики композитів на основі AZC методом низькотемпературної адсорбції азоту продемонстрували, що модифікування поверхні носіїв AZC оксидними Ni-Fe-O частинками не призводить до значних змін питомої поверхні порівняно з вихідним носієм. Загальний об'єм та радіус пор при цьому зменшуються. Це вказує на формування гостьової оксидної фази здебільшого на поверхні носія. Однак не виключена також локалізація часточок NiO малого розміру, що за даними РФА становлять 7-10 нм також і всередині пор особливо для каталізаторів на основі AZC70\_80\_90. Очевидно, що висока поверхнева доступність потенційних каталітично активних центрів, є одним із чинників високої каталітичної активності композитів, зокрема для NiFe/58AZC. В іншому випадку кристаліти, що локалізовані всередині пор носія, є менше доступними для молекул реагентів. Структурні характеристики композитів після їх експлуатації у каталітичній реакції демонструють зменшення питомої поверхні та збільшення розмірів пор, що спричинено агрегацією поверхневих часточок внаслідок спікання (таблиця 1).

**Таблиця 1**

Структурні характеристики носіїв та нанокаталізаторів на їх основі до та після реакції за даними низькотемпературної адсорбції азоту.

| Зразок                                                                                 | S <sub>БЕТ</sub> ,<br>м <sup>2</sup> /г | R <sub>п</sub> ,<br>нм | V <sub>п</sub> ,<br>см <sup>3</sup> /г |
|----------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------|------------------------|----------------------------------------|
| 58AZC<br>(38%Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -56%ZrO <sub>2</sub> -4%CeO <sub>2</sub> ) | 197.7                                   | 6.7                    | 0.33                                   |
| NiFe(ox)/58AZC                                                                         | 146.8                                   | 6.4                    | 0.23                                   |
| NiFe(met)/58AZC                                                                        | 91.0                                    | 9.5                    | 0.22                                   |
| 70AZC<br>(36%Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -58%ZrO <sub>2</sub> -3%CeO <sub>2</sub> ) | 131.7                                   | 13.7                   | 0.45                                   |
| NiFe(ox)/70AZC                                                                         | 137.6                                   | 6.7                    | 0.23                                   |
| NiFe(met)/70AZC                                                                        | 91.5                                    | 10.7                   | 0.25                                   |
| 80AZG<br>(58%Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -36%ZrO <sub>2</sub> -3%CeO <sub>2</sub> ) | 143.8                                   | 15.3                   | 0.55                                   |
| NiFe(ox)/80AZC                                                                         | 192.7                                   | 3.6                    | 0.17                                   |
| NiFe(met)/80AZC                                                                        | 99.6                                    | 6.8                    | 0.17                                   |
| 90AZC<br>(87%Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -10%ZrO <sub>2</sub> -2%CeO <sub>2</sub> ) | 123.3                                   | 23.6                   | 0.73                                   |
| NiFe(ox)/90AZC                                                                         | 162.5                                   | 5.7                    | 0.23                                   |
| NiFe(met)/90AZC                                                                        | 94.6                                    | 10.0                   | 0.24                                   |

S<sub>БЕТ</sub> – питома поверхня, R<sub>п</sub> – радіус пор, V<sub>п</sub> – об'єм пор

Таким чином дослідження продемонстрували, що порувата структура носіїв AZC має суттєвий вплив на формування активних центрів каталізаторів та їх доступності для каталітичної конверсії CO<sub>2</sub>.

1.Smyrnova-Zamkova, M.Yu., Dudnik O.V., Bykov O.I., Ruban O.K., Khomenko O.I. Powder Metallurgy and Metal Ceramics. – 2022. – 60 (9-10). – P. 519-530.

# ВПЛИВ ДИФУЗІЇ НА ДИСКРИМІНАЦІЮ ШВИДКІСТЬ-ВИЗНАЧАЛЬНОЇ СТАДІЇ МЕХАНІЗМУ ІЛІ-РІДІЛА

*Жох О.О.*

Інститут фізичної хімії ім. Л.В.Писаржевського НАН України. [al.zhokh@gmail.com](mailto:al.zhokh@gmail.com)

Дизайн гетерогенних каталізаторів має на меті максимальне збільшення продуктивності гетерогенно-каталітичного процесу. Однак промислове використання каталізатора в реакторі з нерухомим або зрідженим шаром вимагає застосування досить великого розміру зерна. Швидкість реакції біля поверхні і всередині зерна каталізатора може суттєво відрізнятися зі збільшенням його розміру. Така різниця кількісно визначається за допомогою фактору ефективності, котрий пов'язує кінетику реакції та дифузії. Врахування неоднакових кінетичних схем реакції може приводити до схожих виразів для швидкості реакції [1]. Тому наявність відповідності між експериментальними кінетичними даними та теоретичним виразом для швидкості реакції недостатньо для висновку про застосовність конкретного маршруту реакції за даних експериментальних умов.

Розглянемо ізотермічну необоротну реакцію  $A \rightarrow B$ . Реакція відбувається на поверхні пористого каталізатора. Механізм реакції відповідає формалізму Ленгмюра-Ріділа. В рамках даного формалізму розглянемо такі схеми реакції:

Схема 1

- 1)  $A + S = AS$
- 2)  $AS + A + S \rightarrow 2BS$
- 3)  $BS = B + S$

Схема 2

- 1)  $A + S = AS$
- 2)  $AS + A + S = 2BS$
- 3)  $BS \rightarrow B + S$

Обидві схеми характеризуються однаковими маршрутами реакції, але різними швидкість-визначальними стадіями. Схема 1 визначає стадію 2) як швидкість-визначальну, в той час як схема 2 – стадію 3). Відповідно до схеми 1 швидкість реакції описується рівнянням:

$$-r_A = \frac{k_2 \cdot K_1 \cdot c^2}{(1 + K_1 \cdot c)^2} \quad (1)$$

Згідно із схемою 2 одержано таке рівняння:

$$-r_A = \frac{k_3 \cdot \sqrt{K_1 \cdot K_2} \cdot c}{1 + K_1 \cdot c + 2 \cdot \sqrt{K_1 \cdot K_2} \cdot c} \quad (2)$$

Рівняння швидкості (1) та (2) одержано на підставі припущення про те, що конверсія реагенту  $A$  є суттєво нижчою за рівноважну, що дозволяє знехтувати членами, які стосуються продукту реакції  $B$ .

На загальну швидкість процесу впливає дифузія реагенту в зерні каталізатора. За стаціонарного стану відповідна задача реакції-дифузії сформульована таким чином:

$$D \cdot \frac{d^2 c}{dx^2} = r_A, x \in [0, L] \quad (3)$$

$$c = c_A, x = L \quad \frac{dc}{dx} = 0, x = 0 \quad (4)$$

Фактор ефективності ( $\eta$ ) одержано у вигляді рішення рівняння (3) із початковими та граничними умовами (4):

$$\eta = \frac{1}{\varphi^2} \cdot \frac{\frac{dc}{dx}}{\frac{c_A}{L}}, x/L = 1 \quad (5)$$

Де  $\varphi$  – модуль Тіле.

У даній роботі продемонстровано можливість дискримінації двох різних швидкість-визначальних стадій кінетики Ілі-Ріділа на підставі відмінностей у залежності фактору ефективності від концентрації реагенту. Таку можливість проілюстровано на прикладі перетворення метанолу до диметилового ефіру на активному оксиді алюмінію, що є відомим промисловим процесом. Кінетика такого процесу може узгоджуватися із механізмом Ленгмюра-Ріділа [2]. Внаслідок дегідратації метанолу утворюється два продукти, а саме диметиловий ефір та вода. Знехтувавши продуктами реакції за низької конверсії метанолу, можна отримати рівняння швидкості (1) та (2). Для відповідного моделювання використано

такі значення констант. Для рівняння (1)  $K_1 = 30,4$  і  $k_2 = 0,535 \text{ м}^3/(\text{м}^3 \times \text{с})$ , для рівняння (2)  $K_1 = 14$ ,  $K_2 = 1,3 \times 10^{-4}$  і  $k_3 = 5,732 \text{ м}^3/(\text{м}^3 \times \text{с})$ . Значення кінетичних констант взято в роботі [2]. Ефективний коефіцієнт дифузії метанолу в активному оксиді алюмінію взято в роботі [3] ( $D = 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$ ). Розмір зерна прийнято за  $L = 5 \times 10^{-3} \text{ м}$ .

На рис. 1а наведено графічні зображення рівнянь (1) та (2), одержані з використанням вищезазначених значень параметрів. Залежність швидкості реакції від концентрації реагенту є практично однаковою для обох кінетичних схем. Водночас концентраційні залежності фактору ефективності є суттєво відмінними (рис. 1б). В рамках схеми 1 фактор ефективності сягає одиниці, тобто швидкість процесу переходить у кінетичну область, за концентрації реагенту, що дорівнює 0,65, в той час як для схеми 2  $\eta \approx 1$  за  $c_A = 1$ . Таким чином дискримінація двох швидкостей визначальних перетворень у механізмі Ілі-Ріділа може бути ефективно проведена шляхом порівняння експериментального та теоретично розрахованого фактору ефективності. Якщо аналіз швидкості реакції у кінетичній області не дозволяє обрати певну кінетичну модель серед множини конкуруючих моделей, то з метою проведення дискримінації необхідно збільшити розмір зерна каталізатора та дослідити швидкість процесу на зернах збільшеного розміру.

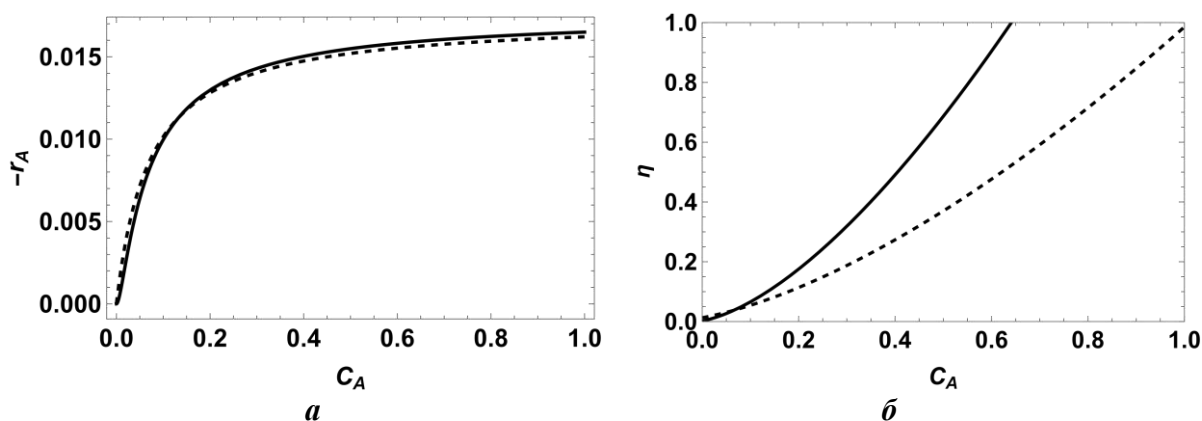


**Рис. 2.** Концентраційні залежності швидкості реакції (а) та фактору ефективності (б), одержані відповідно до схеми 1 (суцільна лінія) та схеми 2 (пунктирна лінія).

Кінетичні схеми 1 та 2 описують однакові маршрути реакції, але з різними швидкість-визначальними стадіями утворення продукту. Зміна швидкість-визначальної стадії кінетичної схеми реакції значним чином впливає на швидкість процесу у внутрішньо-дифузійній області. Як наслідок, фактор ефективності суттєво відрізняється в залежності від швидкість-визначальної реакції. Така відмінність у факторі ефективності може бути використана для дискримінації двох різних швидкість-визначальних стадій однієї і тієї ж кінетичної моделі гетерогенно-каталітичного процесу. Показано застосовність такого підходу для розрізнення конкуруючих кінетичних моделей шляхом застосування внутрішньо-дифузійних обмежень в рамках механізму Ілі-Ріділа. Також варто відзначити, що ті самі міркування можуть бути застосовані як до кінетики Ленгмюра-Хіншельвуда, так і до більш складних кінетичних схем.

*Дана робота виконана за фінансової підтримки Національного фонду досліджень України (грант № 2023.03/0041).*

1. Kayode Coker A., Modeling of Chemical Kinetics and Reactor Design. – Amsterdam: Elsevier. – 2001. – 1127 p.
2. Zhokh A., Trypolskyi A., Gritsenko V., Serebrii T., Zhang L., Tang J., Intrinsic kinetics of the methanol dehydration to dimethyl ether over laboratory and commercial  $\gamma$ -alumina: a comparative study – *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering*. – 2022. – 17(1). – P. e2722.
3. Xiao Y., He G., Yuan M. Adsorption Equilibrium and Kinetics of Methanol Vapor on Zeolites NaX, KA, and CaA and Activated Alumina – *Industrial and Engineering Chemistry Research*. – 2018. – 57. – P. 14254 – 14260.

## БІАДЕРНІ ТЕТРАКІС-КОМПЛЕКСИ РЗЕ З БІСКАРБАЦИЛАМІДОФОСФАТОМ

*Каряка Н.С., Труш В.О., Амірханов В.М.*

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, [Nataliia.Kariaka@knu.ua](mailto:Nataliia.Kariaka@knu.ua)

Координаційні сполуки рідкоземельних елементів (РЗЕ) активно вивчаються багатьма науковими групами, що обумовлено перспективами їх використання у медицині, оптоелектроніці та інших високотехнологічних галузях [1, 2]. Для одержання комплексів РЗЕ з бажаними характеристиками використовують цілеспрямований дизайн лігандів - адже саме найближче оточення та геометрія координаційного поліедру центрального атому мають найбільший вплив на люмінесцентні та магнітні властивості іону металу. Але значний вплив на властивості комплексів РЗЕ також можуть мати позасферні йони та міжмолекулярні взаємодії. Такий вплив відбувається через зміну геометрії та електронної будови лігандів. Вплив другої координаційної сфери на фотофізичні властивості координаційних сполук РЗЕ є важко прогнозованим, а виявлені залежності часто залишаються недостатньо зрозумілими. Тому, дослідження, спрямовані на з'ясування механізмів впливу зовнішньосферних протийонів на властивості координаційних сполук лантанодів, є актуальними.

В даній роботі було одержано та досліджено методами елементного аналізу, ІЧ, ПМР та люмінесцентної спектроскопії координаційні сполуки загального складу  $(Cat)_2Ln_2L_4$ , де  $Ln = Y, Eu$ ,  $(Cat)_2 = Na_2, Cs_2, (NH_4)_2, (NMe_4)_2, (NEt_4Na)$  та  $(HNEt_3)_2$ , а  $H_2L$  - тетраметил(2,2,3,3,4,4-гексафтор-1,5-діоксепентан-1,5-діил)-біс-амідофосфат (Рис. 1).

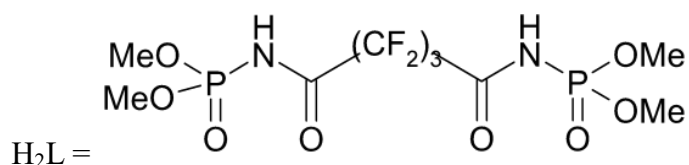


Рис. 1. Структурна формула  $H_2L$ .

Синтезовані комплекси являють собою полікристалічні або аморфні порошки, розчинність яких суттєво залежить від природи позасферного катіону. Так, сполуки  $Cs_2Ln_2L_4$ ,  $(NH_4)_2Ln_2L_4$  та  $(NMe_4)_2Ln_2L_4$  розчиняються у воді, тоді як решта одержаних комплексів ( $Na_2Ln_2L_4$ ,  $NEt_4Na_2Ln_2L_4$  та  $(HNEt_3)_2Ln_2L_4$ ) у воді нерозчинні, а розчиняються у полярних та слабо полярних органічних розчинниках, таких як метанол, ацетон та дихлорметан.

Методом ПМР спектроскопії комплексів ітрію встановлено співвідношення лігандів та катіонів у складі одержаних сполук, а також підтверджено двічі депротоновану форму ліганду.

Методом ІЧ спектроскопії встановлено, що ліганди координуються до іонів РЗЕ через атоми кисню усіх наявних карбонільних і фосфорильних груп. ІЧ спектри комплексів ітрію та європію є ідентичними.

Усі одержані комплекси європію при опроміненні УФ світлом при кімнатній температурі демонструють характерну червону люмінесценцію (Рис. 2). Позасферні катіони помітно впливають на розщеплення смуг f-f переходів у спектрах люмінесценції, на їх положення, а також на співвідношення їх інтенсивностей. Так, для більшості досліджених сполук європію смуга переходу  $^5D_0 \rightarrow ^7F_1$  розщеплена на 2 компоненти, натомість для комплексів  $Na_2Eu_2L_4$  та  $(HNEt_3)_2Eu_2L_4$  в області зазначеного переходу спостерігається лише одна уширена смуга. Смуга надчутливого переходу  $^5D_0 \rightarrow ^7F_2$  для більшості синтезованих сполук має максимум при 613 нм, тоді як для комплексів  $Cs_2Eu_2L_4$  і  $(HNEt_3)_2Eu_2L_4$  дана смуга зміщена в область більших довжин хвиль та має максимум при 614 нм. Для трьох комплексів європію -  $(NH_4)_2Eu_2L_4$ ,  $(NMe_4)_2Eu_2L_4$  та  $NEt_4Na_2Eu_2L_4$  смуга переходу  $^5D_0 \rightarrow ^7F_4$  має помітно вищу інтенсивність, ніж для інших трьох одержаних сполук.

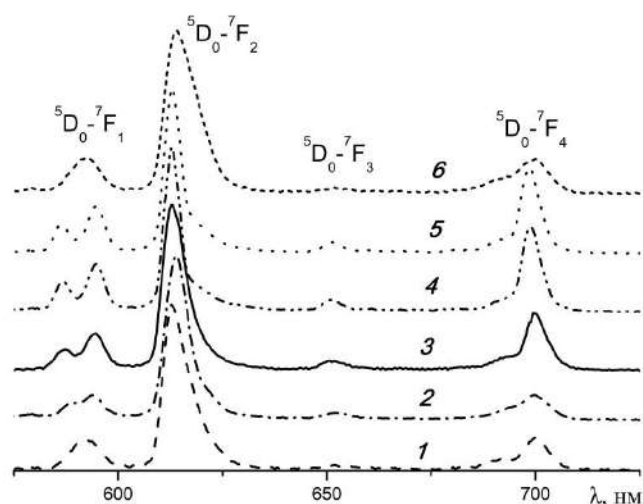


**Рис. 2.** Нормалізовані спектри люмінесценції біядерних тетракіс-комплексів  $\text{Na}_2\text{Ln}_2\text{L}_4$  (1),  $\text{Cs}_2\text{Ln}_2\text{L}_4$  (2),  $(\text{NH}_4)_2\text{Ln}_2\text{L}_4$  (3),  $(\text{NMe}_4)_2\text{Ln}_2\text{L}_4$  (4),  $\text{NEt}_4\text{Na}_2\text{Ln}_2\text{L}_4$  (5) та  $(\text{HNEt}_3)_2\text{Ln}_2\text{L}_4$  (6).

Таким чином, на прикладі біядерних тетракіс-комплексів РЗЕ з тетраметил(2,2,3,3,4,4-гексафторо-1,5-діоксопентан-1,5-діл)-біс-амідофосфатом продемонстровано, що вплив природи позасферного катіону на властивості комплексних сполук може бути суттєвим та визначати перспективи їх можливого застосування. Отримані результати можуть бути корисними при проектуванні та вдосконаленні фотофізичних характеристик перетворювачів електромагнітного випромінювання на основі комплексів лантанодів.

1. Bünzli J.-C. G. *Rising Stars in Science and Technology: Luminescent Lanthanide Materials*. - *Eur. J. Inorg. Chem.* – 2017. – V. 44. – P. 5058-5063.

2. Jia J. H., Li Q. W., Chen Y. C., Liu J. L., Tong M. L. *Luminescent single-molecule magnets based on lanthanides: Design strategies, recent advances and magneto-luminescent studies*. - *Coordination Chemistry Reviews*. – 2019. – V. 378. – P. 365-381.

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

Кіосе Т.О.<sup>1</sup>, Раскола Л.А.<sup>1</sup>, Бакуменко А.-Д. В.<sup>1</sup>, Лагутова А.Д.<sup>1</sup>, Голубчик К.О.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, [kiosetatyana@gmail.com](mailto:kiosetatyana@gmail.com)

<sup>2</sup>Одеський національний медичний університет

Діоксид сульфуру ( $\text{SO}_2$ ) є одним з найбільш поширених забруднювачів довкілля. Для зменшення його рівня в атмосфері використовують різні хемосорбенти та каталізатори. Серед каталізаторів особливо вивчені рідкофазні металокомплексні, а також оксидні та металеві, які проявляють активність при високих температурах. Проте, нанесені на різні носії металокомплексні каталізатори залишаються малодослідженими, хоча їх виготовлення є простим, а активність може варіюватися в широких межах завдяки вибору солей d-металів, типу носія та інших складових каталітичних систем. Особливу увагу слід приділити подвійним системам, у яких спільна присутність іонів металів може призводити до синергетичного ефекту. Відомо, що реакційну здатність іонів металів можна змінити, закріплюючи їх на різних носіях. Проте інформація про використання таких зразків у реакціях з діоксидом сульфуру є досить обмеженою. Для іонів металів зі змінною валентністю використовують  $\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Mn}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}$  і  $\text{Pd}^{2+}$ , а носіями виступають як природні,



так і синтетичні цеоліти. На кафедрі неорганічної хімії та хімічної освіти Одеського національного університету імені І.І. Мечникова проводяться систематичні дослідження, спрямовані на розробку методів очищення повітря від діоксиду сульфуру. Отже, однією з важливих задач є створення хемосорбентів для  $\text{SO}_2$ , які можуть бути використані в засобах захисту органів дихання. Це вимагає вивчення активності природних та модифікованих сорбентів при концентрації  $\text{SO}_2$  у повітрі на рівні 15 ГПК, що є максимальною концентрацією токсичної речовини, за якої можливе використання легких індивідуальних засобів захисту дихальних шляхів, таких як респіратори. Як сорбенти діоксиду сульфуру та носії металокомплексних композицій для знешкодження  $\text{SO}_2$  використовували природний трепел (П-Тр) і природний бентоніт (П-Бент). Композиції  $\text{M}_i\text{Cl}_j/\text{S}$  ( $\text{S} = \text{П-Тр}, \text{П-Бент}$ ;  $\text{M} = \text{Cu}^{2+}, \text{Co}^{2+}, \text{Fe}^{3+}, \text{Pd}^{2+}; \text{Mn}^{2+}$ ;  $\text{CuCl}_2\text{-M}_i\text{L}_j/\text{S}$  ( $\text{M} = \text{Fe}^{3+}, \text{Pd}^{2+}$ ) приготовлені методом імпрегнування водно-спиртовими розчинами відповідних солей природних трепелу та бентоніту. Зразки сушили при  $110^\circ\text{C}$  у повітряному середовищі до сталої маси. Встановлено, що використані в роботі природні сорбенти не є дійсними мінералами і характеризуються складним фазовим складом. У природному бентоніті поряд з основною фазою монтморилоніту в різних кількостях присутні кальцит,  $\alpha$ -кварц і аморфний  $\text{SiO}_2$ ; тоді як трепел є кристалічним мінералом, що містить чотири основні фази –  $\alpha\text{-SiO}_2$ ,  $\alpha$ -тридиміт,  $\beta$ -кristобаліт і  $\alpha$ -кristобаліт. ІЧ-спектральні дослідження також підтвердили поліфазний характер цих природних мінералів.

На рис. наведено кінетичні криві в координатах  $\text{C}_{\text{SO}_2} - \tau$ , отримані у ході пропускання ГПС через нерухомий шар моно- та біметальних композицій на основі, природних бентоніту і трепелу. Кінетичні криві для природного бентоніту, модифікованого солями феруму(III), купруму(II) і паладію(II), характеризуються невеликими ділянками, на яких відбувається повне поглинання  $\text{SO}_2$ , після чого  $\text{C}_{\text{SO}_2}$  зростає і досягає початкової концентрації діоксиду сульфуру. При цьому, найбільшу активність виявили монометальні композиції  $\text{CuCl}_2/\text{П-Бент}$  і  $\text{FeCl}_3/\text{П-Бент}$ . Процес поглинання діоксиду сульфуру різко змінюється для біметальної композиції  $\text{CuCl}_2\text{-K}_2\text{PdCl}_4/\text{П-Бент}$ , у присутності якої, на відміну від композиції  $\text{CuCl}_2\text{-FeCl}_3/\text{П-Бент}$ , досягається стаціонарний режим процесу, що вказує на істинно каталітичний характер її дії. Для біметальних систем з урахуванням  $\tau_{\text{ГПК}}$  нами розрахований коефіцієнт синергізму  $K_S$ , як відношення значення  $\tau_{\text{ГПК}}$  для біметальної композиції до суми цих показників для відповідних монометальних композицій. Для досліджених біметальних систем на основі природного бентоніту значення  $K_S > 1$ , що вказує на синергізм дії  $\text{Cu(II)-Fe(III)}$  і  $\text{Cu(II)-Pd(II)}$  в реакції окиснення діоксиду сірки киснем.

Встановлено, що активність монометальних композицій у процесі поглинання діоксиду сульфуру визначається природою іона металу і носія. 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 ( $\tau_0$  і  $\tau_{\text{ГПК}}$ ), сорбційні ( $Q_{\text{експ}}$ ) 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 сірки, що робить їх більш перспективними для застосування у засобах захисту органів дихання.

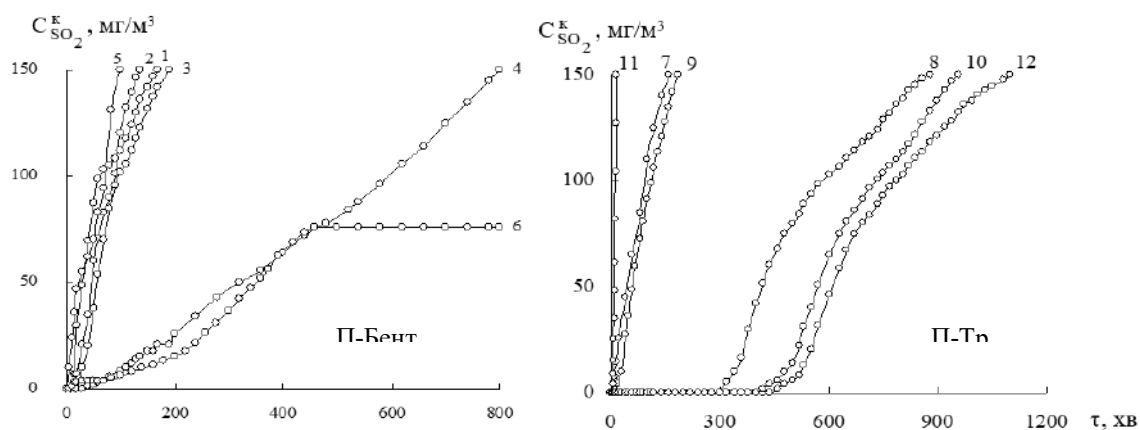


**Рис.** Зміна  $C_{SO_2}$  з часом у ході пропущення газоповітряної суміші через шар П-Бент (1) і композицій на його основі (2-6), в також шар П-Тр (7) і композицій на його основі (8-12) (нумерація кривих на рис. відповідає нумерації композицій у табл.).

**Таблиця**

Параметри процесу поглинання діоксиду сульфуру у ході пропущення ГПС через нерухомі шари природних бентоніту і трепелу та композицій на їх основі

$$C_{Cu(II)} = 5,9 \cdot 10^{-5}, C_{Fe(III)} = 1,0 \cdot 10^{-6}, C_{Pd(II)} = 2,72 \cdot 10^{-5} \text{ моль/г}, C_{SO_2} = 150 \text{ мг/м}^3$$

| Номер композиції | Склад композиції               | $\tau_0$ , хв | $\tau_{гпк}$ , хв | $\tau_{1/2}$ , с | $Q_{експ} \cdot 10^4$ , моль $SO_2$ | $K_s$ |
|------------------|--------------------------------|---------------|-------------------|------------------|-------------------------------------|-------|
| 1                | П-Бент                         | 10            | 15                | 2100             | 1,11                                | -     |
| 2                | $CuCl_2$ /П-Бент               | 15            | 25                | 3300             | 1,20                                | -     |
| 3                | $FeCl_3$ /П-Бент               | 25            | 30                | 3900             | 1,57                                | -     |
| 4                | $CuCl_2$ - $FeCl_3$ /П-Бент    | 30            | 110               | 27600            | 10,20                               | 2,0   |
| 5                | $K_2PdCl_4$ /П-Бент            | 1             | 5                 | 1800             | 0,77                                | -     |
| 6                | $K_2PdCl_4$ - $CuCl_2$ /П-Бент | 5             | 140               | 26400            | 12,30                               | 4,7   |
| 7                | П-Тр                           | 5             | 10                | 3900             | 0,96                                | -     |
| 8                | $CuCl_2$ /П-Тр                 | 300           | 340               | 28800            | 11,9                                | -     |
| 9                | $FeCl_3$ /П-Тр                 | 15            | 30                | 4800             | 1,86                                | -     |
| 10               | $CuCl_2$ - $FeCl_3$ /П-Тр      | 400           | 480               | 37800            | 15,1                                | 1,3   |
| 11               | $K_2PdCl_4$ /П-Тр              | 15            | 30                | 5100             | 1,65                                | -     |
| 12               | $K_2PdCl_4$ - $CuCl_2$ /П-Тр   | 440           | 520               | 40200            | 16,4                                | 1,1   |

Отже, встановлено, що активність закріплених монометальних та біметальних композицій у процесі хемосорбційно-каталітичного поглинання діоксиду сульфуру визначається природою іона металу та носія.

## ТЕОРЕТИЧНІ АСПЕКТИ ОТРИМАННЯ ВОГNETРИВКИХ ЦЕМЕНТІВ НА ОСНОВІ АЛЮМІНАТІВ ТА ТИТАНАТІВ КАЛЬЦІЮ

*Кітченко А.В.*

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»,  
[andrii.kitchenko@ihti.khpi.edu.ua](mailto:andrii.kitchenko@ihti.khpi.edu.ua)

У сучасній промисловості вогнетривкі матеріали відіграють важливу роль, особливо в металургії, енергетиці, будівництві та виробництві скла. Зростання вимог до термостійкості та міцності матеріалів у високотемпературних умовах обумовлює необхідність розробки нових вогнетривких цементів. Системи на основі алюмінатів і титанатів кальцію мають перспективні властивості, зокрема високу термостійкість, низьку теплопровідність і хімічну інертність, що робить їх привабливими для використання в агресивних середовищах і при підвищених температурах. Вивчення теоретичних аспектів формування таких цементів дозволяє розширити їх потенційне застосування та покращити характеристики.

Метою даного дослідження є аналіз теоретичних основ отримання вогнетривких цементів на основі алюмінатів і титанатів кальцію, а також визначення оптимальних умов для синтезу цементів з підвищеними властивостями термостійкості та зносостійкості.

Теоретичний аналіз впливу співвідношення алюмінатних та титанатних компонентів на властивості вогнетривкого матеріалу дозволяє виявити оптимальні умови синтезу для досягнення високих показників термостійкості, міцності та хімічної інертності.

Алюмінати кальцію, як-от  $\text{CaAl}_2\text{O}_4$ ,  $\text{CaAl}_2\text{O}_4$ , і титанати кальцію, як-от  $\text{CaTiO}_3$ ,  $\text{CaTiO}_3$ , утворюють структури з різними температурними стійкостями та розмірами кристалічних ґраток. Зі збільшенням титанатних компонентів можна спостерігати зростання стійкості матеріалу до температурних змін, оскільки титанати мають більш стабільні кристалічні ґратки, які протидіють розширенню при нагріванні. Алюмінати ж забезпечують швидке утворення міцних зв'язків і високий рівень твердості.

Алюмінати кальцію широко використовуються у вогнетривких бетонах завдяки їх високій термостійкості та швидкому набору міцності. Титанати кальцію, у свою чергу, демонструють відмінну хімічну інертність, низьку теплопровідність та здатність зберігати структурну стабільність при високих температурах. Основні переваги таких цементів:

- Висока термостійкість (понад 1500 °C);
- Швидкий процес твердіння;
- Висока механічна міцність;
- Стійкість до агресивних середовищ;
- Низький коефіцієнт теплового розширення.

Підвищення вмісту алюмінатів кальцію зазвичай сприяє зменшенню пористості матеріалу завдяки ущільненню структури під час синтезу. Водночас надмірне зростання вмісту титанатів може призвести до збільшення щільності, але з ризиком появи мікротріщин через нерівномірне розширення кристалів. Оптимальне співвідношення обох компонентів дозволяє досягти зниженої пористості при збереженні стабільної щільності матеріалу.

Титанати кальцію проявляють високу стійкість до термічного розширення, що знижує ризик деформації матеріалу при високих температурах і температурних циклах. Збільшення частки титанатних компонентів в алюмінатно-титанатній системі підвищує температурну стійкість, але водночас зменшує теплопровідність, що може бути корисним для умов високих температур, де важлива стійкість до теплових ударів.

Алюмінати кальцію забезпечують високу початкову міцність, але при підвищених температурах можуть поступатися титанатним компонентам за стійкістю до деформацій. Додавання титанатів до складу матеріалу стабілізує міцність при нагріванні. Теоретично, оптимальне співвідношення алюмінатів і титанатів дозволяє досягти балансу між початковою міцністю матеріалу та його здатністю зберігати ці властивості при тривалому впливі високих температур.

Для отримання вогнетривких цементів на основі алюмінатів та титанатів кальцію можливі наступні підходи:

1. **Твердофазний синтез** – взаємодія вихідних компонентів при високих температурах для утворення відповідних фаз.

2. **Хімічне осадження** – отримання наноструктурованих компонентів з покращеними властивостями.

3. **Соль-гелевий метод** – синтез матеріалів з контрольованою морфологією та високою чистотою фаз.

Поєднання алюмінатів та титанатів кальцію забезпечує високу хімічну стійкість матеріалу до агресивних середовищ, таких як кислоти, луги або флюси, що є важливим для експлуатації в хімічно активних умовах. Оптимальне співвідношення підвищує стійкість матеріалу до взаємодії з шкідливими речовинами, зокрема в металургії або енергетиці.

Розробка вогнетривких цементів на основі алюмінатів та титанатів кальцію відкриває нові можливості у створенні матеріалів із покращеними експлуатаційними характеристиками. Перспективним напрямом є подальша оптимізація складу та технології отримання таких цементів, що дозволить значно розширити їх застосування у високотемпературних процесах.

1. Korohodska A. M. Development of concrete compositions based on aluminochromite cements / A. M. Korohodska, H. M. Shabanova, S. M. Logvinkov // Chemical technologies for reconstructing Ukraine in the war and post-war periods: Collective monograph.—Riga, Latvia: «Baltija Publishing»—2023.— P. 25–41.

2. Гамова О. О. Вогнетривкий цемент на основі композицій системи  $\text{BaO-CoO-Al}_2\text{O}_3$  [Електронний ресурс] : дис. ... д-ра філософії : спец. 161 : галузь знань 16 / Ольга Олександрівна Гамова ; наук. керівник Шабанова Г. М. ; Нац. техн. ун-т "Харків. політехн. ін-т". – Харків, 2020. – 241 с. – Бібліогр.: с. 192-216.

## ІЗОТЕРМІЧНИЙ ПЕРЕРІЗ ДІАГРАМИ СТАНУ СИСТЕМИ Dy-Ti-Ge (800°C)

*Коник М.Б., Ромака Л.П., Яцків Ю.І., Стадник Ю.В.*

Львівський національний університет імені Івана Франка, [mariya.konyk@lnu.edu.ua](mailto:mariya.konyk@lnu.edu.ua)

Вивчення багатокомпонентних металевих систем є передумовою для пошуку та створення нових функціональних матеріалів з важливими для практичного застосування властивостями.

Потрійні системи R–M–Ge (R – рідкісноземельний метал, M – перехідний метал IV періоду) досліджені не у повному обсязі. Зокрема, у випадку M = Ti діаграми фазових рівноваг у повному концентраційному інтервалі побудовані для систем з R = Gd, Tb [1, 2], для інших РЗМ досліджували структурні та фізичні характеристики окремих тернарних сполук ізоструктурних рядів RTiGe (R= Y, Gd-Tm) та R<sub>2</sub>Ti<sub>3</sub>Ge<sub>4</sub> (R=Gd-Er) [3, 4].

Для побудови діаграми фазових рівноваг системи Dy–Ti–Ge сплави синтезували методом електродугового сплавлення шихти металів в атмосфері аргону. Гомогенізуюче відпалювання сплавів проводили у вакуумованих кварцевих ампулах за температури 800° С впродовж 700 год з подальшим гартуванням у холодній воді. Фазовий склад синтезованих зразків визначали на основі аналізу експериментально отриманих дифрактограм (дифрактометр ДРОН-4.0,  $\text{FeK}_\alpha$ -випромінювання). Метод енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії (ЕДРС) (електронний мікроскопом TESKAN VEGA 3 LMU) використовували для контролю хімічного складу синтезованих зразків і визначення точного вмісту компонентів у фазах. Для розрахунків та індексування порошкових дифрактограм використовували пакет програм WinCSD [5] (уточнення періодів ґратки). За температури 800° С в системі Dy–Ti–Ge підтверджено утворення двох тернарних сполук: DyTiGe (структурний тип MnAlGe,  $P4/nmm$ ,  $a=0,4048(1)$ ,  $c=0,7630(2)$  нм) та Dy<sub>2</sub>Ti<sub>3</sub>Ge<sub>4</sub> (стр. Тип Sc<sub>3</sub>Ce<sub>2</sub>Si<sub>4</sub>,  $Pnma$ ,  $a=0,7029(4)$ ,  $b=1,3449(6)$ ,  $c=0,7121(1)$  нм).

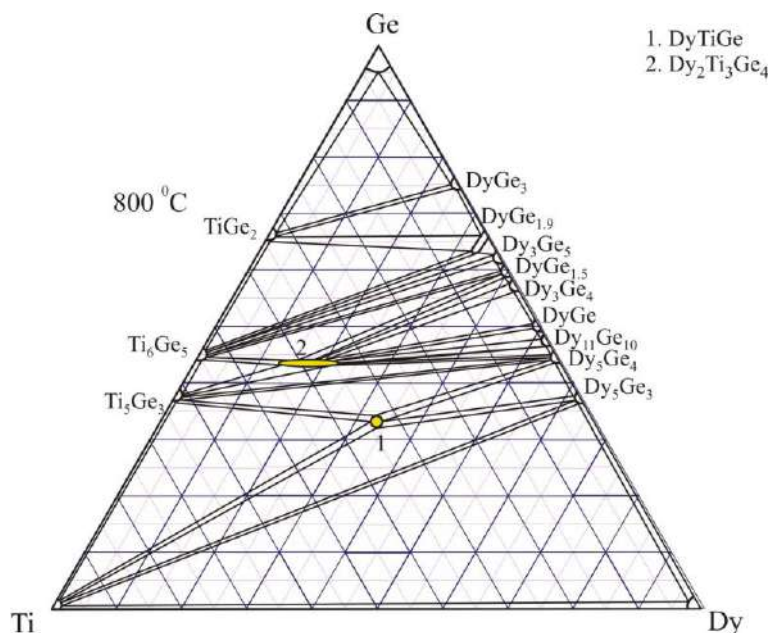


**Рис. 1.** Ізотермічний переріз діаграми стану системи Dy–Ti–Ge за 800°C.

Для сполуки  $\text{Dy}_2\text{Ti}_3\text{Ge}_4$  виявлено значну область гомогенності вздовж ізоконцентрати германію, яка за даними ЕДРС обмежується складами  $\text{Dy}_{13,38}\text{Ti}_{42,57}\text{Ge}_{44,05}$  –  $\text{Dy}_{22,27}\text{Ti}_{32,86}\text{Ge}_{44,87}$ . Розчинність третього компонента в бінарних сполуках системи Ti–Ge за умов дослідження є незначною (до ~2,5 ат. %). В системі Dy–Ge бінарна сполука  $\text{DyGe}_{1,9}$  (стр. тип  $\text{TbGe}_2$ ) розчиняє до ~4 ат. % Ti, що підтверджується результатами ЕДРС аналізу ( $\text{Dy}_{33,86}\text{Ti}_{3,65}\text{Ge}_{62,49}$ ). Періоди ґратки змінюються в межах  $a=0,4093(1)\text{--}0,4091(3)$ ,  $b=2,8789(3)\text{--}2,9909(4)$ ,  $c=0,3980(2)\text{--}0,3983(3)$  нм. Помітної розчинності титану в інших бінарних сполуках системи Dy–Ge не спостерігалось. Фотографії мікроструктур окремих сплавів наведено на рис. 2.

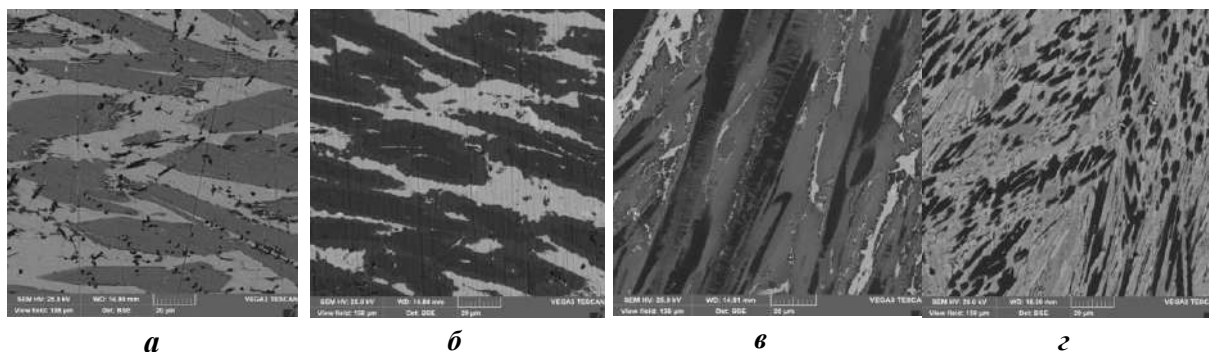


**Рис. 2** Фотографії мікрошліфів сплавів системи Dy–Ti–Ge:

- а)  $\text{Dy}_{20}\text{Cr}_{32}\text{Ge}_{48}$  (сіра фаза  $\text{Dy}_2\text{Ti}_3\text{Ge}_4$ , світла фаза  $\text{DyGe}_{1,5}$ , чорна фаза  $\text{Ti}_6\text{Ge}_5$ ); б)  $\text{Dy}_{10}\text{Ti}_{35}\text{Ge}_{55}$  (світла фаза  $\text{DyGe}_2$ , темносіра фаза  $\text{TiGe}_2$ , чорна фаза  $\text{Ti}_6\text{Ge}_5$ ); в)  $\text{Dy}_{10}\text{Ti}_{45}\text{Ge}_{45}$  (світла фаза  $\text{DyGe}_{1,5}$ , сіра фаза  $\text{Dy}_2\text{Ti}_3\text{Ge}_4$ , чорна фаза  $\text{Ti}_6\text{Ge}_5$ ); г)  $\text{Dy}_{25}\text{Ti}_{40}\text{Ge}_{35}$  (сіра фаза  $\text{DyTiGe}$ , світла фаза  $\text{Dy}_5\text{Ge}_4$ ; чорна фаза  $\text{Ti}_5\text{Ge}_3$ ).

1. Morozkin A.V., Seropegin Yu.D., Sviridov I.A., Moskalev V.A. *J. Alloys Compd.* – 1998. – 281(2). – 228-232.
2. Morozkin A.V. *J. Alloys Compd.* – 1999. – 287. – 185-188.
3. Nikitin S.F., Tskhadadze I.A., Telegina I.V., Morozkin A.V., Seropegin Yu.D. *J. Magn. Mater.* – 1998. – 182(3). – 375-380.



4. Morozkin A.V., Seropegin Yu.D., Portnoy V.K., Leonov A.V., Sviridov I.A. *J. Alloys Compd.* – 1998. – 278 (1-2). – L8-L9.
5. Akselrud L., Grin Yu. WinCSD: software package for crystallographic calculations (Version 4). *J. Appl. Cryst.* – 2014. – 47. – 803.

*Роботу виконано в рамках гранту МОН України № 0124U000989. Автори М. Коник, Л. Ромака, Ю. Стадник вдячні за фінансову підтримку Simons Foundation (PD-Ukraine-00014574).*

## **ЕЛЕКТРОХІМІЧНЕ ВИЛУЧЕННЯ МІДІ З КОНЦЕНТРОВАНИХ РІДКИХ ВІДХОДІВ**

*Корчик Н.М., Буденкова Н.М., Мисіна О.І.*

Національний університет водного господарства та природокористування,

[o.i.mysina@nuwm.edu.ua](mailto:o.i.mysina@nuwm.edu.ua)

Антропогенне навантаження на навколишнє середовище невинно збільшується із року в рік. Одним з важливих питань охорони навколишнього середовища та раціонального використання ресурсів є утилізація відходів гальванічних виробництв. Такими відходами гальванічних виробництв є відпрацьовані технологічні розчини і електроліти технологічних розчинів, які періодично надходять у стічні води від основних технологічних операцій [1]. В даний час питання вилучення металів з відходів гальванічного виробництва є досить актуальним. Основними методами обробки є: хімічна (нейтралізація, хімічне осадження, окиснювально-відновлювальна обробка); електрохімічна (пряма, діафрагмова, селективний електроліз, електродіаліз); масообмінна (йонобмін, сорбція, кристалізація, екстракція). Серед всіх цих методів доволі перспективним є електрохімічна очистка відходів гальванічних виробництв [2].

В лабораторних умовах були проведені дослідження електрохімічного вилучення міді на дослідній моделі діафрагмового електролізера з графітовими електродами. Основні технологічні параметри досліді:

- густина струму на електродах  $i = 50 - 800 \text{ А/м}^2$ ;
- витрата струму  $D = I \cdot t / V = 1000 - 500000 \text{ Кл/л}$  (де  $I$  – сила струму, А;  $t$  – час, с;  $V$  – об'єм, л).

Концентрацію йонів купруму у відходах, а також в ході і в результаті обробки визначали за відомими стандартними методиками.

Вилучення міді здійснюється шляхом його відновлення на катоді у вигляді металеві фольги або порошку, окиснення відходів – шляхом взаємодії з продуктами анодних реакцій. В результаті електролізу також можливо забезпечити і утилізацію та регенерацію інших компонентів відходів, а саме кислот та лугів, які утворюються у відповідних камерах діафрагми електролізера. Переробка відходів повинна передбачати утилізацію електролізних газів. В даній роботі були проведені дослідження та їх узагальнення по електрохімічному вилученню міді з відходів гальванічного виробництва, що дозволило б створити централізовані ділянки по вилученню міді у формі порошку або фольги, що надалі забезпечує її утилізацію (повторне використання).

Лабораторні дослідження представлені в табличній та графічній формах.

За результати досліджень була встановлена необхідність коректування хімічного складу відходів з метою створення оптимальних умов вилучення металів у формі катодних осадів, що залежать від технологічних параметрів обробки, а також від властивостей рідкої фази відходів. Відомо, що зниження енерговитрат катодного вилучення металів з водного середовища забезпечується зниженням поляризаційних ефектів за рахунок коректування окисно-відновних (Eh) та кислотно-основних його властивостей (pH).

Тому принципова технологічна схема катодного вилучення міді для відходів, що містять Купрум, включає наступні технологічні зв'язки [3]:





Для купрумівмісних розчинів особливістю катодного вилучення є відносно високий вихід по струму на катоді та можливість застосування розчину після вилучення металу з відходів як кислого реагенту для операцій підтравлювання та травлення на основі персульфат – та сульфату купруму.

Принципова схема включає: обробку в діафрагменому електролізері, змішування продуктів електролізу з реагентами в реакторі РТЗ-П (реактор-змішувач періодичної дії) без регулювання температури в системі рідина – тверда речовина. Продуктивність, що передбачається від одного цеху – 200 кг/рік в об’ємі 50м<sup>3</sup>/рік [3].

Результати лабораторних досліджень та математичного моделювання представлені в таблиці.

**Таблиця**

Результати лабораторних досліджень та математичного моделювання оптимальних умов вилучення міді

| Тип відходів                                               | Операційний режим              | Найменування показників                                 | Діапазон зміни параметрів                               | Математичні вирази взаємодії                                                                               |
|------------------------------------------------------------|--------------------------------|---------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Рідкі відходи гальванічного виробництва, що містять Купрум | Електроліз (катодне вилучення) | $\alpha$ – ступінь перетворення<br>$D$ – витрата струму | $\alpha = 1-100\%$<br>$D = 50000 - 250000 \text{ Кл/л}$ | $D = f(\alpha) = 0.05886944\alpha^4 + 16.2737\alpha^3 - 1644.3604\alpha^2 + 75632.0233\alpha - 1305272.79$ |

На основі досліджень розроблена схема вилучення міді з відходів гальванічного виробництва. Вона включає як основний елемент електролізер оригінальної конструкції, який дозволяє вилучити метал в формі зручній для подальшого використання. Окремі елементи схеми апробовані в промислових умовах.

1. Корчик Н.М., Белікова С.В. Очищення стічних вод гальванічного виробництва. – *Співробітництво для вирішення проблем з відходами* : зб. статей VII-ої Міжнародної конференції. – Харків, 2010. – С.143-145.

2. Нестер А. А., Корчик Н. М., Баран Б. Л. Стічні води підприємств та їх очищення : монографія. – Хмельницький, 2008. – 160 с.

3. Корчик Н.М., Буденкова Н.М., Сень О.М. Електрохімічні процеси вилучення металів з відходів гальванічного виробництва. – *Вісник НУВГП* : зб. наук. праць. – Рівне, 2013. – Вип.3 (63). – С.133–141.

## ЗАСТОСУВАННЯ КІНЕТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ДО ОПИСУ ПРОЦЕСІВ АДСОРБЦІЇ ДОКСОРУБІЦИНУ НА ПОВЕРХНІ НАНОМАГНЕТИТУ

Кусяк Н.В.<sup>1</sup>, Мельник І.В.<sup>2</sup>, Свиридчук К.П.<sup>1</sup>, Горбик П.П.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Житомирський державний університет імені Івана Франка, Україна, [nkusyak@ukr.net](mailto:nkusyak@ukr.net)

<sup>2</sup>Інститут геотехніки Словацької академії наук, Словаччина

<sup>3</sup>Інститут хімії поверхні НАН України, Україна

Магніточутливі матеріали на основі  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  із прогнозованими параметрами та властивостями є біодоступними та характеризуються задовільними адсорбційно-десорбційними показниками. Тому розробка та оптимізація методів синтезу нанорозмірних матеріалів на основі  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  не втрачають своєї актуальності. Важливим етапом прогнозування механізмів процесів адсорбції є моделювання експериментальних даних оцінки адсорбційної здатності матеріалу. Орієнтовані на процес адсорбції кінетичні параметри застосовуються для моделювання експериментальних даних. Достовірність експериментального результату також підтверджується узгодженням експериментальних та прогнозованих параметрів.

В даній роботі обговорено кінетичні моделі, які було застосовано до опису адсорбції доксорубіцину (DOX) на поверхні нанорозмірного магнетиту, який синтезували за реакцією Елмора. Одержані зразки наночастинок мали середній розмір ( $d_0$ ) 6–12 нм, розрахований при аналізі рентгенографічних дифрактограм за формулою Шеррера, питому поверхню ( $S_p$ )  $\sim 90$ – $110 \text{ м}^2/\text{г}$ , намагніченість насичення  $\sigma_s = 62,6 \pm 2,5 \text{ \% Гс} \cdot \text{см}^3/\text{г}$  та характеризувалися абсолютною однодоменністю (рис.). За даними термогравіметричного аналізу вміст функціональних ОН-груп дорівнює  $2,2 \text{ ммоль/г}$ .

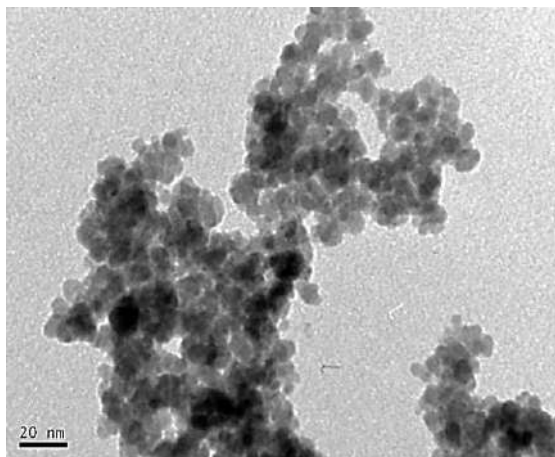


**Рис.** ТЕМ зображення нанорозмірного  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ .

Дослідження кінетики адсорбції DOX на поверхні нанорозмірного  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  здійснено при концентрації  $C_0 = 0,0758 \text{ мг/мл}$  ( $g = 0,03 \text{ г}$ ,  $V = 5 \text{ мл}$ ) у фізіологічному розчині протягом 3 годин в статичному режимі при кімнатній температурі. Кількість адсорбованої речовини на поверхні визначали вимірюванням концентрації DOX спектрофотометричним методом ( $\lambda = 480 \text{ нм}$ ). Для розрахунку кінетики адсорбції застосовували математичні моделі, які використовуються для опису процесів іммобілізації препаратів з водних розчинів різними адсорбентами. Дані з кінетики адсорбції DOX апроксимували з використанням моделей псевдопершого порядку (модель Лагергрена), псевдодругого порядку, яка широко використовується для аналізу кінетики однокомпонентної адсорбції на межі адсорбент-

адсорбат, а також моделей Єловича та Аврамі, моделей зовнішньої дифузії, внутрішньої дифузії Бойда, Веббера-Морріса та Бенгхема.

За значеннями теоретично розрахованих величин сорбційної ємності, які максимально близькі до експериментальних та вищим коефіцієнтам кореляції ( $R^2 \geq 0,95$ ) перевага надана моделі псевдодругого порядку, а також моделям внутрішньої дифузії Аврамі та Бенгхема. Зокрема, відповідно до моделі псевдодругого порядку можна припустити, що швидкість адсорбції лімітується хімічною адсорбцією. А значення константи Аврамі ( $n_A = 0,4$ ) свідчить, що розподіл адсорбату на адсорбенті є однорідним. Крім того, в моделі Бенгхема графічна залежність  $\ln(\ln(C_0/(C_0 - A \cdot m))) = f(\ln t)$  близька до лінійної, що вказує на значний внесок дифузії в порох, яка також контролює швидкість адсорбції.

# КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ІНІЦІАЦІЇ ПОЛІМЕРИЗАЦІЇ ЕТИЛЕНУ ЗА УЧАСТІ $\pi$ -КОМПЛЕКСІВ $\text{Cu}^+$

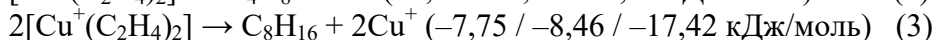
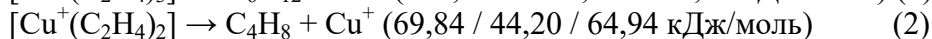
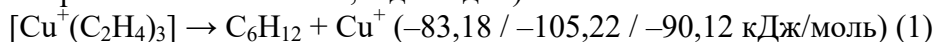
Лучинський Н.В., Осокін Є.С.,

ТОВ «Дніпровський ліцей Primus Inter Pares School», [osokin@cf.dnu.dp.ua](mailto:osokin@cf.dnu.dp.ua)

В роботі [1] є відомості про існування  $\pi$ -комплексів складу  $[\text{Cu}^+(\text{C}_2\text{H}_4)]^+$ ,  $[\text{Cu}^+(\text{C}_2\text{H}_4)_2]^+$ ,  $[\text{Cu}^+(\text{C}_2\text{H}_4)_3]^+$ . А так як, через перерозподіл заряду в системі, збільшується вірогідність ініціації радикальної полімеризації, представляло інтерес дослідити такі процеси з використанням квантово-хімічного моделювання, з метою розрахунку енергетичних ефектів утворення бірадикалів та циклоalkanів з  $\pi$ -комплексів складу  $[\text{Cu}^+(\text{C}_2\text{H}_4)_n]^+$ , де  $n = 1-3$ .

Квантово-хімічне моделювання виконувалось з використанням програмного пакету Gaussian 16, методом DFT/B3LYP, в сольватаційній універсальній моделі SMD. Іони  $\text{Cu}^+$  описувались базисним набором Wachters+f, а для атомів Карбону та Гідрогену – 6-311G(d, p). Застосування цих базисних наборів добре показали себе в попередніх роботах [2,3]. Енергетичні ефекти розраховувались за різницями енергій продуктів та реагентів. В якості енергетичного параметру, для яких було обрано суму повної електронної енергії та корекційної поправки до нульових коливань.

Було показано, що не зважаючи на активацію подвійного зв'язку етилену утворення бірадикалів  $\text{C}_4\text{H}_8^\cdot$ ,  $\text{C}_8\text{H}_{16}^\cdot$  та  $\text{C}_6\text{H}_{12}^\cdot$  з  $\pi$ -комплексів  $[\text{Cu}^+(\text{C}_2\text{H}_4)]^+$ ,  $[\text{Cu}^+(\text{C}_2\text{H}_4)_2]^+$  (рис. 1а) та  $[\text{Cu}^+(\text{C}_2\text{H}_4)_3]^+$  (рис. 1б) є термодинамічно не вигідними процесами. Про що свідчать позитивні значення енергетичних ефектів повної електронної енергії з сумами корекційних поправок до нульових коливань, енергії Гібса та ентальпії. При цьому було встановлено, що термодинамічно вірогідними є деякі процеси утворення циклоalkanів (енергетичні ефекти ZPE / енергія Гібса / ентальпія, відповідно).



Видно, що реакція з утворенням циклобутану є термодинамічно не вигідною. Це вочевидь пов'язано з напруженістю орбіталей для  $\text{sp}^3$ -гібридизованих атомів Карбону в циклобутані. Також слід зазначити, що енергетичні ефекти утворення як циклоalkanів так і алкільних бірадикалів з  $\pi$ -комплексу  $[\text{Cu}^+(\text{C}_2\text{H}_4)_3]^+$  енергетично більш вигідніші ніж з  $\pi$ -комплексів  $[\text{Cu}^+(\text{C}_2\text{H}_4)]^+$  та  $[\text{Cu}^+(\text{C}_2\text{H}_4)_2]^+$ .

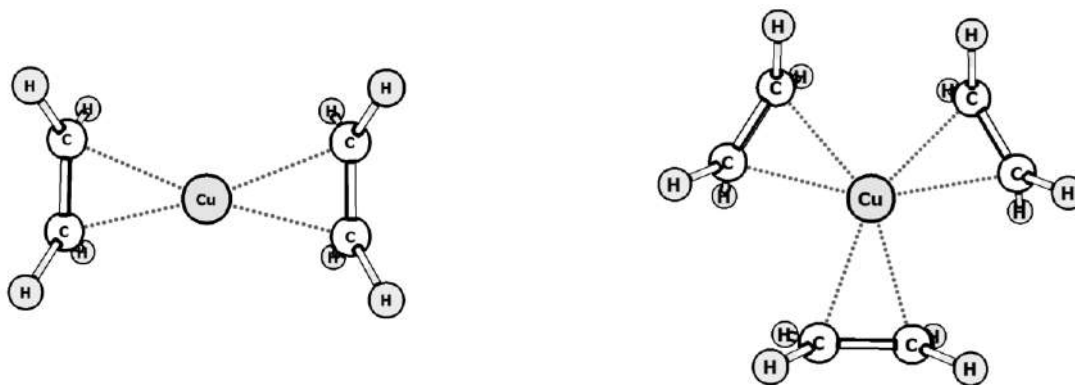


Рис. 1.  $\pi$ -Комплекси  $\text{Cu}^+$ : а –  $[\text{Cu}^+(\text{C}_2\text{H}_4)_2]^+$ , б –  $[\text{Cu}^+(\text{C}_2\text{H}_4)_3]^+$ .

1. Howard J. A. et al. Electron paramagnetic resonance spectra and structures of copper-ethylene complexes ( $\text{Cu}[\text{C}_2\text{H}_4]$ ,  $\text{Cu}[\text{C}_2\text{H}_4)_2$  and  $\text{Cu}[\text{C}_2\text{H}_4)_3$ ) in hydrocarbon matrixes // *Journal of Physical Chemistry*. – 1990. – Vol. 94, No. 4. – P. 1275–1279.

2. Vargalyuk V.F. . et al. Features of ( $d\pi$ - $\pi$ )-binding of Cu(I) ions with acrylic, maleic and fumaric acids in aqueous solution // *J. Chem. Technol.* – 2019. – Vol. 27. – P. 148–157.

3. Vargalyuk V. F. . et al. Formation of the  $\pi$ -complexes of copper atoms with acrylic, maleic and fumaric acids in aqueous medium // *J. Chem. Technol.* – 2020. – Vol. 28, No. 2. – P. 153–160.

## КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА ФАЗ СИСТЕМИ DYNiIN-DYNISn

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

Львівський національний університет імені Івана Франка,

[halyna.nychyporuk@lnu.edu.ua](mailto:halyna.nychyporuk@lnu.edu.ua)

Сполуки еквіатомного складу  $RTM$  ( $R$  – рідкісноземельний метал,  $T$  –  $d$ -метал,  $M$  –  $p$ -елемент III-V груп періодичної системи) привертають увагу різноманіттям фізичних властивостей. Під час взаємного заміщення  $p$ -елементів у системах  $RNiIn_{1-x}M_x$  ( $M = Al, Ga, Ge, Sn, Sb$ ) формуються тверді розчини різної протяжності. Утворення монокристалів у межах існування твердих розчинів та уточнення їх кристалічної структури підтверджують розчинність четвертого компонента у вихідних сполуках еквіатомного складу. Дослідження кристалічної структури фаз  $DyNiIn_{0,7}Sn_{0,3}$  і  $DyNiIn_{0,1}Sn_{0,9}$  у квазібінарній системі  $DyNiIn$ - $DyNiSn$  є предметом нашої роботи.

Монокристали для досліджень відбирали з відпалених зразків. Масиви експериментальних відбиттів  $hkl$  отримали з використанням монокристалного дифрактометра Super Nova Rigaku Oxford Diffraction (Mo  $K\alpha$ -випромінювання) в Технічному університеті м. Дрездена (Німеччина), на якому попередньо виконали контроль якості кристалів і перший етап дослідження. Структурні розрахунки проведено з використанням комплексу програм JANA 2006. Кількісний і якісний склад монокристалів встановлено за результатами EDX аналізу (скануючий електронний мікроскоп Zeiss EVO MA 15) в Інституті дослідження твердого тіла і матеріалів Лейбніца (м. Дрезден, Німеччина).

Структуру уточнено з використанням пакету програм JANA 2006 в рамках моделі структурного типу  $ZrNiAl$  [1] для фази  $DyNiIn_{0,7}Sn_{0,3}$  (ПГ  $P-62m$ ;  $hP9$ ,  $a = 0,74454(7)$ ;  $c = 0,37569(4)$  нм;  $V = 0,18036(3)$  нм<sup>3</sup>;  $R_1 = 0,0203$ ;  $wR_2 = 0,0504$ , 401 відбиття  $hkl$ ; 16 уточнених параметрів) і в рамках моделі структурного типу  $TiNiSi$  [2] для фази  $DyNiIn_{0,1}Sn_{0,9}$  (ПГ  $Pnma$ ;  $oP12$ ,  $a = 0,71086(2)$ ;  $b = 0,44508(1)$ ;  $c = 0,76560(2)$  нм;  $V = 0,24223(1)$  нм<sup>3</sup>;  $R_1 = 0,0233$ ;  $wR_2 = 0,0579$ ; 497 відбиттів  $hkl$ ; 20 уточнених параметрів). Склади статистичних сумішей (In, Sn) зафіксовано згідно складів вихідних зразків та результатів EDX аналізу: 34,0(1) ат. % Dy: 33,3(1) ат. % Ni: 21,3(1) ат. % In: 11,4(1) ат. % Sn – для зразка  $Dy_{0,33}Ni_{0,33}In_{0,24}Sn_{0,10}$  і 33,8(1) ат. % Dy: 34,5(1) ат. % Ni: 2,7(1) ат. % In: 29,0(1) ат. % Sn – для зразка  $Dy_{0,33}Ni_{0,33}In_{0,03}Sn_{0,31}$ .

У структурі фази  $DyNiIn_{0,7}Sn_{0,3}$  координаційними многогранниками для атомів диспрозію є п'ятнадцятивершинники, а для атомів статистичної суміші (In/Sn) – деформовані тетрагональні призми з центрованими бічними гранями. Атоми нікелю розміщені в центрах тригональних призм з центрованими бічними гранями (КЧ = 9). У структурі фази  $DyNiIn_{0,1}Sn_{0,9}$  атоми диспрозію знаходяться в центрах пентагональних призм з шістьма додатковими атомами навпроти бокових граней (КЧ = 16). Координаційними многогранниками для атомів нікелю і статистичної суміші Sn/In є тригональні призми з чотирма додатковими атомами (КЧ = 10).

Структури фаз  $DyNiIn_{0,7}Sn_{0,3}$  (СТ  $ZrNiAl$ ) і  $DyNiIn_{0,1}Sn_{0,9}$  (СТ  $TiNiSi$ ) можна розглядати як двовимірні гомологи на основі структури типу  $AlB_2$ , в якій ключовим структурним компонентом є тригональні призми, центровані атомами нікелю. Структура типу  $ZrNiAl$  містить шестичленні кільця, утворені атомами РЗМ, що охоплюють ізольовану призму, утворену атомами статистичної суміші, а структура типу  $TiNiSi$  – складається з зигзагоподібних ланцюгів тригональних призм, з'єднаних через спільні грані.

1. Крип'якевич П. І., Марків В. Я., Мельник Е. В. Кристалічні структури сполук  $ZrNiAl$ ,  $ZrCuGa$  і їх аналогів // *Дон. АН УРСР. Сер. А.* - 1967. - № 8. - С. 750–753.

2. Brink Shoemaker C., Shoemaker D. P. A ternary alloy with  $PbCl_2$ -type structure:  $TiNiSi(E)$  // *Acta Crystallogr.* - 1965. - Vol. - 18. - P. 900–905.

## РОЗЧИНЕННЯ 4,7-ДІОКСО-7-ФЕНІЛГЕПТАНОВОЇ КИСЛОТИ У ОРГАНІЧНИХ РОЗЧИННИКАХ РІЗНОЇ ПОЛЯРНОСТІ

*Огороднік М.Я.,<sup>1</sup> Горак Ю.І.<sup>2</sup>, Обушак М.Д.<sup>2</sup>, Собечко І.Б.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Національний університет Львівська політехніка, Україна, [marta.y.ohorodnik@lpnu.ua](mailto:marta.y.ohorodnik@lpnu.ua)

<sup>2</sup>Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів, Україна

Сполуки з гетероциклічним фрагментом є одними з найпоширеніших речовин у природі, які беруть участь у біологічних процесах. До сполук даного класу належать такі біологічно значущі речовини як хлорофіл рослин і гемін крові, пуринові та піримідинові основи нуклеїнових кислот, кумарини, гетероциклічні амінокислоти (триптофан і гістидин), імінокислоти (пролін і оксипролін), а також низка вітамінів (С, В1, В2, В3, В5, В6), коферменти (НАД, ФАД), гормони (вазопресин, окситоцин, мелатонін). Крім того, до цієї групи входять майже всі алкалоїди, антибіотики, численні лікарські засоби (анальгін, норсульфазол, нітрофурал, нітрофурантоїн, фурадонін, фуразолідон, лазалоцид, ніфуртимокс, аміодарон), барвники (індиго, акрихін, тіазол), органічні розчинники [1-2]. Широкий спектр біологічної активності виявляють сполуки з арилфурановим та арилпірольним фрагментом синтез яких відбувається за безпосередньої участі фенациллевулінових кислот.

Представлене дослідження є продовженням наших робіт з визначення термодинамічних параметрів розчинів, які проводяться упродовж десятиліття [3-4].

Дослідження розчинності 4,7-діоксо-7-фенілгептанової кислоти проводили у органічних розчинниках виробництва фірми Merck. Серед обраного ряду розчинників є представники естерів, нітрilів, кетонів, спиртів. Процес розчинення 4,7-діоксо-7-фенілгептанової кислоти проводили гравіметрично за описаною методикою [3-4]. Насичення розчину відбувалося в термостаті ( $\pm 0,1$  К) протягом 120 хвилин при 30 об/хв, після чого розчин витримували 60 хв без перемішування для осідання твердої фази. Проби (1,0-2,0 г) поміщали у зважені бюкси, герметизували, зважували, а потім випаровували розчинник при 323-373 К до сталої маси. Зважування проводили на вагах ВЛР-200 ( $\pm 0,0002$  г). Дослідження виконували при зміні температури. Відсутність петлі гістерезису свідчить про наближення до рівноважного стану.

Експериментальні дані обробляли методом найменших квадратів та представляли у лінійній формі рівняння Шредера (1), яке також представлено таблиці.

$$\ln x_2 = -\Delta_{sol}H^0/RT + \Delta_{sol}S^0/R \quad (1)$$

де  $\Delta_{sol}H^0$  та  $\Delta_{sol}S^0$  – диференційні зміни ентальпії та ентропії розчинності.

Тут і далі похибки всіх значень приведені для рівня значимості 0,95.

Термодинамічні параметри розчинення фенациллевулінових кислот, зокрема 4,7-діоксо-7-фенілгептанової, визначають взаємодію молекул кислоти та розчинника. Аналіз теплоти та ентропії змішування допомагає покращити синтез біологічно активних сполук. Крім того, розуміння процесу розчинення дозволяє визначити оптимальні умови кристалізації, що сприяє отриманню високоякісних чистих складових компонентів лікарських засобів.

**Таблиця**

Термодинамічні параметри розчинності 4,7-діоксо-7-фенілгептанової кислоти в органічних розчинниках

| Розчинник    | T <sub>1</sub> - T <sub>2</sub> , К | Рівняння прямої                                         | $\Delta_{sol}H$ ,<br>кДж/моль | $\Delta_{sol}S$ ,<br>Дж/моль·К |
|--------------|-------------------------------------|---------------------------------------------------------|-------------------------------|--------------------------------|
| метилацетат  | 276,0-295,0                         | $\ln x_2 = (12,23 \pm 0,29) - (4588 \pm 82) \cdot 1/T$  | 38,14 $\pm$ 0,68              | 101,4 $\pm$ 2,4                |
| етилацетат   | 276,0-291,0                         | $\ln x_2 = (12,53 \pm 0,36) - (4981 \pm 102) \cdot 1/T$ | 41,41 $\pm$ 0,85              | 103,9 $\pm$ 3,0                |
| ацетонітрил  | 272,0-297,0                         | $\ln x_2 = (6,99 \pm 0,31) - (3481 \pm 87) \cdot 1/T$   | 28,94 $\pm$ 0,74              | 58,1 $\pm$ 2,6                 |
| ацетон       | 272,0-296,0                         | $\ln x_2 = (1,90 \pm 0,15) - (1773 \pm 41) \cdot 1/T$   | 14,74 $\pm$ 0,34              | 15,8 $\pm$ 1,2                 |
| n-пропанол   | 275,0-302,0                         | $\ln x_2 = (8,42 \pm 0,18) - (4082 \pm 52) \cdot 1/T$   | 33,94 $\pm$ 0,43              | 70,0 $\pm$ 1,5                 |
| ізо-пропанол | 280,0-302,0                         | $\ln x_2 = (15,80 \pm 0,36) - (6142 \pm 105) \cdot 1/T$ | 51,06 $\pm$ 0,86              | 131,4 $\pm$ 2,9                |



1. Saeid H, Al-sayed H, Bader M. A review on biological and medicinal significance of furan. – 2023 // *Alq J Med App Sci.* - 6 (1):44-58.
2. Mohammed M Alawadhi, Hussein El-Kashef Synthesis of some heterocyclic compounds derived from furan: synthesis of some heterocyclic compounds derived from furan of biological importance // *Baghdad Science Journal.* – 2013. - 10 (3). - 525–536.
3. Sobechko, I., Dibrivnyi, V., Horak, Y., Velychkivska, N., Kochubei, V., Obushak, M., Thermodynamic properties of solubility of 2-methyl-5-arylfuran-3-carboxylic acids in organic solvents // *Chemistry & Chemical Technology.* – 2017. - 11(4). - 397–404.
4. Horak Y.I., Shevchenko D.S., Sobechko I.B. Thermodynamic parameters of 5-(nitrophenyl)-furan-2-carboxylic acids solutions in propan-2-ol // *Chem. Tech. App. Sub.* – 2023. -6(1): 15–21.

## ЕФЕКТИВНІСТЬ СИСТЕМИ $\text{KMnO}_4$ – NHSI – $\text{AcOH}$ У РАДИКАЛЬНО-ЛАНЦЮГОВОМУ АЕРОБНОМУ ОКИСНЕННІ КУМОЛУ

*Опейда Л.І.<sup>1</sup>, Шепарович Р.Б.<sup>2</sup>, Хавунко О.Ю.<sup>2</sup>, Волкова Л.К.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім.Л.М.Литвиненка НАН України, Київ,  
[li.opeida@gmail.com](mailto:li.opeida@gmail.com)

<sup>2</sup>Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України, Львів, Україна

Окиснення вуглеводнів (RH), алкіларенів, продуктів нафто- і вуглехімії, по C–H зв'язках є ефективним методом отримання важливих оксигенпохідних, в якому нині широко застосовуються органокаталізatori типу N-гідроксиімідів (NHI), які потужно каталізують саме стадію росту ланцюга, утворення гідропероксиду (ROOH), що приводить до зростання селективності процесу по ROOH (Sel) і довжини кінетичного ланцюга (ChL). Важливою особливістю використання NHI в аеробному окисненні є також їх здатність утворювати активні N-окисильні радикали в реакціях з широким спектром оксидантів.

Попередньо одержані [1] експериментальні результати дослідження кінетики, каталізованого N-гідроксисукцинімідом (NHSI) та перманганатом калію ( $\text{KMnO}_4$ ), низькотемпературного (40 °C) радикально-ланцюгового окиснення кумолу в ацетонітрилі (ACN) молекулярним киснем свідчать, що NHSI, каталізуючи стадію продовження ланцюгів, бере участь і у стадії ініціювання разом з  $\text{KMnO}_4$ , ініціувальна дія якого підсилюється додаванням у невеликих кількостях (0,5 %) оцтової кислоти ( $\text{AcOH}$ ). Тож мета роботи є детальніше вивчення каталітичних систем  $\text{KMnO}_4$  – NHSI та  $\text{KMnO}_4$  – NHSI –  $\text{AcOH}$ .

У табл. наведено величини швидкості поглинання кисню ( $r_{\text{O}_2}$ ) при окисненні 1,76 М кумолу в ACN при 40 °C з різним складом реакційного середовища та обчислені довжини кінетичного ланцюга і селективності по ROOH.

**Таблиця**

Величини  $r_{\text{O}_2}$ , довжини кінетичного ланцюга (ChL), селективності по ROOH (Sel) при окисненні 1,76 М кумолу в ACN при добавках  $\text{KMnO}_4$ , NHSI,  $\text{AcOH}$  і 40 °C

| № з/п | [AcOH]<br>М | [KMnO <sub>4</sub> ]<br>М | [NHSI]<br>М | $r_{\text{O}_2} \cdot 10^5$<br>М·с <sup>-1</sup> | $r_{\text{O}_2}$<br>М·год <sup>-1</sup> | ChL | Sel % |
|-------|-------------|---------------------------|-------------|--------------------------------------------------|-----------------------------------------|-----|-------|
| 1     | 0           | 0,0129                    | 0           | 0,63                                             | 0,02                                    | 6   | 75    |
| 2     | 0           | 0,0133                    | 0,01        | 1,4                                              | 0,05                                    | 13  | 87    |
| 3     | 0,066       | 0                         | 0,01        | 0,18                                             | 0,006                                   | –   | –     |
| 4     | 0,066       | 0,0133                    | 0           | 0,97                                             | 0,03                                    | –   | –     |
| 5     | 0,066       | 0,0133                    | 0,01        | 6,03                                             | 0,22                                    | 28  | 92    |
| 6*    | 0,066       | 0,0133                    | 0,04        | 32,2                                             | 1,16                                    | 74  | 97    |

\* Величина  $r_{\text{O}_2}$  обчислена при концентрації кумолу 3,5 М.

За отриманими кінетичними даними зроблено висновок, що в реакції  $\text{MnO}_4^-$  з кумолом першою стадією є саме відрив H-атома перманганат-іоном:





Швидкість генерування С-центрованих радикалів  $R^\bullet$  у цій реакції буде дорівнювати швидкості ініціювання процесу ( $r_i$ ), а швидкість поглинання кисню ( $r_{O_2}$ ), що дорівнює швидкості нагромадження ROOH, описується у цьому випадку рівнянням:

$$r_{O_2} = k_p(2k_t)^{-1/2}[RH] r_i^{1/2}. \quad (2)$$

Величина  $k_p(2k_t)^{-1/2}$  для кумолу в наших умовах складає  $3,6 \cdot 10^{-3} \text{ М}^{-1/2} \text{ с}^{-1/2}$  [2], що дозволяє обчислити за швидкостями окиснення (табл.1) константи швидкості ініціювання:  $k_{iRH} = 4,4 \cdot 10^{-5} \text{ М}^{-1} \text{ с}^{-1}$  за реакцією (1), дослід 1, та  $k_{iRHAc} = 1,0 \cdot 10^{-4} \text{ М}^{-1} \text{ с}^{-1}$  в присутності кислоти за даними дослід 4.

В системі RH–NHSI–AcOH (табл.1, дослід 3) окиснення ініціюється радикалами, утвореними за реакцією:



Радикал SINO $^\bullet$ , реагуючи з RH, бере участь у каталітичному циклі продовження ланцюгів, чим і пояснюється каталітичний ефект NHSI:



де  $k_H$ ,  $k_f$  – константи швидкості реакцій відриву H-атома радикалами SINO $^\bullet$  від зв'язку C–H кумолу та ROO $^\bullet$  від зв'язку H–ON< у NHSI відповідно. На початковій стадії для швидкості окиснення ( $r_{O_2, \text{NHSI}}$ ), вимірюваній за поглинанням кисню, справедливим є рівняння [3]:

$$r_{O_2, \text{NHSI}} = (k_p[RH] + k_f[\text{NHSI}])(2k_t)^{-1/2} r_i^{1/2}, \quad (6)$$

де  $r_i$  – швидкість ініціювання ( $r_{i, \text{NHSI}}$ ) за реакцією (3).

У системі RH–KMnO $_4$ –NHSI–AcOH (дослід 5, табл.1) швидкість окиснення в 5 разів вища за суму  $r_{O_2}$  двох дослідів 3 і 4, коли в реакційній суміші окремо діє KMnO $_4$  або NHSI. Спостережений **синергічний ефект** викликаний тим, що тут до генерування радикалів за реакціями (1) і (3), додається ще одна реакція – окисника з NHSI:



Дослідження порядків реакцій перманганату з RH та з NHSI в ацетонітрилі за реагентами показало, що залежності, визначеної за кінетичними кривими, початкової швидкості витрати MnO $_4^-$  при [AcOH] =  $6,6 \cdot 10^{-2} \text{ М}$ , [KMnO $_4$ ] =  $2,67 \cdot 10^{-4} \text{ М}$  від концентрацій кумолу при [NHSI] =  $5,33 \cdot 10^{-3} \text{ М}$  та NHSI при [RH] =  $0,11 \text{ М}$  описуються рівняннями:

$$r_{\text{MnO}_4^-, \text{RH}} \times 10^4 = 10,8 [\text{RH}] + 0,2, \quad (8a)$$

$$r_{\text{MnO}_4^-, \text{NHSI}} \times 10^4 = 174 [\text{NHSI}] + 1,0 \quad (8b)$$

з коефіцієнтами детермінації ( $R^2$ ) 0,984 та 0,991 відповідно. Лінійні залежності  $r_{\text{MnO}_4^-, \text{RH}}$  від [RH] при [MnO $_4^-$ ] << [RH] та [NHSI] = const; а також  $r_{\text{MnO}_4^-, \text{NHSI}}$  від [NHSI] при [MnO $_4^-$ ] << [NHSI] та [RH] = const, свідчать про перший порядок за RH і за NHSI в реакціях (1), (7). За величиною  $k_{iRH, \text{Ac}} = 1,0 \cdot 10^{-4} \text{ М}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$  і даними (8a, 8b) обчислено  $k_{iNHSI, \text{Ac}} = 1,6 \cdot 10^{-3} \text{ М}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$ .

За величинами  $k$  ( $\text{М}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$ ):  $k_{iRH, \text{Ac}} = 1,0 \cdot 10^{-4}$ ,  $k_{iNHSI, \text{Ac}} = 1,6 \cdot 10^{-3}$ ,  $k_{iRH} = 4,4 \cdot 10^{-5}$ ,  $k_f = 4,8 \cdot 10^3$ ,  $k_p = 0,56$ ,  $k_t = 1,2 \cdot 10^{-4}$ , які дозволяють обчислити  $r_{O_2}$  та  $r_i$ , довжини кінетичного ланцюга та селективності процесу за ROOH при варіюванні складу реакційної суміші (табл.1, дослід 1,2,5,6) можна **теоретично оцінити ефективність** системи KMnO $_4$ –NHSI–AcOH в радикально-ланцюговому окисненні кумолу при 40 °С.

Величина Sel за ROOH оцінена за ChL, яка у випадку нерозгалуженого ланцюгового процесу визначається формулою:

$$\text{ChL} = r_{O_2}/r_i. \quad (9)$$

Враховуючи, що в обриві ланцюга беруть участь два радикали, селективність обчислюється за формулою:

$$\text{Sel} = 100 \text{ ChL} / (\text{ChL} + 2), \%. \quad (10)$$

Збільшення [RH] з 1,76 М до 3,5 М та [NHSI] з 0,01М до 0,04 М значно підвищує  $r_{O_2}$  з 0,22 до  $1,16 \text{ М} \cdot \text{год}^{-1}$  та селективність по ROOH з 92% до 97% (табл.1, дослід 5,6), що співставно з кумольним методом промислового синтезу фенолу C $_6$ H $_5$ OH через окиснення киснем повітря, утворюваного при взаємодії бензолу і пропілену, кумолу до гідропероксиду кумолу,

який при дії водного розчину кислоти утворює фенол і ацетон, також промислово важливий продукт (100 – 120 °C, Sel 65 – 90%, швидкість біля 1 М год<sup>-1</sup>).

1. Opeida L.I., Sheparovych R.B., Havunko O.Yu., Volkova L.K. Potassium permanganate and N-Hydroxysuccinimide in the initiation of radical-chain aerobic oxidation of cumene. – *Theoretical and Experimental Chemistry*. – 2024. – V. 60. – P. 133–140.

2. Denisov E. T., Afanas'ev I. B. Oxidation and antioxidants in organic chemistry and biology. – CRC Press, Taylor and Francis Group, Boca Raton, FL, USA, 2005.

3. Amorati R., Lucarini M., Mugnaini V. et al. Hydroxylamines as Oxidation Catalysts: Thermochemical and Kinetic Studies. – *J. Org. Chem.* – 2003. – V. 68, N 5. – P. 1747-1754.

## ГІБРИДНІ МАТЕРІАЛИ НА ОСНОВІ КРЕМНЕЗЕМУ ТА МЕТАЛООРГАНІЧНИХ ІМІДАЗОЛЯТНИХ СТРУКТУР

*Роїк Н.В., Трофимчук І.М.*

Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, [roik\\_nadya@ukr.net](mailto:roik_nadya@ukr.net)

Дизайн пористих гібридних матеріалів на основі кремнезему та металоорганічних сполук привертає значну увагу науковців впродовж останніх десятиліть завдяки можливості створення на їх основі ефективних сорбентів, носіїв біологічно активних сполук, сенсорів, каталізаторів, тощо [1]. Зокрема, перспективним є поєднання мезопористого кремнезему типу MCM-41 з мікропористими координаційними полімерами, утвореними йонами перехідних металів та імідазольними лігандами (ZIF). На додаток до бімодальної пористої структури, високої питомої площі поверхні та великого об'єму пор, синтезовані гібридні матеріали мають унікальну будову поверхневого шару, який складається з активних поверхневих центрів кремнеземного носія та металоорганічних кристалічних структур. Особливості пористої будови та хімічної природи поверхневого шару розширюють можливості використання синтезованих матеріалів у процесах сорбційного вилучення органічних та неорганічних сполук з водного середовища.

Нами були одержані гібридні матеріали на основі мезопористих кремнеземів з поверхневими силанольними чи 3-амінопропільними групами та мікропористого ZIF-8, що складається з катіонів  $Zn^{2+}$ , тетраедрично координованих з 2-метилімідазольними лінкерними групами. Синтез кристалів ZIF-8 з ромбічною додекаедральною кристалічною структурою на поверхні MCM-41 та  $NH_2$ -MCM-41 здійснювали у водному середовищі при кімнатній температурі, використовуючи нітрат цинку та 2-метилімідазол у мольному співвідношенні 1:40. Структурні параметри вихідних та гібридних матеріалів (питома площа поверхні  $S_{\text{БЕТ}}$ , загальний об'єм пор  $V$ , об'єм мікропор  $V_{\text{мікро}}$ , діаметр пор  $D$ ), розраховані за даними низькотемпературної адсорбції-десорбції азоту, представлено у таблиці. Встановлено, що ріст кристалів ZIF-8 відбувається як на поверхні частинок, так в об'ємі пор, що призводить до зменшення їх діаметру. Крім того, реєструється поява характерних для ZIF-8 пор діаметром 1.43 та 1.49 нм, що доводить закріплення мікропористих металоорганічних сполук на поверхні кремнеземів MCM-41 та  $NH_2$ -MCM-41 відповідно.

**Таблиця**

Структурні параметри кремнеземних носіїв та гібридних матеріалів, розраховані за даними низькотемпературної адсорбції-десорбції азоту

| Матеріал              | $S_{\text{БЕТ}} (\text{м}^2 \cdot \text{г}^{-1})$ | $V (\text{см}^3 \cdot \text{г}^{-1})$ | $V_{\text{мікро}} (\text{см}^3 \cdot \text{г}^{-1})$ | $D (\text{нм})$  |
|-----------------------|---------------------------------------------------|---------------------------------------|------------------------------------------------------|------------------|
| MCM-41                | 860                                               | 0.49                                  | –                                                    | 2.58             |
| $NH_2$ -MCM-41        | 512                                               | 0.51                                  | –                                                    | 4.89             |
| ZIF-8/MCM-41          | 438                                               | 0.197                                 | 0.16                                                 | 1.43, 1.95       |
| ZIF-8/ $NH_2$ -MCM-41 | 617                                               | 0.45                                  | 0.15                                                 | 1.49, 1.87, 6.32 |

Імобілізацію ZIF-8 з ромбічною додекаедральною кристалічною структурою в поверхневому шарі кремнеземних носіїв підтверджено також даними рентгенофазового аналізу. Морфологію синтезованих ZIF-8/MCM-41 та ZIF-8/NH<sub>2</sub>-MCM-41 матеріалів візуалізовано з використанням методу скануючої електронної мікроскопії. Показано, що поверхня сферичних частинок вихідних кремнеземів вкрита ромбічними додекаедральними кристалами ZIF-8 розміром до 0.2 мкм.

Таким чином, запропоновано екологічно чистий підхід для синтезу гібридних матеріалів, що поєднують морфологію, структурні характеристики та хімічні властивості кремнеземних субстратів та металоорганічного координаційного полімера з цеолітоподібною топологією.

1. Yuan N., Zhang X., Wang L. The marriage of metal–organic frameworks and silica materials for advanced applications // *Coord. Chem. Rev.* – 2020. – 421. – P. 213442.

### АДСОРБЦІЙНА АКТИВНІСТЬ НАНОПОРИСТИХ МАТЕРІАЛІВ, ОТРИМАНИХ ЛУЖНОЮ АКТИВАЦІЄЮ З ТЕПЛОВИМ УДАРОМ

*Сабєрова В.О., Редько А.В., Тамаркіна Ю.В., Кучеренко В.О.*

Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАН України,  
[victoria.bondaletova@gmail.com](mailto:victoria.bondaletova@gmail.com)

Термопрограмована лужна активація є поширеним методом отримання нанопористих матеріалів (НМ) з питомою поверхнею 1000–4500 м<sup>2</sup>/г, які застосовуються в суперконденсаторах, при зберіганні природного газу та водню, уловлюванні екотоксикантів і парникового газу CO<sub>2</sub> [1]. Раніше запропоновано новий метод – лужна активація з тепловим ударом (ТУ-активація), у якому термопрограмоване нагрівання замінено швидким введенням зразка у нагріту (700–850°C) зону реактора [2]. Важливою перевагою ТУ-активації є те, що вона найефективніша при невеликому співвідношенні КОН/вугілля ( $R_{\text{КОН}} = 1.0$  г/г). Цей метод конвертує низькометаморфізоване вугілля у НМ з поверхнею ~2000 м<sup>2</sup>/г та розвинутою субнанопористою структурою [3]. Адсорбційні властивості таких НМ поки що не відомі, хоча їх вивчення є актуальним з огляду на потенційне практичне застосування для очищення водних та повітряних середовищ.

Мета роботи – дослідження адсорбційної активності НМ щодо фенолу, 4-хлорфенолу, барвника метиленового блакитного та Pb(II), які є типовими представниками екотоксикантів.

Дослідження виконано на зразках НМ з бурого вугілля (НМ(Б)) (2012 м<sup>2</sup>/г) та довгополумєнового вугілля (НМ(Д)) (1950 м<sup>2</sup>/г), отриманих ТУ-активацією при 800°C та  $R_{\text{КОН}} = 1.0$  г/г з виходами 22.7% та 43.4%. Саме ці зразки демонструють найбільший позитивний вплив теплового удару на пористу структуру [3]. Адсорбційну ємність  $A_{\text{АД}}$  (ммоль/г) та початкову швидкість  $h_{\text{АД}}$  (моль/г·хв), де АД – фенол (Ф), 4-хлорфенол (ХФ), метиленовий блакитний (МБ) або Pb(II) в водних розчинах визначали за методиками [4].

Кінетичні криві адсорбції (рис. 1) показують, що адсорбційні рівноваги досягаються за 2–4 год залежно від природи адсорбату. Криві погано апроксимуються моделлю I-го порядку ( $R^2 = 0,723–0,942$ ) і добре моделлю II-го порядку ( $R^2 \geq 0,963$ ). Найбільші ємності виявлено для адсорбції ХФ, найменші – для Pb(II) (таблиця). Величини  $A_{\text{АД(е)}}$  розрізняються у 4,0–4,6 рази та ростуть у ряді адсорбатів Pb(II) < МБ < Ф < ХФ. Константи  $k_2$  відповідають іншому ряду МБ < Ф < ХФ < Pb(II), а величини  $k_2$  для різних адсорбатів різняться в 11.5 рази для НМ(Б) та в 5.6 рази для НМ(Д). Виміряні ємності є досить поширеними. Згідно з літературними даними вони найчастіше знаходяться в наступних інтервалах:  $A_{\text{ХФ(е)}} = 0.33–2.52$  ммоль/г,  $A_{\text{Pb(е)}} = 0.029–1.42$  ммоль/г,  $A_{\text{МБ(е)}} = 0.021–2.58$  ммоль/г, так що отримані зразки НМ мають досить високі адсорбційні ємності [4]. Найбільша початкова швидкість спостерігається при адсорбції ХФ, найменша – при адсорбції МБ. Відмінність у швидкостях для різних адсорбатів значна – 48 разів для НМ(Д) та 56 разів для НМ(Б).

Ізотерми адсорбції апроксимуються моделями Ленгмюра ( $R^2 = 0.981\text{--}0.994$ ) і Фрейндліха ( $R^2 = 0.986\text{--}0.998$ ) з близькими похибками. Розраховані з моделі Ленгмюра ємності насичених шарів адсорбатів збільшуються в ряді  $\text{Pb(II)} < \text{МБ} < \text{Ф} < \text{ХФ}$ . Константи  $k_{\text{Ад(Л)}}$  для НМ(Б) відрізняються для різних сполук у 9.4 рази, для НМ(Д) – у 33.8 рази, тобто адсорбційна активність НМ(Д) більш чутлива до природи адсорбату.

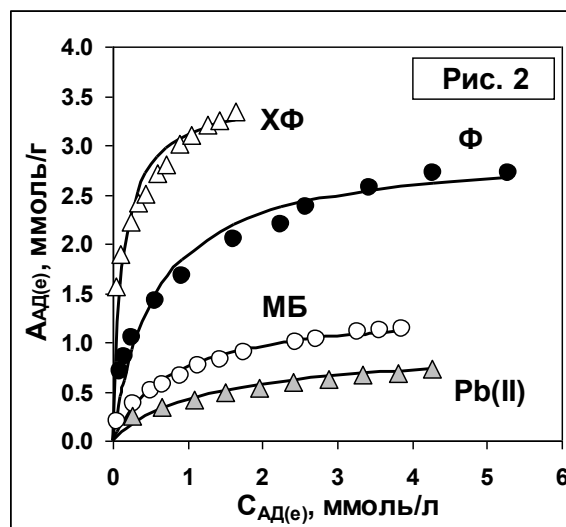
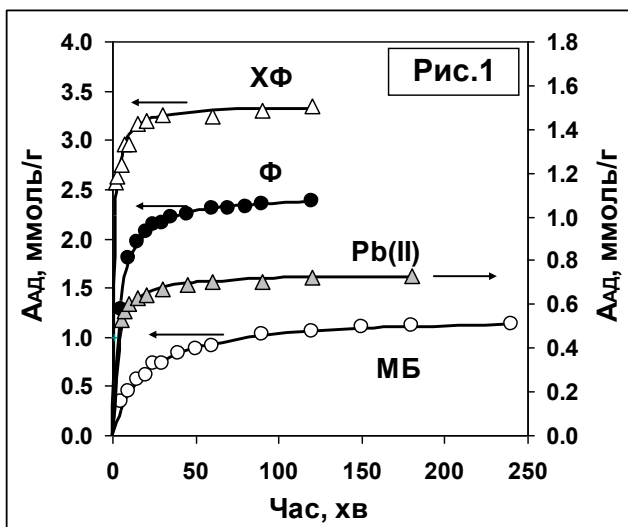


**Рис. 1.** Кінетика адсорбції зразком НМ(Б); суцільні лінії – модель II-го порядку.

**Рис. 2.** Ізотерми адсорбції зразком НМ(Б); суцільні лінії – модель Ленгмюра.

**Таблиця**

Параметри кінетичної моделі II-го порядку

| Зразок | Параметр                                          | Адсорбат |       |       |        |
|--------|---------------------------------------------------|----------|-------|-------|--------|
|        |                                                   | Ф        | ХФ    | МБ    | Рb(II) |
| НМ(Б)  | $A_{\text{Ад(е)}}, \text{ммоль/г}$                | 2.451    | 3.350 | 1.219 | 0.736  |
|        | $k_2 \times 10^2, \text{г/ммоль} \cdot \text{хв}$ | 10.3     | 29.7  | 4.36  | 50.2   |
|        | $h_{\text{Ад}}, \text{ммоль/г} \cdot \text{хв}$   | 0.62     | 3.34  | 0.06  | 0.27   |
|        | $A_{\text{Ад(с)}}, \text{мкмоль/м}^2$             | 1.22     | 1.67  | 0.56  | 0.36   |
| НМ(Д)  | $A_{\text{Ад(е)}}, \text{ммоль/г}$                | 2.561    | 4.359 | 1.200 | 1.097  |
|        | $k_2 \times 10^2, \text{г/ммоль} \cdot \text{хв}$ | 9.81     | 20.31 | 5.56  | 30.97  |
|        | $h_{\text{Ад}}, \text{ммоль/г} \cdot \text{хв}$   | 0.64     | 3.86  | 0.08  | 0.37   |
|        | $A_{\text{Ад(с)}}, \text{мкмоль/м}^2$             | 1.31     | 2.22  | 0.62  | 0.56   |

Порівняння параметрів адсорбції для двох зразків НМ показує наступне. Ємності за фенолом та МБ практично однакові; константи  $k_2$  близькі. Зразок НМ(Д) адсорбує більшу кількість ХФ (в 1.3 рази); константа  $k_2$  – в 1.5 рази більша. Цей же зразок поглинає більше катіонів свинцю (в 1.2 рази), хоча константа  $k_2$  менша (в 1.6 раза). Для всіх адсорбатів питомі адсорбційні ємності  $A_{\text{Ад(с)}}$  зразка НМ(Д) більші, ніж у НМ(Б). Для Ф та МБ таке перевищення невелике, а для ХФ та Рb(II) складає 1.33 (ХФ) та 1.55 (Рb). Більша поверхнева концентрація адсорбованих речовин ХФ та Рb(II) у зразка НМ(Д) свідчить про наявність додаткових маршрутів їх взаємодії, яка зміщує адсорбційну рівновагу. Ймовірно, НМ(Д) має додаткову кількість центрів, які активні тільки по відношенню до ХФ та Рb(II). Це може бути наслідком структурних відмінностей двох НМ, зокрема різної кількості функціональних груп (іонний обмін з Рb(II)) та графенових фрагментів просторової структури НМ ( $\pi$ -сорбція Рb(II) та ХФ) [5]. Швидкість адсорбції фенолу обома матеріалами приблизно однакова. Інші адсорбати поглинаються зразком НМ(Д) швидше: ХФ у 1.22 рази; МБ у 1.21 раз; катіони Рb(II) у 1.40 рази. До того ж, у нього розвиненіша субнанопориста

поверхня і приблизно в 2 рази більший вихід. Отже, за рівності загальної площі поверхні, зразок НМ(Д) як адсорбент є більш ефективним ніж матеріал НМ(Б) із бурого вугілля. Отримані результати дозволяють вважати синтезовані матеріали як ефективні адсорбенти для очищення водних середовищ від екотоксикантів.

1. Zhao C., Ge L., Mai L., Li X., Chen S., Li Q., Li S., Yao L., Wang Y., Xu C. Review on Coal-Based Activated Carbon: Preparation, Modification, Application, Regeneration, and Perspectives. – *Energy Fuels*. – 2023. – V.37. I.16. – P.11622–11642.

2. Кучеренко В.О., Тамаркіна Ю.В., Попов А.Ф. / Лужна активація з тепловим ударом – новий спосіб отримання нанопоруватих вуглецевих адсорбентів. – *Доп. НАН України*. – 2016. – №12. – С.74–81.

3. Sabierova V.A., Tamarkina Yu.V., Kucherenko V.A. Efficiency of thermal shock in the thermal alkaline conversion of fossil coals into nanoporous materials. – *Solid Fuel Chemistry*. – 2021. – V.55. I.2. – P.110–116.

4. Сабєрова В.О., Тамаркіна Ю.В., Рєдько А.В., Кучеренко В.О. Адсорбційні властивості нанопористих вуглецевих матеріалів, отриманих лужною активацією з тепловим ударом. – *Технології та інжиніринг*. – 2024. – №4(21). – С.111–124.

5. Zhang J., Li T., Li X., Liu Y., Li N., Wang Y., Li X. A key role of inner-cation- $\pi$  interaction in adsorption of Pb(II) on carbon nanotubes: Experimental and DFT studies. – *J. Hazardous Materials*. – 2021. – V.412. – 125187.

## ГОМО- ТА ГЕТЕРОМЕТАЛЬНІ КООРДИНАЦІЙНІ СПОЛУКИ ГЕРМАНІЮ(IV) З НІТРИЛОТРИМЕТИЛФОСФОНОВОЮ КИСЛОТОЮ

*Сахаренко Л.В., Чокан Л.О., Марцинко О.Е.*

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, [lborn@ukr.net](mailto:lborn@ukr.net)

Наноструктури фосфатів металів і інших фосфонатних сполук викликають значний науковий інтерес завдяки їхній пористій структурі, високій питомій площі поверхні, а також можливості регулювання складу та розмірів. Координаційні сполуки різних металів з лігандами, що містять фосфонові групи, демонструють високу ефективність та значний потенціал в електрохімічних технологіях [1] та інших пристроях нової техніки.

Найбільш перспективними і водночас найменш вивченими є координаційні сполуки германію(IV) з амінофосфоновими комплексонами, представником яких є нітрилотриметилфосфонові кислота  $\text{H}_6\text{NtpH}$ , яка широко використовується як хелатуючий агент у різних галузях промисловості (рис. 1).

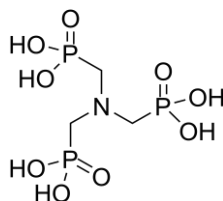


**Рис. 1.** Будова нітрилотриметилфосфонові кислоти.

Дентатність цього ліганду дорівнює сім, що перевищує характерне для германію(IV) координаційне число шість, тому, в межах поліедру германію(IV) неможлива реалізація максимальної координаційної ємності вказаного ліганду. Більш того, його молекула містить просторово розділені донорні центри, що відкриває перспективи для синтезу різнометальних координаційних сполук.

Шляхом постадійного синтезу у водному розчині вперше одержано комплексну нітрилотриметилфосфонатогерманатну кислоту, для якої на основі сукупності результатів



дослідження фізико-хімічними методами запропонована димерна будова молекули  $[\text{Ge}(\text{H}_2\text{NtpH})(\text{H}_2\text{O})_2]_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ . Реалізована ідея використання синтезованої комплексної кислоти, що містить вакантні донорні центри, в якості конструкційного блоку для отримання різнометальних комплексів. Синтезовано та виділено в твердому стані гетерометальні нітрлотриметилфосфонатогерманати(IV) ряду двовалентних металів (Co, Ni, Cu, Zn).

Досліджено термічну стійкість, встановлено гідратний склад (число молекул кристалізаційної та координованої води) усіх одержаних сполук. Показано, що до  $180^\circ\text{C}$  не відбувається розриву зв'язків металів з лігандом. Визначено, що значення магнітних моментів та характер спектрів дифузного відбиття комплексів з Co(II) та Ni(II) відповідають октаедричній будові координаційних поліедрів вказаних металів. Порівняльним аналізом ІЧ-спектрів комплексів та ліганду була одержана інформація про спосіб його координації.

Таким чином, на основі сукупності даних елементного аналізу, термогравіметрії, ІЧ-спектроскопії, магнетохімії, спектроскопії дифузного відбиття, з урахуванням характерних для досліджуваних металів ступенів окиснення та координаційних чисел, а також димерної будови комплексної нітрлотриметилфосфонатогерманатної кислоти, яка зберігається в різнометальних комплексах, було доведено утворення різнометальних координаційних полімерів розгалуженої будови.

1. Silah H., Erkmen C., Uslu B. Electrochemistry of Metal Phosphates and Phosphonates. In: Gupta, R.K. (eds) Metal Phosphates and Phosphonates. Engineering Materials. Springer, Cham. 2023. pp. 61-77.

### ВЗАЄМОДІЯ В СИСТЕМІ $\text{Tl}_2\text{Se}-\text{CdSe}-\text{GeSe}_2$

*Селезень А.О.<sup>1</sup>, Мороз М.В.<sup>1</sup>, Гулай Л.Д.<sup>2</sup>, Піскач Л.В.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Національний університет водного господарства та природокористування, Україна,  
[a.o.selezen@nuwm.edu.ua](mailto:a.o.selezen@nuwm.edu.ua)

<sup>2</sup>Волинський національний університет імені Лесі Українки, Україна.

У квазіпотрійних системах типу  $\text{Tl}_2X-B^{\text{II}}X-D^{\text{IV}}X_2$  (де  $B^{\text{II}}$ —Cd, Hg, Pb;  $D^{\text{IV}}$ —Si, Ge, Sn;  $X$ —S, Se, Te) можуть утворюватися тетрарні сполуки із співвідношенням елементів 2:1:1:4, 2:1:2:6, 2:1:3:8 та деякими іншими. З них деякі, уже зарекомендували себе як перспективні матеріали в окремих галузях напівпровідникового матеріалознавства.

Під час вивчення фазових рівноваг у системі  $\text{Tl}_2\text{Se}-\text{CdSe}-\text{GeSe}_2$  при температурі 570 К було підтверджено формування потрійних сполук  $\text{Tl}_4\text{GeSe}_4$ ,  $\text{Tl}_2\text{GeSe}_3$ ,  $\text{Tl}_2\text{Ge}_2\text{Se}_5$  та  $\text{Cd}_4\text{GeSe}_6$  і встановлено утворення двох тетрарних сполук. Перша  $\text{Tl}_2\text{CdGeSe}_4$  утворюється інконгруентно за реакцією  $L_p + \beta\text{-CdSe} \leftrightarrow \sigma\text{-Tl}_2\text{CdGeSe}_4$  при температурі 809 К на перерізі  $\text{Tl}_2\text{GeSe}_3\text{—CdSe}$  при еквімолярному співвідношенні вихідних компонентів. Ще одна тетрарна сполука, формула якої відповідає складу  $\text{Tl}_2\text{CdGe}_3\text{Se}_8$ , утворюється на перерізі  $\text{Tl}_2\text{CdGeSe}_4\text{—GeSe}_2$  при температурі 835 К за конгруентним способом плавлення. Побудовано ізотермічний переріз системи  $\text{Tl}_2\text{Se}-\text{CdSe}-\text{GeSe}_2$  при температурі відпаду, що становить 570 К. За даних умов у стані рівноваги знаходяться тридцять п'ять областей; з них дев'ять є однофазними, сімнадцять — двофазними та ще дев'ять — трифазними (рис. 1). Розчинність на основі сполук квазіпотрійної системи становить 3-5 мол.%. Ізотермічний переріз системи  $\text{Tl}_2\text{Se}-\text{CdSe}-\text{GeSe}_2$  характеризується наявністю дев'ятиоднофазних полів. Вони відповідають  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$ ,  $\epsilon$ ,  $\eta$ ,  $\zeta$ ,  $\sigma$ ,  $\theta$ -твердим розчинам на основі сполук  $\text{Tl}_2\text{Se}$ ,  $\text{CdSe}$ ,  $\text{GeSe}_2$ ,  $\text{Tl}_4\text{GeSe}_4$ ,  $\text{Tl}_2\text{GeSe}_3$ ,  $\text{Tl}_2\text{Ge}_2\text{Se}_5$ ,  $\text{Cd}_4\text{GeSe}_6$ ,  $\text{Tl}_2\text{CdGeSe}_4$  та  $\text{Tl}_2\text{CdGe}_3\text{Se}_8$ .

Визначено, що у внутрішньому просторі концентраційного трикутника даної системи формуються дев'ять перерізів:  $\text{Tl}_4\text{GeSe}_4\text{—CdSe}$ ,  $\text{Tl}_2\text{GeSe}_3\text{—CdSe}$ ,  $\text{Tl}_4\text{GeSe}_4\text{—Tl}_2\text{CdGeSe}_4$ ,  $\text{Tl}_2\text{GeSe}_3\text{—Tl}_2\text{CdGe}_3\text{Se}_8$ ,  $\text{Tl}_2\text{Ge}_2\text{Se}_5\text{—Tl}_2\text{CdGe}_3\text{Se}_8$ ,  $\text{Tl}_2\text{CdGe}_3\text{Se}_8\text{—CdSe}$ ,  $\text{Tl}_2\text{CdGe}_3\text{Se}_8\text{—GeSe}_2$ ,  $\text{Tl}_2\text{CdGe}_3\text{Se}_8\text{—Cd}_4\text{GeSe}_6$ ,  $\text{Tl}_2\text{CdGe}_3\text{Se}_8\text{—Tl}_2\text{CdGeSe}_4$ , з яких шість ( $\text{Tl}_4\text{GeSe}_4\text{—CdSe}$ ,  $\text{Tl}_2\text{GeSe}_3\text{—CdSe}$ ,  $\text{Tl}_2\text{GeSe}_3\text{—Tl}_2\text{CdGe}_3\text{Se}_8$ ,  $\text{Tl}_2\text{Ge}_2\text{Se}_5\text{—Tl}_2\text{CdGe}_3\text{Se}_8$ ,  $\text{Tl}_2\text{CdGe}_3\text{Se}_8\text{—CdSe}$ ,  $\text{Tl}_2\text{CdGe}_3\text{Se}_8\text{—GeSe}_2$ )



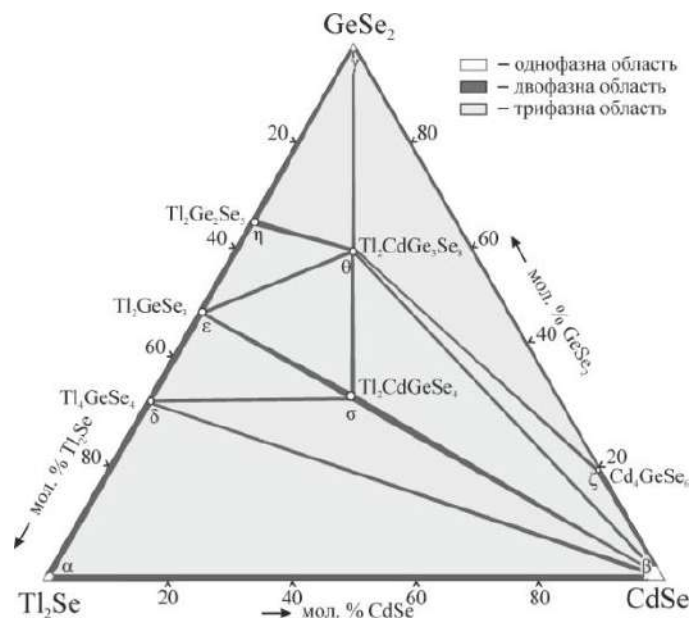


Рис. 1. Ізотермічний переріз квазіпотрійної системи  $\text{Tl}_2\text{Se}-\text{CdSe}-\text{GeSe}_2$  при 570 К.

належить до квазібінарних перерізів, а інші три – до неквазібінарних. Для окремих перерізів було побудовано фазові діаграми стану. Зокрема переріз  $\text{Tl}_4\text{GeSe}_4-\text{CdSe}$  належить до евтектичного типу.

Кристалічну структуру сполуки  $\text{Tl}_2\text{CdGeSe}_4$  розшифровано в рамках ізотропного наближення в межах моделі для сполуки  $\text{Tl}_2\text{HgGeTe}_4$  [1], у структурі якої цей селенід кристалізується та належить до тетрагональної сингонії; просторова група  $I-42m$ ; символ Пірсона  $tI16$ ; параметри комірки:  $a=0,80145(9)$ ,  $c=0,67234(9)$  нм [2].

Інша тетрарна сполука  $\text{Tl}_2\text{CdGe}_3\text{Se}_8$ , що формується в цій системі, кристалізується у ромбічній сингонії (просторова група  $P2_12_12_1$ , символ Пірсона  $oP56$ ), структурному типі сполуки  $\text{Cs}_2\text{CdGe}_3\text{Se}_8$  [3] з параметрами комірки:  $a=0,76033(9)$ ,  $b=1,2072(2)$ ,  $c=1,7475(2)$  нм [4].

В аналогічних халькогенідних системах виявлено ізоstrukturні сполуки:  $\text{Tl}_2\text{CdSiSe}_4$ ,  $\text{Tl}_2\text{CdSnSe}_4$ ,  $\text{Tl}_2\text{CdSiTe}_4$ ,  $\text{Tl}_2\text{HgSiTe}_4$  тетрагональної структури (просторова група  $I-42m$ ) і  $\text{Tl}_2\text{CdSi}_3\text{Se}_8$  та  $\text{Tl}_2\text{CdGe}_3\text{S}_8$  ромбічної сингонії (просторова група  $P2_12_12_1$ ).

1. McGuire M.A., Scheidemantel T.J., Badding J.V., DiSalvo F.J.  $\text{Tl}_2\text{AXTe}_4$  ( $A = \text{Cd}, \text{Hg}, \text{Mn}$ ;  $X = \text{Ge}, \text{Sn}$ ): Crystal Structure and Thermoelectric Properties. *Chem. Mater.* 2005, 17, 6186–6191.

2. Selezen A.O., Oleksyuk I.D., Myronchuk G.L., Smityukh O.V., Piskach L.V. Synthesis and structure of the new semiconductor compounds  $\text{Tl}_2\text{B}^{\text{II}}\text{D}^{\text{IV}}\text{X}_4$  ( $\text{B}^{\text{II}}-\text{Cd}, \text{Hg}$ ;  $\text{D}^{\text{IV}}-\text{Si}, \text{Ge}$ ;  $X-\text{Se}, \text{Te}$ ) and isothermal sections of the  $\text{Tl}_2\text{Se}-\text{CdSe}-\text{Ge}(\text{Sn})\text{Se}_2$  systems at 570 K. 2020. *Journal of Solid State Chemistry*. V. 289. P. 121422

3. Morris C.D., Li H., Jin H., Malliakas C.D., Peters J.A., Trikalitis P.N., Kanatzidis M. G.  $\text{Cs}_2\text{M}^{\text{II}}\text{M}^{\text{IV}}_3\text{Q}_8$  ( $Q = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ ): An Extensive Family of Layered Semiconductors with Diverse Band Gaps. *Chem. Mater.* 2013, 25, 3344–3356.

4. Олексюк І., Селезень А., Смітюх О., Гулай Л., Піскач Л. Тетрарні халькогеніди систем  $\text{Tl}_2\text{X}-\text{B}^{\text{II}}\text{X}-\text{D}^{\text{IV}}\text{X}_2$  ( $\text{B}^{\text{II}}-\text{Cd}, \text{Hg}$ ;  $\text{D}^{\text{IV}}-\text{Si}, \text{Ge}$ ;  $X-\text{Se}, \text{Te}$ ). 2021. *Проблеми хімії та сталого розвитку*, (2), 26–37.

## ФОТОЕЛЕКТРОХІМІЧНИЙ АНАЛІЗ КОНЦЕНТРАЦІЇ ІОНІВ СВИНЦЮ

*Смілик В.О., Фоманюк С.С., Колбасов Г.Я., Русецький І.А., Данілов М.О.*

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

[VitaliySmilyk@i.ua](mailto:VitaliySmilyk@i.ua)

Однією з основних проблем використання матеріалів та реактивів на основі свинцю є його токсичність [1]. Тому важливим завданням є розробка простих та недорогих методів селективного аналізу розчиненого свинцю.

Для вирішення цього завдання нами запропоновано використовувати кислі нітратні розчини з електролітів, з різним вмістом свинцю. Нами було помічено, що вміст свинцю у розчині еквівалентний величині фотовідгуку сформованої на підкладці  $\text{SnO}_2$  світлочутливої плівки  $\text{PbI}_2$ . Для формування даних плівок використовували комбінований метод електрохімічного та хімічного осадження. Спочатку отримували плівки  $\text{PbO}_2$  методом електроосадження (при анодному струмі  $85 \text{ mA/cm}^2$ ) з електроліту на основі  $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$  та  $\text{HNO}_3$  ( $\text{pH} = 1$ ). Потім  $\text{PbO}_2$  хімічно перетворювали на  $\text{PbI}_2$  шляхом взаємодії з  $\text{HI}$  (1 М) протягом 5 хв. З допомогою EDAX аналізу було встановлено що ця процедура сприяє повному перетворенню  $\text{PbO}_2$  в плівку  $\text{PbI}_2$  [2].

Для встановлення чутливості фотоелектрохімічного визначення концентрації свинцю були проведені дослідження впливу струму та часу електроосадження оксидних сполук свинцю на скляній підкладці з провідним шаром  $\text{SnO}_2$ . Основною метою цих досліджень було визначення залежності між фоточутливістю плівок  $\text{PbI}_2$  та струмом і часом електроосадження  $\text{PbO}_2$  у розчинах з різною кількістю іонів свинцю. На основі аналізу спектрів квантового виходу фотоструму  $\text{PbI}_2$  та значень товщин плівок, вирахованих з інтерферометричних досліджень [2], була встановлена залежність квантового виходу фотоструму продуктів концентрування свинцю у вигляді тонких плівок  $\text{PbI}_2$  від товщини електроосадженого  $\text{PbO}_2$ , яка в свою чергу безпосередньо залежить від концентрації іонів  $\text{Pb}^{2+}$  у досліджуваному розчині.

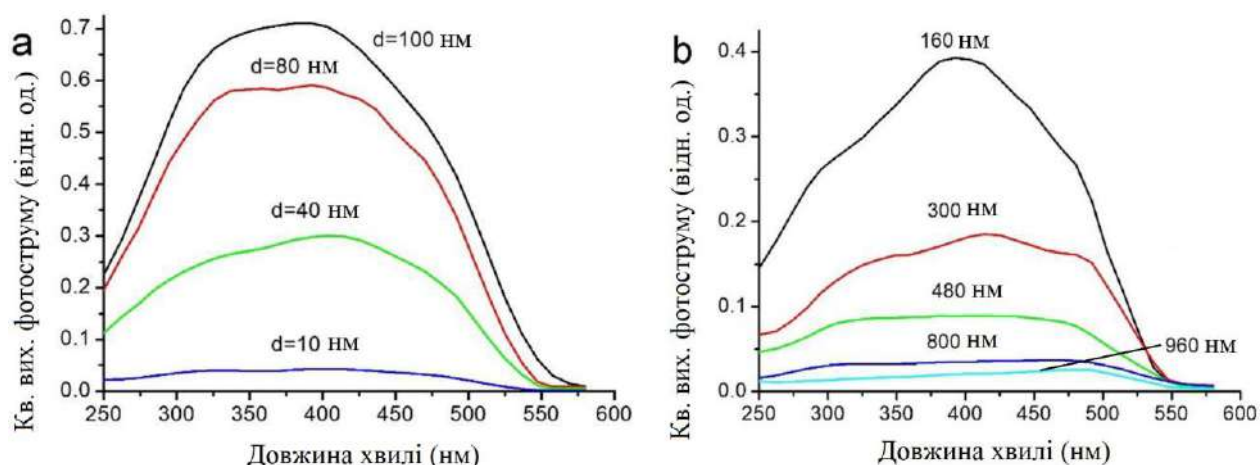


**Рис. 1.** (а) Спектри квантового виходу фотоструму при товщині плівки  $\text{PbI}_2$  від 10 до 100 нм і (б) від 160 нм до 960 нм (виміряно в 0,1 М  $\text{KI}$ ).

- Визначено, що чутливість методу склала 0,05 мг/л, що менше необхідної для визначення ГДК свинцю (0,01 мг/л), але відповідає вимогам для аналізу в технологічних рідинах на основі азотної кислоти. Але використання більш інтенсивного освітлення від 35-ватної ксенонової лампи у порівнянні з 5-ватною світлодіодною лампою дозволяє збільшити чутливість методу в середньому в 1,5 рази за рахунок збільшення величини фотоструму. Порівняння фотоелектрохімічного визначення вмісту свинцю з іншими методами показало

перевагу розробленого нами методу за значенням фотовідгуку плівок  $\text{PbI}_2$  у можливості безпосереднього аналізу вмісту свинцю в сильноокислих середовищах з 3-х разовим надлишком іонів міді та нікелю [2]. Ці особливості методу можна використовувати для контролю вмісту свинцю в кислих відходах хімічної промисловості.

1. Wani A.L., Ara A., Usmani J.A. Lead toxicity: a review, *Interdiscip // Toxicol.* – 2015. – 8. – P. 55–64.

2. Fomanyuk S.S., Vorobets V.S., Rusetskyi I.A., Kolbasov G. Ya., Smilyk V.O., Danilov M.O. Photoelectrochemical determination of  $\text{Pb}^{2+}$  by combined electrochemical-chemical precipitations of  $\text{PbI}_2$  films // *Journal of Electroanalytical Chemistry.* – 2022. – 920. – P. 116600.

## **ПІДВИЩЕННЯ ПРОТИКОРОЗІЙНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ АЛЮМІНІЄВОГО СПЛАВУ В ХЛОРИДОВМІСНОМУ СЕРЕДОВИЩІ ІНГІБУВАЛЬНОЮ КОМПОЗИЦІЄЮ НАТРІЮ АЛЬГІНАТУ ТА ЦИНКУ АЦЕТАТУ**

*Сободош Н.Й., Хлопик О.П., Корній С.А.*

Фізико-механічний інститут ім. Г. В. Карпенка НАН України, [natkasobodosh@gmail.com](mailto:natkasobodosh@gmail.com)

Алюмінієві сплави є одними з основних конструкційних матеріалів сучасної промисловості завдяки їхньому унікальному поєднанню фізико-механічних властивостей. Вони володіють високою міцністю та низькою питомою густиною, що робить їх незамінними в таких галузях, як авіаційна, космічна, суднобудівна та автомобільна промисловість. Легка вага алюмінієвих сплавів сприяє зниженню витрат пального та підвищенню енергоефективності транспортних засобів, що особливо актуально в умовах глобального переходу до екологічно чистих технологій. Для підвищення міцності алюмінієві сплави леговані різними елементами, які знижують їх корозивну тривкість. Це зумовлює потребу розробки нових ефективних методів захисту, серед яких особливу увагу привертає використання екологічно безпечних інгібіторів корозії. Для створення таких інгібіторів можна використовувати речовини, отримані з відновлювальної рослинної сировини, зокрема полісахариди [1-2]. Тому метою даної роботи було дослідити протикорозійні властивості алюмінієвого сплаву з використанням інгібувальної композиції полісахариду натрію альгінату з додаванням цинку ацетату за різного співвідношення компонентів.

Для досліджень використовували зразки алюмінієвого сплаву Д16Т з таким хімічним складом (wt %): 90,8...94,7 Al, 3,8...4,9 Cu, 1,2... 1,8 Mg, 0,3...0,9 Mn, 0,5 Si, до 0,5 Fe, до 0,3 Zn. Корозивним середовищем слугував 0,1%-ий розчин натрію хлориду, в який додавали як інгібітори корозії природний полісахарид – натрію альгінат ( $\text{C}_6\text{H}_7\text{O}_6\text{Na}$ )<sub>n</sub> та цинку ацетат ( $(\text{CH}_3\text{COO})_2\text{Zn}$ ). Для інгібування середовища використовували ці сполуки як окремо, так і їх композиції. Співвідношення компонентів натрію альгінату та цинку ацетату у композиції становило: 1 до 1, 1 до 3 та 3 до 1, зі сталою сумарною концентрацією 1g/l.

Імпедансні залежності (рис. 1 а) демонструють високі протикорозійні характеристики композиції на основі натрію альгінату та цинку ацетату за співвідношення компонентів 1 до 1 порівняно з неінгібованим середовищем. Так, модуль імпедансу зразків алюмінієвого сплаву за частоти змінного струму 0,1Hz в інгібованому даною композицією розчині після 3 h витримки становить  $6,3 \cdot 10^5 \Omega \cdot \text{cm}^2$ . Менш виражений інгібувальний ефект спостерігали за окремого використання цинку ацетату, а також композицій за співвідношення компонентів 1 до 3 та 3 до 1. Тут параметр  $Z_{0,1}$  металу розчинах становив  $3,13 \cdot 10^4 \Omega \cdot \text{cm}^2$ ,  $5,45 \cdot 10^4 \Omega \cdot \text{cm}^2$ , та  $1,6110^4 \Omega \cdot \text{cm}^2$  відповідно після 3 h експозицій. Використання натрію альгінату як самостійного інгібітора корозії не забезпечило достатнього захисту металу. Його модуль імпедансу знаходився практично на одному рівні із контрольним зразком, що вказує на відсутність помітного інгібуючого ефекту. На частотній залежності фазового кута алюмінієвого сплаву за використання композиції натрію альгінату та цинку ацетату за співвідношення компонентів 1 до 1 спостерігали розширений пік максимуму фазового кута

(рис. 1 б). Величина цього максимуму для 3 h експозиції досягала  $84^\circ$  та зміщувалась в область середніх частот змінного струму. Цей результат свідчить про високі захисні властивості сформованої на поверхні плівки.

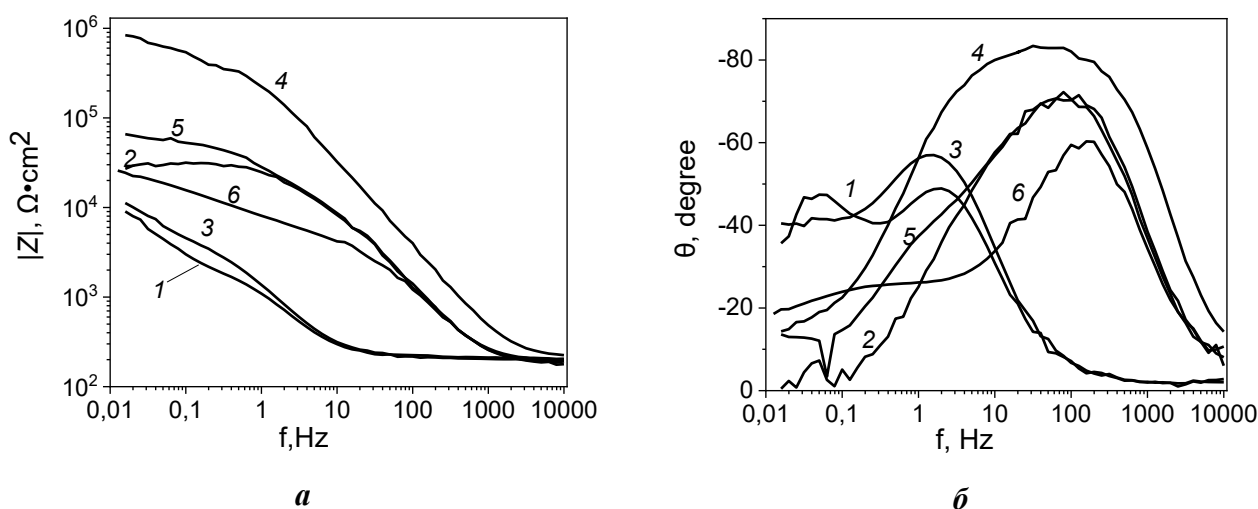


**Рис. 1.** Частотні залежності модуля імпедансу та фазового кута для сплаву Д16Т після 3 h експозиції у 0,1% розчині NaCl (1) та з додаванням інгібітора 1 g/l: 2 – цинку ацетату, 3 – натрію альгінату, 4 – натрію альгінату та цинку ацетату за співвідношення 1:1, 5 – натрію альгінату та цинку ацетату за співвідношення 1:3, 6 – натрію альгінату та цинку ацетату співвідношення 3:1.

Таким чином, природний полісахарид – натрію альгінат має недостатні захисні властивості щодо алюмінієвого сплаву Д16Т у 0,1% розчині NaCl. Корозійна стійкість сплаву значно підвищилася завдяки використанню екологічно безпечної інгібувальної композиції на основі натрію альгінату та цинку ацетату, отриманої при рівному співвідношенні компонентів. Інгібувальна дія цієї композиції пояснюється тим, що молекули альгінату, завдяки своїм гідроксильним і карбоксильним функціональним групам, здатні адсорбуватися на поверхні алюмінієвого сплаву, що підтверджується електрохімічними імпедансними дослідженнями. Захисний ефект підсилюється формуванням на поверхні катодних включень нерозчинних гідроксидів або оксидів цинку.

1. Danyliak M.-O., Korniy S.A. Corrosion Inhibition of Aluminum Alloy by Eco-Friendly Composition Based on Gum Arabic and Zinc Acetate. – *Materials Science*. – 2023. – V. 59. – P. 83–90.

2. Korniy S.A., Zin I.M., Khlopyk O.P., N. Yo. Sobodosh. Corrosion inhibition of D16T aluminum alloy by sodium alginate and zinc acetate composition in neutral chloride-containing environment. – *Materials Science*. – 2025. – Published online.

# ВПЛИВ НИЗЬКОМОЛЕКУЛЯРНИХ СПИРТІВ НА ПРОЦЕС МІЦЕЛОУТВОРЕННЯ В РОЗЧИНАХ АЛКІЛСУЛЬФАТІВ НАТРІЮ ТА ЇХ АДСОРБЦІЮ

Стрельцова О.О., Волювач О.В.

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, [elen\\_streltsova@onu.edu.ua](mailto:elen_streltsova@onu.edu.ua)

Для посилення ефективної дії поверхнево-активних речовин (ПАР) часто застосовують в якості допоміжних речовин модифікатори (со-ПАР). Дискусійним залишається питання щодо впливу на критичну концентрацію міцелоутворення (ККМ) ПАР добавок низькомолекулярних водорозчинних спиртів [1-4]. З одного боку, вони можуть послаблювати гідрофобні взаємодії в розчинах ПАР, що супроводжується підвищенням розчинності (ростом ККМ) ПАР – і в такому випадку спирти виступають як со-розчинники, а з іншого боку, замала дифільність молекул спиртів та строго визначена їх концентрація у розчинах ПАР можуть бути причиною зниження ККМ міцелоутворюючих речовин.

В даній роботі методами кондуктометрії та тензіометрії досліджено вплив низькомолекулярних спиртів (пропанол-1, пропанол-2, бутанол-1) на процес міцелоутворення в водних розчинах алкілсульфатів натрію (АСН: децил- та додецилсульфат натрію) та адсорбцію АСН на межі розділу фаз змішаний розчин (ПАР-спирт) – вода з метою поповнити дані про модифікацію міцелярних властивостей аніонних ПАР та виявити закономірності зміни характеристик міцелоутворення та адсорбції АСН в залежності від положення функціональної групи і довжини вуглеводневого радикалу в молекулі спирту.

Експериментально встановлено, що введення 0,5-1,0 моль/дм<sup>3</sup> спиртів у розчини поверхнево-активних речовин сприяє процесу міцелоутворення децил- (ДСН) та додецилсульфату натрію (ДДСН) та підвищенню стійкості міцелярної фази, про ще свідчить спостерігаємий синергетичний ефект по ККМ. При постійній концентрації алкілсульфату натрію (АСН) та зростаючій концентрації спирту питома електропровідність при різних концентраціях ПАР (до ККМ і вище за ККМ) зменшується. Енергія Гіббса міцелоутворення ( $\Delta G_{mic}^0$ ) АСН зі збільшенням довжини вуглеводневого радикалу від C<sub>10</sub> до C<sub>12</sub> зростає за абсолютною величиною від -27,4 до -35,4 кДж/моль [5]. Порівняння величин стандартної вільної енергії адсорбції  $\Delta G_{ads}^0$  і міцелоутворення  $\Delta G_{mic}^0$  в системах АСН – спирт – вода показало, що адсорбція є термодинамічно вигідним процесом в досліджуваних системах. Поверхневий натяг розчинів ДСН і ДДСН за дії спиртів знижується відповідно на 28 і 35 мДж/м<sup>2</sup>; на межі поділу фаз розчин – повітря утворюються змішані адсорбційні шари.

1. MacDonald St., MacLennan Sh., Gerrard Marangoni D. Calorimetric determination of the thermodynamics of alcohol-surfactant mixed micelle formation: Temperature and concentration effects // *J. Mol. Liq.* – 2020. – Vol. 302. 112531.

2. Zdziennicka A., Janczuk B. Modification of adsorption, aggregation and wetting properties of surfactants by short chain alcohols // *Advances Colloid Interface Sci.* – 2020. – Vol. 284. 102249.

3. Jing Huang, Zhao Hua Ren. Mechanism on micellization of amino sulfonate amphoteric surfactant in aqueous solution containing different alcohols and its interfacial adsorption // *J. Mol. Liq.* – 2020. – Vol. 316. 113793.

4. Shahin Khosharay, Mehrnoosh Talebi, Tala Akbari Saeed, Sepideh Salehi Talaghani. Experimental and modeling study of the surface tension and interface of aqueous solutions of alcohols, cetyltrimethylammonium bromide (CTAB) and their mixtures // *J. Mol. Liq.* – 2018. – Vol. 249. – P. 245-253.

5. Стрельцова О.О., О. В. Волювач О.В., Тимчук А.Ф. Поверхневі властивості та міцелоутворення алкілсульфатів натрію в присутності низькомолекулярних спиртів // *Вісник ОНУ. Хімія.* - 2024. - Т. 29, вип. 1(87). - С.78-90.



# СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМІНЕСЦЕНТНІ ВЛАСТИВОСТІ ФТАЛОЦІАНІНОВИХ КОМПЛЕКСІВ ЦИРКОНІЮ З ПОЗАПЛОЩИННИМИ КАРБОКСИЛОВМІСНИМИ ЛІГАНДАМИ

*Федосова Н.М.<sup>1</sup>, Третьякова І.М.<sup>1</sup>, Черній В.Я.<sup>1</sup>, Ротару А.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського НАН України,

<sup>2</sup>”Petrui Poni” Інститут макромолекулярної хімії, Ясси, Румунія

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

Властивості фталоціанінів значною мірою залежать від природи замісників на периферії макроциклу (електронодонорних або електроноакцепторних), типу йону металу в центрі макроциклу, а також від характеристик позаплощинних лігандів у разі центральних атомів із високим координаційним числом. Незаміщені фталоціаніни та їх комплекси характеризуються низькою розчинністю у більшості органічних розчинників і воді.

Покращення розчинності у полярних і неполярних органічних розчинниках досягається введенням у периферійну область фталоціанінового кільця або до складу позаплощинних лігандів різних замісників, зокрема алкільних, алкоксильних, феноксильних, краун-ефірних груп тощо. Водночас додавання четвертинних амонієвих, сульфо- чи карбоксильних груп сприяє підвищенню розчинності у водних середовищах у широкому діапазоні рН.

Метою даної роботи було дослідження спектрально-люмінесцентних властивостей отриманих раніше фталоціанінових комплексів цирконію з карбоксилівмісними позаплощинними лігандами на основі халконів  $\text{PcZr}(\text{L})_2$  (рис. 1).

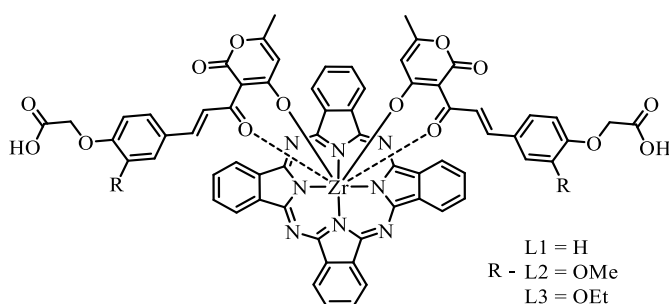


**Рис. 1.** Структурна формула  $\text{PcZr}(\text{L})_2$ .

Спектрально-люмінесцентні властивості  $\text{PcZr}(\text{L})_2$  досліджено в розчинниках різної природи (табл.). В ЕСП  $\text{PcZr}(\text{L})_2$  спостерігаються характерні для фталоціанінового макрокілля смуги В (330 – 350 нм) і Q (690-695 нм) та смуга позаплощинного ліганду (390-415 нм) в ДМСО та метанолі. Спектри випромінювання флуоресценції  $\text{PcZr}(\text{L})_2$  мають вигляд характерний для металофталоціанінових комплексів у розчинах ДМСО. Стоксівські зсуви спостерігалися в діапазоні 10-15 нм (табл.). У водних розчинах вигляд спектрів змінюється і набуває форми характерної для агрегованих фталоціанінів (рис. 2).

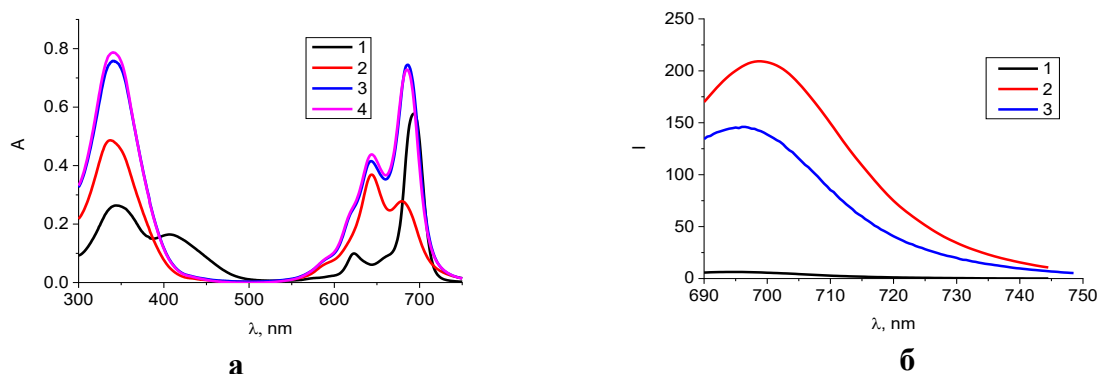


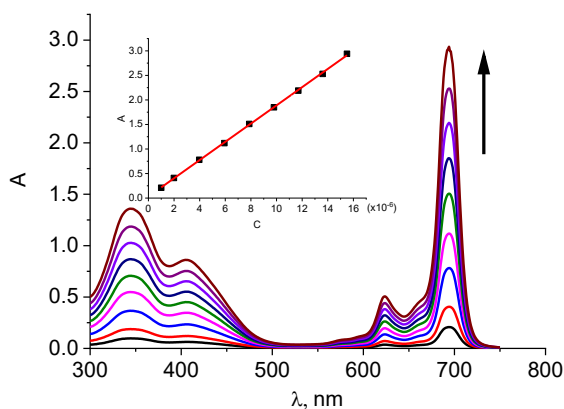
**Рис. 2.** Спектри поглинання (а)  $\text{PcZr}(\text{L}2)_2$  (1- в ДМСО, 2- в воді, 3 - з  $\beta\text{CD}$ , 4 – з  $\text{PrCD}$ ) та флуоресценції (б)  $\text{PcZr}(\text{L}2)_2$  (1- в воді, 2 - з  $\beta\text{CD}$ , 3 – з  $\text{PrCD}$ ).



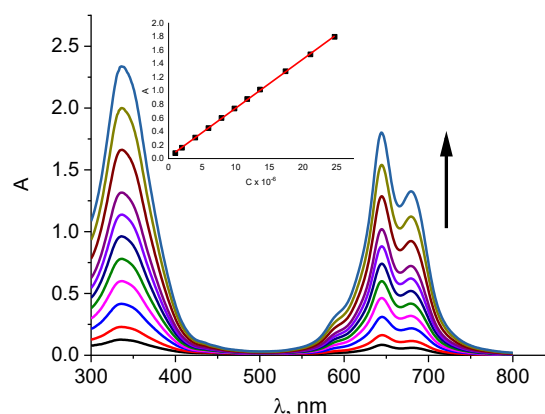
Таблиця

Дані спектрів поглинання та випромінювання флуоресценції  $\text{PcZr}(\text{L})_2$  в ДМСО, метанолі та воді з 0,01М  $\text{NaHCO}_3$

| Сполука                                     | Розчинник | В-смуґа $\lambda_{\text{max}}$ (нм) | Смуґа ліґанду $\lambda_{\text{max}}$ (нм) | Q-смуґа $\lambda_{\text{max}}$ (нм) | Збудження $\lambda_{\text{ex}}$ (нм) | Випромінювання $\lambda_{\text{em}}$ (нм) | Стоксів зсув $\Delta$ (нм) |
|---------------------------------------------|-----------|-------------------------------------|-------------------------------------------|-------------------------------------|--------------------------------------|-------------------------------------------|----------------------------|
| $\text{PcZr}(\text{L1})_2$                  | ДМСО      | 352                                 | 393                                       | 694                                 | 680                                  | 690                                       | 10                         |
| $\text{PcZr}(\text{L1})_2$                  | МеОН      | 345                                 | 399                                       | 687                                 |                                      |                                           |                            |
| $\text{PcZr}(\text{L1})_2$                  | вода      | 335                                 |                                           | 643; 679                            | 680                                  | 694                                       | 14                         |
| $\text{PcZr}(\text{L1})_2 + \text{PrCD}$    | вода      | 336                                 |                                           | 644; 684                            | 680                                  | 697                                       | 17                         |
| $\text{PcZr}(\text{L1})_2 + \beta\text{CD}$ | вода      | 336                                 |                                           | 643; 684                            | 680                                  | 699                                       | 19                         |
| $\text{PcZr}(\text{L2})_2$                  | ДМСО      | 344                                 | 407                                       | 693                                 | 680                                  | 690                                       | 10                         |
| $\text{PcZr}(\text{L2})_2$                  | МеОН      | 343                                 | 400                                       | 687                                 |                                      |                                           |                            |
| $\text{PcZr}(\text{L2})_2$                  | вода      | 336                                 |                                           | 644; 680                            | 680                                  | 695                                       | 15                         |
| $\text{PcZr}(\text{L2})_2 + \text{PrCD}$    | вода      | 340                                 |                                           | 644; 685                            | 680                                  | 697                                       | 17                         |
| $\text{PcZr}(\text{L2})_2 + \beta\text{CD}$ | вода      | 340                                 |                                           | 643; 686                            | 680                                  | 699                                       | 19                         |
| $\text{PcZr}(\text{L3})_2$                  | ДМСО      | 336                                 | 408                                       | 693                                 | 685                                  | 699                                       | 14                         |
| $\text{PcZr}(\text{L3})_2$                  | МеОН      | 336                                 | 413                                       | 686                                 |                                      |                                           |                            |
| $\text{PcZr}(\text{L3})_2$                  | вода      | 335                                 |                                           | 644; 682                            | 680                                  | 693                                       | 13                         |
| $\text{PcZr}(\text{L3})_2 + \text{PrCD}$    | вода      | 338                                 |                                           | 644; 686                            | 680                                  | 695                                       | 15                         |
| $\text{PcZr}(\text{L3})_2 + \beta\text{CD}$ | вода      | 337                                 |                                           | 643; 685                            | 680                                  | 697                                       | 17                         |



а



б

**Рис. 3.** ЕСП  $\text{PcZr}(\text{L2})_2$  в ДМСО (а) та 0.01М водному розчині  $\text{NaHCO}_3$  (б). На вставках наведено графіки, що підтверджують виконання закону Ламберта-Бера для даних систем в діапазоні концентрацій від  $2 \times 10^{-6}$  до  $1,2 \times 10^{-5}$  М.

Тенденція до агрегації фталоціанінових комплексів у водному середовищі суттєво знижує їх фотосенсибілізуючу здатність шляхом самогасіння. Для того, щоб зменшити агрегацію, у воду додавали циклодекстрини:  $\alpha$ -CD,  $\beta$ -CD,  $\gamma$ -CD або гідроксипропіл-CD (Pr-CD). Встановлено, що більш ефективно ступінь агрегації знижується в присутності  $\beta$ -CD і Pr-CD (рис. 2, таблиця). Закон Ламберта-Бера виконується для всіх фталоціанінових комплексів у ДМСО. При цьому в 0.01М водному розчині  $\text{NaHCO}_3$  у діапазоні концентрацій від  $2 \times 10^{-6}$  до  $1,2 \times 10^{-5}$  М спостерігається утворення агрегатів, склад яких не змінюється в залежності від їх концентрації в розчині (рис. 3).

Таким чином, у роботі досліджено вплив розчинників та концентрації  $\text{PcZr}(\text{L})_2$  на агрегаційну поведінку. Встановлено, що  $\text{PcZr}(\text{L})_2$  утворюють мономерні розчини в ДМСО та метанолі, в той же час вони демонструють агрегацію в водних розчинах. Введення в водні розчини циклодекстринів знижує ступінь агрегації комплексів і підвищує відносну інтенсивність флуоресценції.

## ЕЛЕКТРОННІ СПЕКТРИ ПОГЛИНАННЯ ДЕФЕКТНИХ ЦЕНТРІВ В НАНОЧАСТИНКАХ $\text{SnO}_2$

*Філоненко О.В., Дем'яненко Є.М., Гребенюк А.Г., Лобанов В.В.*

Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка Національної академії наук України,  
[oksana.filonenko@isc.gov.ua](mailto:oksana.filonenko@isc.gov.ua)

Напівпровідникові оксиди металів, такі як  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{SnO}_2$ ,  $\text{ZnO}$ ,  $\text{CuO}$  та  $\text{NiO}$  широко застосовують як чутливі матеріали сенсорів для виявлення цілого ряду «невидимих газів» ( $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ , метанол та толуол), що зумовлено низькою вартістю їх синтезу, високою стабільністю, вибірковою чутливістю, швидкістю реакції та швидкістю відновлення. Більшість сенсорів, виготовлених на основі оксидів металів, діють як резистивні датчики, газочутливий механізм яких заснований на залежності електричного опору оксиду металу від складу навколишньої атмосфери. При застосуванні наноструктурних форм оксидів металів чутливість датчиків на їх основі зростає і сильно залежить від розміру, форми та морфології частинок [1].

Важливою практичною задачею, особливо в газовій, нафтовій та харчовій промисловості, в сільському господарстві та медичній діагностиці, є детектування сірководню, оскільки він є високотоксичним газом, спричиняє значний негативний вплив на здоров'я та навколишнє середовище.

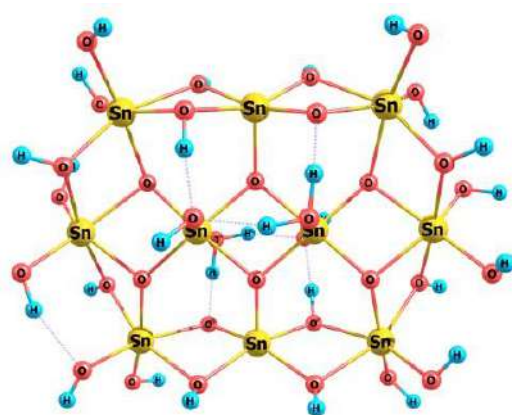
Високу чутливість до сірководню демонструють наноматеріали на основі діоксиду стануму. Із аналізу численних досліджень сенсорних характеристик діоксиду стануму можна зробити висновки, що його адсорбційно-каталітичні властивості та електропровідність змінюються у широких межах. Не існує чітко встановлених кореляцій між структурними характеристиками, електрофізичними властивостями оксидів та їх чутливістю до адсорбції різних газів, зокрема  $\text{H}_2\text{S}$ . Тому на сьогодні є актуальними дослідження, що виявляють, яким чином наявні структурно-фазові відмінності впливають на сенсорні характеристики.

Метою роботи є пошук закономірностей зміни електронної будови наночастинок діоксиду стануму при наявності різного роду дефектів на їх поверхні та дослідженні особливостей взаємодії із молекулою сірководню в рамках квантовохімічного моделювання.

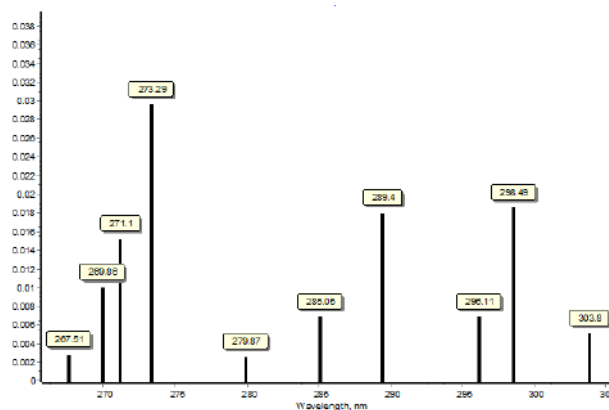
Для моделювання наночастинок діоксиду стануму обрано кластер  $\text{Sn}_{10}\text{O}_{34}\text{H}_{28}$ , що містить 10 формульних одиниць  $\text{SnO}_2$  (рис. 1). У роботі [2] показано, що дана кластерна модель цілком придатна для квантовохімічного дослідження властивостей наночастинок  $\text{SnO}_2$  і дозволяє отримати дані, що добре узгоджуються із експериментальними. Розглянуто випадки із структурними дефектами на поверхні наночастинок  $\text{SnO}_2$ . А саме, кисневі вакансії, які як відомо з експерименту, присутні на поверхні різних форм  $\text{SnO}_2$ . Крайнім випадком втрати Оксигену є утворення станум монооксиду, який моделювався кластером брутто-складу  $\text{Sn}_{10}\text{O}_{14}\text{H}_8$ .

Розрахунки проведено методом функціонала густини (DFT) з обміно-кореляційним функціоналом B3LYP в рамках пакету програми US GAMESS [3]. Вибір базисного набору обумовлений намаганням відтворення характеристик можливих водневих зв'язків та адекватного опису систем з важкими атомами (Sn), тому було обрано валентний базисний набір SBKJC доповнений поляризаційними  $d$  і  $p$  функціями з ефективним остовним потенціалом, (SBKJC(d,p)). Електронні спектри даних структур розраховані методом TD DFT.

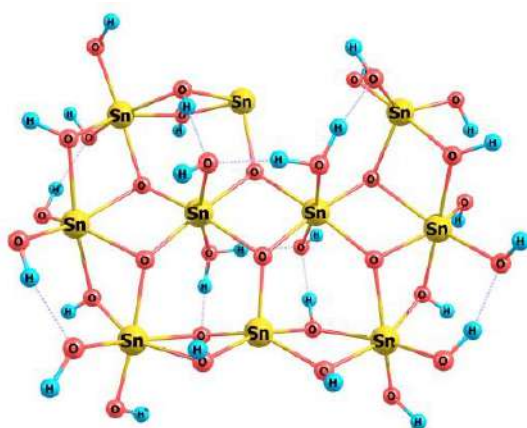
Аналіз результатів розрахунку електронних спектрів розглянутих структур свідчить, що втрата кисню веде до зміщення спектрів поглинання в бік довших хвиль. Це відбувається внаслідок зростання металічного характеру міжатомних зв'язків і як наслідок звуження забороненої зони з 4.58 для кластера  $\text{Sn}_{10}\text{O}_{34}\text{H}_{28}$  до 3.87 eV для  $\text{Sn}_{10}\text{O}_{14}\text{H}_8$  кластера.



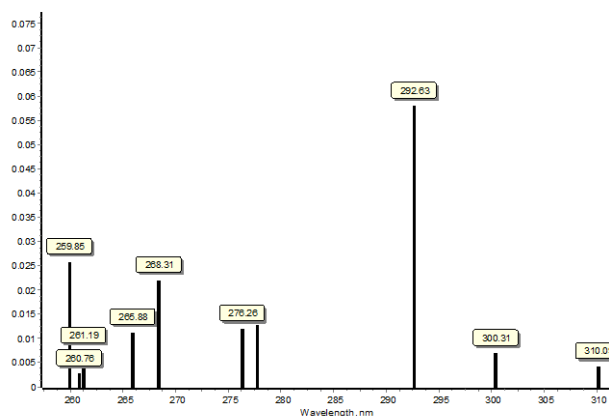
*a*



*б*



*в*



*г*

**Рис.** Рівноважна просторова будова кластерів  $\text{Sn}_{10}\text{O}_{34}\text{H}_{28}$  (а),  $\text{Sn}_{10}\text{O}_{33}\text{H}_{28}$  (в) та відповідні їм розраховані електронні спектри поглинання (б, г).

При дослідженні особливостей взаємодії сірководню із кластерами станум оксидів різної будови та складу показано, що їхня деоксигенація призводить до зменшення енергій адсорбції від -150 кДж/моль для кластера що моделює  $\text{SnO}_2$  до -5 кДж/моль для кластера, який відтворює  $\text{SnO}$ . Всі розглянуті процеси є самочинними.

Результати квантовохімічних розрахунків просторової та електронної будови а також електронних спектрів поглинання кластерних моделей наночастинок оксидів Sn (II) та Sn (IV) свідчать про звуження забороненої зони при втраті атомів кисню, що узгоджується з експериментальними даними.

1. Ji H., Zeng W., Li Y. Gas Sensing Mechanisms of Metal Oxide Semiconductors: A Focus Review. – *Nanoscale*. – 2019. – V.11. – P. 22664–22684.
2. Filonenko O.V., Grebenyuk A.G., Terebinska M.I., Lobanov V.V. Quantum chemical simulation of acid-base properties of the surface of  $\text{SnO}_2$  nanoparticles. - *Chemistry, Physics and Technology of Surface*. – 2023. – V. 14, N 4. – P. 495–503.
3. Barca G.M.J., Bertoni C., Carrington L., et al. Recent developments in the general atomic and molecular electronic structure system. - *J.Chem. Phys.* - 2020. – V. 152, N 15. – P. 154102.

## ДОСЛІДЖЕННЯ АДСОРБЦІЇ ОЛЕЇНОВОЇ КИСЛОТИ НА ІОНООБМІННИХ СМОЛАХ

*Черніченко О.В., Мельник Ю.Р.*

Національний університет «Львівська політехніка», [yurii.r.melnyk@lpnu.ua](mailto:yurii.r.melnyk@lpnu.ua)

Трансестерифікацію тригліцеридів рослинних олій аліфатичними спиртами переважно здійснюють у присутності гомогенних основних каталізаторів [1]. Такі каталізatori забезпечують високу швидкість реакції та практично повне перетворення тригліцеридів [2]. Проте, їх застосування висуває досить жорсткі вимоги до сировини щодо вмісту води (не більше 0,5 мас. %) та вільних жирних кислот (до 1,0 мас. %) [1, 2]. Трансестерифікацію тригліцеридів із високим вмістом вільних жирних кислот можна здійснювати або двостадійним методом, коли на першій стадії ведуть естерифікацію кислот у присутності кислотного каталізатора, або після попереднього вилучення вільних жирних кислот [3]. Одним із можливих способів вилучення вільних жирних кислот є їх адсорбція з нерафінованої чи відпрацьованої олії. Як адсорбенти доцільно використовувати іонообмінні смоли, цеоліти тощо [4, 5]. Важливою вимогою до таких адсорбентів є забезпечення високого ступеня вилучення вільних жирних кислот із олії, який би дав змогу використати її у реакції трансестерифікації у присутності гомогенних основних каталізаторів.

Метою досліджень було вивчення адсорбції олеїнової кислоти із її модельного розчину в рафінованій соняшниковій олії на іонообмінних смолах КУ-2-8 і АВ-17-8.

Досліджено адсорбцію олеїнової кислоти з її розчину в соняшниковій олії (кислотне число розчину становило 8,5 мг КОН/г, що відповідає вмісту олеїнової кислоти 4,3 мас. %) на катіонообмінній смолі КУ-2-8 та аніонообмінній смолі АВ-17-8. Адсорбцію вивчали в інтервалі температур 303–343 К при вмісті адсорбенту в розчині від 2 до 6 мас. %. Встановлено, що при використанні обох адсорбентів ступінь вилучення олеїнової кислоти з розчину закономірно зростає з підвищенням температури процесу та вмісту адсорбенту. Показано, що висушування іонообмінної смоли дає змогу прискорити встановлення рівноваги та підвищити ступінь вилучення олеїнової кислоти. Отримані результати проаналізовано із застосуванням моделей адсорбції Ленгмюра, Фрейндліха та Дубініна-Радушкевича. Показано, що при застосуванні вказаних іонообмінних смол спостерігається фізична адсорбція олеїнової кислоти. Такі дані добре корелюють із результатами адсорбції на інших типах іонообмінних смол [6]. Встановлено, що при вмісті КУ-2-8 і АВ-17-8 20 мас. % ступінь адсорбції вільних жирних кислот досягає 77,1 і 69,6 %, що забезпечує кінцевий вміст кислот в олії в перерахунок на олеїнову кислоту менше 1,0 мас. %.

Отримані результати свідчать про можливість використовувати іонообмінні смоли для вилучення вільних жирних кислот із олій.

1. Schuchardt U., Sercheli R., Vargas R. M. Transesterification of vegetable oils: a review // *J. Braz. Chem. Soc.* – 1998. – № 1. – P. 199–210.
2. Annam R. A., Aravindh K. J. Comparison of Homogeneous Base Catalysts and Heterogeneous Base Catalysts for Biodiesel Transesterification of Waste Cooking Oil // *International Journal of ChemTech Research.* – 2015. – Vol. 8 (2). – P. 651–654.
3. Lin C., Hsiao M. Optimization of Biodiesel Production from Waste Vegetable Oil Assisted by Co-Solvent and Microwave Using a Two-Step Process // *Journal of Sustainable Bioenergy Systems.* – 2013. – №3. – P. 1–6.
4. Khedkar, M. A. Satpute, S. R., Bankar, S. B., Chavan P. V. Adsorptive Removal of Unsaturated Fatty Acids Using Ion Exchange Resins // *Journal of Chemical & Engineering Data.* – 2020. – №66(1). – P. 308–321.
5. Jamal, J., Boulanger, B. O. Separation of Oleic Acid from Soybean Oil Using Mixed-bed Resins // *Journal of Chemical & Engineering Data.* – 2010. – №55(7). – P. 2405–2409.
6. Ilgen O., Tümkor E. Kinetics, Equilibrium and Thermodynamic Studies on Removal of Oleic Acid from Sunflower Oil onto Amberlyst A21 // *Periodica Polytechnica Chemical Engineering.* – 2023. – №67(3). – P. 407–415.

## ДОСЛІДЖЕННЯ КРИСТАЛІЧНОЇ БУДОВИ НОВИХ СОЛЬВАТОВАНИХ ФОРМ АФІ ФУРАЗИДИН

*Шапошник А.М., Баумер В.М.*

Інститут хімії функціональних матеріалів НТК "Інститут монокристалів" НАН України  
[annapuzan199114@gmail.com](mailto:annapuzan199114@gmail.com)

Дослідження активного фармацевтичного інгредієнта (АФІ) має велике значення для фармацевтичної галузі, оскільки знання особливостей кристалічної будови діючої речовини допомагають в процесі вивчення біологічної активності та фізико-хімічних властивостей АФІ. На стадії розробки нового лікарського засобу велика увага приділяється вивченню того, чи може АФІ мати поліморфні, сольватовані, сольові або со-кристалічні форми. Отриманні дані про певну тверду форму дають змогу характеризувати АФІ за розчинністю, стабільністю, біодоступністю, механічними властивостями тощо.

В даній роботі представлено нові сольватовані форми АФІ фуразидин, які досліджено методами рентгенівської дифракції. Фуразидин – АФІ з протимікробною дією та в залежності від концентрації проявляє бактерицидну або бактеріостатичну дію.

В даній роботі, шляхом перекристалізації, отримано сольватовану форму фуразидину з етиленгліколем (ФЕГ) та нову сольватовану форму фуразидину з диметилсульфоксидом (ФДМСО). ФЕГ кристалізується в просторовій групі  $P2_1/n$  ( $a = 9.99\text{\AA}$ ,  $b = 6.48\text{\AA}$ ,  $c = 20.03\text{\AA}$ ,  $\beta = 99.58^\circ$ ). В незалежній частині елементарної комірки є одна молекула фуразидину та одна молекула етиленгліколю, що поєднані внутрішньомолекулярним водневим зв'язком (Рис.1а). Пакування структури є шаруватим в діагональній площині (201) (Рис.1б). В одному шарі молекули фуразидину пов'язані з молекулами етиленгліколю водневими зв'язками.

ФДМСО кристалізується в просторовій групі  $Pca2_1$  ( $a = 12.25\text{\AA}$ ,  $b = 6.87\text{\AA}$ ,  $c = 37.00\text{\AA}$ ). В незалежній частині елементарної комірки містяться дві молекули фуразидину та дві молекули диметилсульфоксиду (Рис.2а). Молекули фуразидину розташовані так, що їх площини майже співпадають з площинами (010) і утворюють з молекулами ДМСО пари, що поєднані водневими зв'язками, в той час як між сусідніми молекулами ДМСО водневі зв'язки відсутні. Таким чином утворюється шарувата структура в площині (001) (Рис.2б).

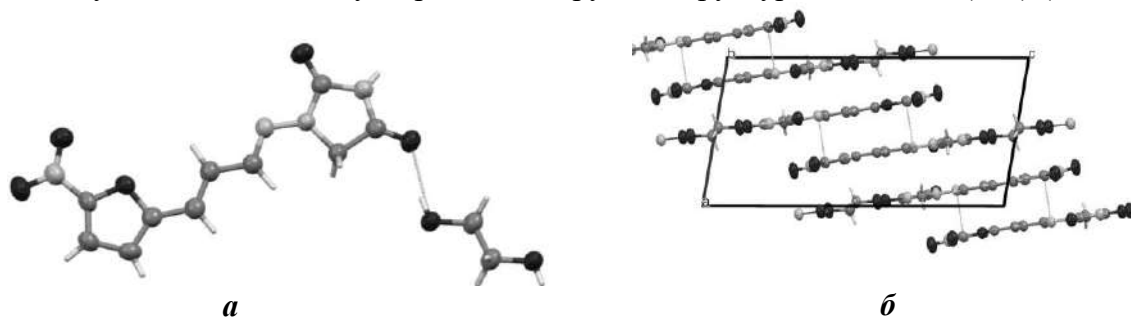


Рис.1. ФЕГ (а) молекулярна будова (б) кристалічне упакування молекул.

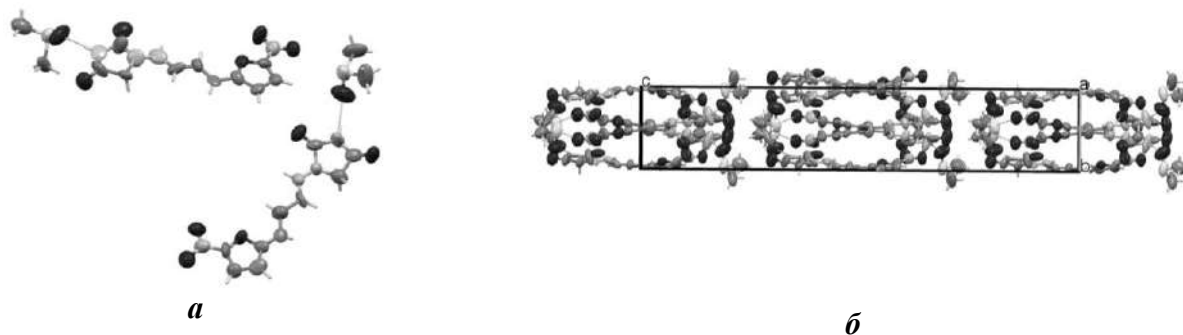


Рис.2. ФДМСО (а) молекулярна будова (б) кристалічне упакування молекул.



## ПЕРСПЕКТИВНІ ОБЛАСТІ ДЛЯ ОТРИМАННЯ ВИСОКО ЗАЛІЗИСТИХ ЦЕМЕНТІВ У СИСТЕМІ $\text{CaO-BaO-Al}_2\text{O}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3$

*Шарапов М.І., Тараненкова В.В., Золотарьов К.В., Гуровий Д.В.*

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»

[mykhailo.sharapov@ihti.khpi.edu.ua](mailto:mykhailo.sharapov@ihti.khpi.edu.ua)

Вимоги до якості та експлуатаційних властивостей в'язучих матеріалів для без випалювального шматування металургійної сировини обумовлюють необхідність створення нових складів високо залізистих цементів (ВЗЦ), здатних забезпечувати зв'язування тонкодисперсних часток рудного концентрату в єдиний конгломерат. ВЗЦ отримують шляхом спікання сировинної суміші з вапнякового і залізистого компонентів, з подальшим помелом отриманого клінкеру. Як сировину можуть використовуватися залізорудні концентрати, які одночасно є і металургійною сировиною, причому вміст  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  як рудного компонента не обмежується. Це спрощує та здешевлює виробництво ВЗЦ. Однак склад і властивості більшості відомих в'язучих матеріалів не відповідають вимогам металургії.

Розробка та застосування високо залізистих цементів найбільшою мірою відповідає вимогам відповідності складів цементу і концентрату, повністю виключаючи його «разубожіння». Так, якщо склад вихідного окатишу представлений оксидами заліза, а флюсу - карбонатом кальцію, то запропоновані високо залізисті цементи як основні фази містять ті ж оксиди –  $\text{CaO}$  і  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  у вигляді феритів кальцію.

Шихта для виробництва високо залізистого цементу складається з вапняку і залізорудного гематиту ( $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ) або гідроgetиту ( $\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot 4/3\text{H}_2\text{O}$ ). Гідроgetитовий залізорудний концентрат характеризується більш високою реакційною здатністю стосовно  $\text{CaO}$ . Процес утворення двох кальцієвого фериту в основному завершується при температурах 1050 – 1100 °C [1]. Не дивлячись на простоту, процес фазо утворення таких клінкерів вивчений недостатньо і не завжди надійно відтворюється від випалу до випалу [2].

Істотним чинником, що визначає гідравлічні властивості високо залізистого цементу, є температура випалу. Встановлено позитивний вплив на міцність цементу дрібнокристалічної структури клінкеру, отриманої при низькотемпературному випалі. Незрозуміло також вплив відновної атмосфери в печі на фазовий склад клінкеру, що виявляється в значних коливаннях його гідравлічної активності. Твердіння таких цементів відбувається з утворенням гідрофериту кальцію  $\text{C}_4\text{FH}_{13}$ , який перетворюється в стійкий  $\text{C}_3\text{FH}_6$  і  $\text{Fe}(\text{OH})_3$  [3].

Бінарна система  $\text{CaO-Fe}_2\text{O}_3$  є головною мінералостворюючою системою ВЗЦ, в якій тільки двокальцієвий ферит має чітко виражені в'язучі властивості і відноситься до швидкотвердіючих мінералів. Саме  $\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$  забезпечує основні технічні властивості ВЗЦ і спеціального високо сульфатостійкого цементу Феррарі, в якому міститься однакова кількість  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  і  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . З літературних джерел відомо, що введення  $\text{CaO}$  в  $\text{Ba}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$  стабілізує це гідравлічно активне з'єднання, яке в свою чергу є одним з головних компонентів захисного барієвого залізотримаючого цементу. Аналіз даних щодо субсолідусної будови потрійної системи  $\text{CaO-BaO-Fe}_2\text{O}_3$  виявив у ній наявність бінарного перерізу  $\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5\text{-Ba}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$ , існування якого було підтверджено нами експериментально. Механічна міцність ВЗЦ отриманих на основі складів цього перерізу була помітно вище міцності відповідних чистих бінарних сполук, що можна пояснити утворенням твердих розчинів в результаті ізовалентного ізоморфізму катіонів  $\text{Ca}^{+2}$  і  $\text{Ba}^{+2}$ . Все сказане вище стало теоретичною передумовою для розробки нових складів ВЗЦ поліфункціонального призначення в чотирикомпонентній системі  $\text{CaO-BaO-Al}_2\text{O}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3$ . Однак, у відомій літературі відсутні дані про її будову, що ускладнює розробку нових видів спеціальних в'язучих на її основі

Метою нашої роботи було дослідження субсолідусної будови чотирикомпонентної системи  $\text{CaO-BaO-Al}_2\text{O}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3$  в області, обмеженій двокальцієвим і двобарієвим феритами, чотирикальцієвим алюмоферитом і моноалюмінатом барію, і, як наслідок, виявлення



перспективних перерізів, які можуть бути основою для розробки нових ВЗЦ, склад яких максимально наближений до складів відповідних металургійних шихт.

На підставі нашого дослідження було дано геометричну оцінку (розраховано довжини кіннод, площі трикутників) (див. табл. 1 та 2) та проведено оцінку температур і складів евтектик у встановлених бінарних та потрійних перерізах системи (див. табл.3).

**Таблиця 1**

Характеристика коннод системи  $\text{CaO} - \text{BaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{Fe}_2\text{O}_3$

| Коннода                                                                             | L, ‰      | L·1000, ‰ |
|-------------------------------------------------------------------------------------|-----------|-----------|
| $\text{BaAl}_2\text{O}_4 - \text{Ba}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$                        | 0,373838  | 373,838   |
| $\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5 - \text{Ba}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$               | 0,575312  | 575,312   |
| $\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5 - \text{Ca}_4\text{Al}_2\text{Fe}_2\text{O}_{10}$ | 0,277056  | 277,056   |
| $\text{BaAl}_2\text{O}_4 - \text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5^*$                      | 0,7195548 | 719,5548  |
| $\text{BaAl}_2\text{O}_4 - \text{Ca}_4\text{Al}_2\text{Fe}_2\text{O}_{10}^*$        | 0,5990497 | 599,0497  |

\*Примітка: конноди проходять в тримірному просторі концентраційного тетраедра  $\text{CaO} - \text{BaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{Fe}_2\text{O}_3$

**Таблиця 2**

Площі трикутників системи  $\text{CaO} - \text{BaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{Fe}_2\text{O}_3$

| Трикутник                                                                                                     | S, ‰  | S·1000, ‰ | Ступінь асиметрії |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|-----------|-------------------|
| $\text{BaAl}_2\text{O}_4 - \text{Ba}_2\text{Fe}_2\text{O}_5 - \text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$               | 0,107 | 107       | 1,93              |
| $\text{BaAl}_2\text{O}_4 - \text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5 - \text{Ca}_4\text{Al}_2\text{Fe}_2\text{O}_{10}$ | 0,080 | 80        | 2,60              |

Слід зауважити, що всі елементарні фігури характеризуються достатньо низьким ступенем асиметрії, що свідчить про технологічність складів отриманих на їх основі.

**Таблиця 3**

Оцінка температур та складів евтектик в перерізах системи  $\text{CaO} - \text{BaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{Fe}_2\text{O}_3$

| № | Переріз                                                                                                       | Температура евтектики, К | Вміст, мас. %  |                |                |
|---|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------|----------------|----------------|----------------|
|   |                                                                                                               |                          | X <sub>1</sub> | X <sub>2</sub> | X <sub>3</sub> |
| 1 | $\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5 - \text{Ba}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$                                         | 1553                     | 28,5           | 71,5           | -              |
| 2 | $\text{BaAl}_2\text{O}_4 - \text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$                                                  | 1675                     | 15,8           | 84,2           | -              |
| 3 | $\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5 - \text{Ca}_4\text{Al}_2\text{Fe}_2\text{O}_{10}$                           | 1611                     | 43,4           | 56,6           | -              |
| 4 | $\text{BaAl}_2\text{O}_4 - \text{Ba}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$                                                  | 1619                     | 7,2            | 92,8           | -              |
| 5 | $\text{BaAl}_2\text{O}_4 - \text{Ca}_4\text{Al}_2\text{Fe}_2\text{O}_{10}$                                    | 1671                     | 9,3            | 90,7           | -              |
| 6 | $\text{BaAl}_2\text{O}_4 - \text{Ba}_2\text{Fe}_2\text{O}_5 - \text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$               | 1540                     | 5,2            | 67,8           | 26,9           |
| 7 | $\text{BaAl}_2\text{O}_4 - \text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5 - \text{Ca}_4\text{Al}_2\text{Fe}_2\text{O}_{10}$ | 1597                     | 8,0            | 41,7           | 50,3           |

Отримані дані дозволять розробити нові склади спеціальних високоміцних залізовмісних кальцій-барієвих в'язучих на основі композицій системи  $\text{CaO}-\text{BaO}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{Fe}_2\text{O}_3$ .

1. Лотош В.Е. Безобжиговое окускование руд и концентратов / В.Е.Лотош, А.И.Окунев.- М.: Наука, 1980.

2. Бережний А.С. Фізико-хімічні системи тугоплавких, неметалевих і силікатних матеріалів / А.С. Бережний, Я.Н. Питак, О.Д. Пономаренко, Навчальний посібник. – К.: НОК ВО, 1992. – 172 с.

3. Бережной А.С. Многокомпонентные щелочные оксидные системы/ А.С. Бережной-К.: Наукова думка. – 1988.

# **ХІМІЧНІ ПРЕПАРАТИ**

## **В БІОЛОГІЇ ТА МЕДИЦИНІ**

## PHYSICOCHEMICAL AND ANTIBACTERIAL PROPERTIES OF ORNIDAZOLE-BASED NANOCOMPOSITES FOR MEDICAL APPLICATION

*Avramenko V.<sup>1</sup>, Vakuliuk P.<sup>1</sup>, Furtat I.<sup>1</sup>, Pryshchepa O.<sup>2</sup>, Kozakevych R.<sup>4</sup>, Demianenko E.<sup>4</sup>, Murlanova T.<sup>1,3</sup>, Smarsly B.<sup>3</sup>, Pomastowski P.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> National University of Kyiv-Mohyla Academy, Ukraine, [viktoria.avramenko@ukma.edu.ua](mailto:viktoria.avramenko@ukma.edu.ua)

<sup>2</sup> Nicolaus Copernicus University in Torun, Poland

<sup>3</sup> Institute of Physical Chemistry, Justus Liebig University, Giessen, Germany

<sup>4</sup> Chuiko Institute of Surface Chemistry, NAS of Ukraine, Ukraine

The rapid adaptation of bacteria to widely used medical drugs and the insufficient development of new antibacterial agents create a global problem of forming microorganisms with multiple drug resistance. This issue drives the search for innovative approaches, among which the development of drug-loaded nanocomposite materials is considered a promising strategy for combating multidrug-resistant bacterial strains [1]. One effective method for obtaining such materials is modifying silica surfaces with biologically active substances, which enhances their bioavailability and ensures controlled drug release, thereby reducing the risk of resistance development in pathogenic microorganisms [1, 2]. This study analyzed nanocomposites with ornidazole – an antimicrobial agent effective against anaerobic bacteria and protozoa. Investigating the physicochemical characteristics of the obtained nanocomposites enables the assessment of their stability, morphology, and interactions with biological systems. Also, studying the antimicrobial properties of these materials helps determine their effectiveness against pathogenic microorganisms and their potential for improving antibacterial therapy.

Considering the above, this study aimed to investigate the physicochemical and antibacterial properties of silica-based nanocomposites modified with ornidazole using quantum chemical calculations, scanning electron microscopy, the physical adsorption method, and biological methods. Quantum chemical calculations have demonstrated that the interaction between the ornidazole molecule and the silica surface is thermodynamically feasible during adsorption from the gas phase and from an aqueous solution. It was established that the energy of intermolecular interaction in the gas-phase approach ( $\Delta G_{int}$ ) and the energetic effect of the water molecule displacement reaction by ornidazole for silica are -80.9 kJ/mol and -33.5 kJ/mol, respectively. The hydration energy ( $\Delta G_{hydr}$ ) of ornidazole is lower (-103.1 kJ/mol) compared to the corresponding value for silica (-180.6 kJ/mol).

The physical adsorption method confirmed that the specific surface area of silica modified with ornidazole decreased compared to the initial silica, depending on the percentage content of the drug. Morphological and structural analysis of the nanocomposites using SEM confirmed the uniform distribution of ornidazole on the silica surface.

It is important to study the adsorption and desorption processes to predict the ability to control the release of the active substance. The adsorption isotherm of ornidazole on silica corresponds to the S-type, indicating weak interaction with the surface and competition with the solvent for active sites. The bioavailability assessment of the active substance demonstrated that ornidazole from the nanocomposite is released significantly faster than pure ornidazole, achieving a higher solubility level within the same time frame. This is explained by the transition of ornidazole into an amorphous state, as confirmed by X-ray phase analysis.

The assessment of antibacterial activity showed that nanocomposites modified with ornidazole exhibited a more pronounced inhibitory effect on Gram-positive (*S. aureus*) and Gram-negative (*E. coli*) bacterial strains compared to initial silica, which displayed weak antibacterial activity.

1. Munir M. U., Ahmed A., Usman M., Salman S. Recent Advances in Nanotechnology-Aided Materials in Combating Microbial Resistance and Functioning as Antibiotics Substitutes// *International Journal of Nanomedicine*. – 2020. – V.15. – P.7329–7358.

2. Mohamed Isa E. D. et al. Progress in Mesoporous Silica Nanoparticles as Drug Delivery Agents for Cancer Treatment//*Pharmaceutics*. – 2021. – V.13. I.2. – P.152.

## STUDY OF GUANIDINE-CONTAINING OLIGOMER FOR DESINFECTANT APPLICATION

Hodlevskiy H.<sup>1</sup>, Hudyma A.<sup>1</sup>, Vakuliuk P.<sup>1</sup>, Pryshchepa O.<sup>2</sup>, Furtat I.<sup>1</sup>, Vortman M.<sup>3</sup>, Fijałkowski P.<sup>2</sup>, Rafińska K.<sup>2</sup>, Lemesko V.<sup>3</sup>, Murlanova T.<sup>1,4</sup>, Smarsly B.<sup>4</sup>, Pomastowski P.<sup>2</sup>, Shevchenko V.<sup>3</sup>

<sup>1</sup> National University of Kyiv-Mohyla Academy, Ukraine, [a.hudyma@ukma.edu.ua](mailto:a.hudyma@ukma.edu.ua)

<sup>2</sup> Nicolaus Copernicus University in Torun, Poland

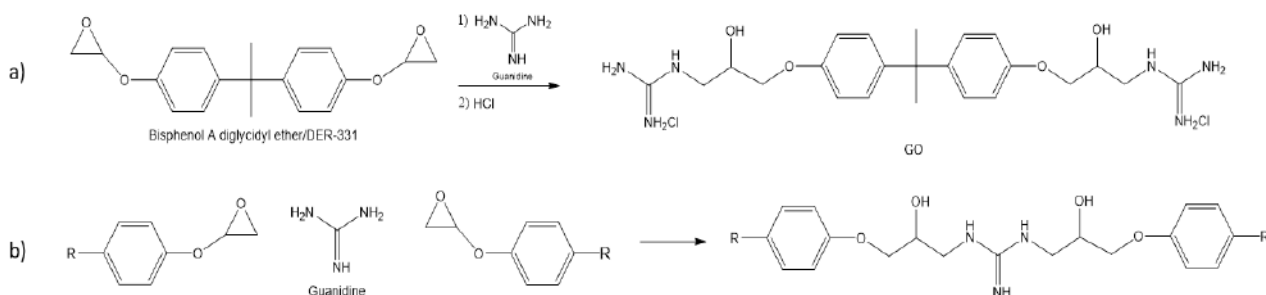
<sup>3</sup> Institute of Macromolecular Chemistry, NAS of Ukraine, Ukraine

<sup>4</sup> Institute of Physical Chemistry, Justus Liebig University, Giessen, Germany

Nowadays, the problem of microorganism resistance is of great importance and every day it is becoming more and more serious. Specifically, there is an increase in resistance to the effect of physical factors (e.g., UV radiation), as well as widely used disinfectants, such as tertiary amines and quaternary ammonium compounds [1]. Additionally, the problem of resistance is becoming more and more severe when dealing with pathogens of nosocomial infections due to the high chance of complications during patients' infectious processes [2].

The creation of novel, extremely efficient disinfectants, including nitrogen-containing organic compounds, which are currently being extensively exploited as bactericides, is one approach to address this issue. Currently, guanidine-containing ingredients are frequently included in the composition of disinfectants and other antiseptic agents [3]. Furthermore, numerous additional substances with even greater biocidal action have been created based on guanidine's low molecular weight and polymeric derivatives [4].

The purpose of this project is a creation of guanidine containing oligomer, that could be used as a disinfectant against multiresistant microorganisms.



The reaction process is shown in the figure above (a). It has been noted that due to the presence of multiple guanidine reacting centres, the reaction may proceed in a manner shown in (b) resulting in elongated oligomer form which was confirmed using LDI-TOF-MS analysis (MALDI-TOF/TOF mass spectrometer UltrafleXtreme). Structure and composition of synthesized oligomer were further confirmed using NMR (BrukerBiospin NMR Spectrometer AV400), FTIR-ATR (Alpha FTIR spectrometer), and SEM-EDX (Hitachi S5500) methods. Additionally, other characteristics, such as fluorescence, zeta potential, average micelle size and decomposition values (temperatures) were studied.

Bactericidal activity was studied using Resazurin-based 96-well plate microdilution method, and Gould suspension methods, while cytotoxicity was studied using MTT cell viability assay test.

The resulting oligomer possesses amphiphilic and surfactant properties, which are advantageous for its bactericidal activity against both Gram-positive and Gram-negative bacteria. Experiments performed on *Staphylococcus aureus*, *Escherichia coli*, *Klebsiella pneumoniae* and *Pseudomonas aeruginosa* further show good antibacterial effect of guanidine containing oligomer at relatively low concentrations. Additionally, low synthesis temperature, prevalence of reagents on the market and their relatively low prices make it favourable for upscale manufacturing as a disinfectant.

1. Jennings M.C. , Minbiole K.P.C. , Wuest W.M. . Quaternary ammonium compounds: an antimicrobial mainstay and platform for innovation to address bacterial resistance // *American Chemical Society (ACS) Infectious Diseases*/ - 2015. - Vol. 1(7). - P. 288-303.
2. Khan H.A. , Baig F.K. Nosocomial infections: Epidemiology, prevention, control and surveillance // *Asian Pacific Journal of Tropical Biomedicine*. – 2017. - Vol. 7(5).- P. 478-482.
3. Bureš F. Quaternary ammonium compounds: simple in structure, complex in application // *Topic in Current Chemistry*. - 2019. - Vol. 377(14). - P. 1-21.
4. Kim S-H. , Semenya D. , Castagnolo D. Antimicrobial drugs bearing guanidine moieties: A review // *European Journal of Medicinal Chemistry*. – 2021.-Vol. 216. - 113293.

## DEVELOPMENT OF EXTRACTION-SPECTROPHOTOMETRIC METHOD FOR THE QUANTITATIVE DETERMINATION OF THE ANTIDEPRESSANT FLUOXETINE WITH METHYL ORANGE

*Karpushyna S.A.,<sup>1</sup> Baiurka S.V.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Uman National University of Horticulture, [svitkrp@gmail.com](mailto:svitkrp@gmail.com)

<sup>2</sup>National University of Pharmacy

Antidepressant poisonings occupy a leading position among the psychotropic drug intoxications all over the world. Fluoxetine (±)-*N*-Methyl-γ-[4-(trifluoromethyl)phenoxy]benzenepropanamine hydrochloride is a monocyclic antidepressant. Fluoxetine, sold under the brand name Prozac, is an antidepressant of the selective serotonin reuptake inhibitor (SSRI) class used for the treatment of major depressive disorder, anxiety, panic disorder. It is also approved for treatment of major depressive disorder in adolescents and children 8 years of age and over. [1, 2]. Serious side effects of fluoxetine include serotonin syndrome, mania, seizures, an increased risk of suicidal behavior in people under 25 years old, and an increased risk of bleeding [3]. Cases of acute and lethal poisoning by fluoxetine have been registered. Postmortem fluid and tissue distribution of fluoxetine were within the ranges for various biological samples: blood 1.3–6.8 mg/L, liver 29–128 µg/g, urine 5.5–19 mg/L. The main trend of bioanalytical method development for fluoxetine determination is the prevalence of column chromatography with mass spectrometric detection. However, these analytical methods are not always available for a toxicological laboratory.

The aim of the study was to develop simple and sensitive method for fluoxetine quantitative determination using extraction-spectrophotometry in the visible region of the spectrum with the methyl orange, an acidic azo dye, suitable for the chemical-toxicological analysis.

**Materials and methods.** Standard solution of the drug containing 100.0 µg/mL of the fluoxetine basic form (SS) was prepared and 0.1; 0.2; 0.3; 0.4; 0.5; 0.7; 0.9 mL aliquots of SS were taken for creating calibration curve. Absorbance of colored solutions was measured at 540±2 nm; 10 mm light pathway cuvette was used.

**Results and discussion.** To determine the optimal conditions of extraction-spectrophotometric method of the fluoxetine determination it has been previously found that methyl orange, an acidic azo dye (0.05% aqueous solution) formed the ionic associate with the drug in the medium of the acetate buffer of pH 4.6 which was extracted with chloroform. The colour of ionic associate solution (yellow) was low-intensive, so to enhance the sensitivity of the method the ionic associates formed was destroyed by addition of 1% sulphuric acid solution in absolute ethanol to the resulting chloroform layer. Thus, the colored red solution with a significantly higher absorption was obtained. The absorption values were processed by linear regression method. The equation of the regression line was the following:  $y=0.00907 \times x; (r=0.999)$ ; LOD and LOQ values were, respectively, 2.1 µg and 6.2 µg in the sample. The linearity of the calibration curve was within the range of fluoxetine concentrations from 10.0 to 100.0 µg in the sample.

Conclusions. Thus, the extraction-spectrophotometric method developed satisfied the requirements of the chemical-toxicological analysis with respect to the sensitivity and can be used in toxicological study of the biological samples for the presence of fluoxetine.

1. Nuñez N.A. et al. Augmentation strategies for treatment resistant major depression: A systematic review and network meta-analysis // *Journal of Affective Disorders*. – 2022. V. 1. No 302. – P. 385-400.

2. Vas C. et al. Pharmacotherapy for Treatment-Resistant Depression: Antidepressants and Atypical Antipsychotics // *The Psychiatric clinics of North America*. – 2023. – V. 46. No 2. – P. 261-275.

3. Hetrick S.E. et al. New generation antidepressants for depression in children and adolescents: a network meta-analysis. // *Cochrane Database of Systematic Reviews*. – 2021. – V. 24. No 5. – CD013674.

## QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF SOLVATION AND ADSORPTION OF NATURAL POLYPHENOL CURCUMIN ON THE SURFACE OF SILICA ENTEROSORBENT

*Kazakova O.O., Barvinchenko V.M., Lipkovska N.O.*

Chuiko Institute of Surface Chemistry, NAS of Ukraine, [kazakova\\_olga@ukr.net](mailto:kazakova_olga@ukr.net)

Nanocomposites containing fumed silica and physiologically active compounds of plant origin, extracts and/or dispersions of medicinal plants combine the therapeutic effectiveness of bioactive molecules and a detoxifying action of enterosorbents. Their development requires detailed experimental and theoretical studies devoted to the interaction of silica with biologically active compounds. The study of the adsorption of natural polyphenol curcumin (CUR) from water-ethanol solutions ( $\text{pH} = 5.8 \pm 0.2$ ) on the silica surface showed that CUR binds to the sorbent through the formation of hydrogen bonds between its carbonyl group and non-dissociated silanol groups on the silica surface ( $\text{pK}_{\text{SiOH}} = 8$ ). Under these conditions curcumin also exists in molecular form, as evidenced by the value of its first dissociation constant ( $\text{pK}_{\text{a1}} = 8.4$ ).

Quantum chemical methods were used to interpret experimental data and elucidate the role of enol and ketone tautomers of Cur in adsorption interactions. Full optimization of curcumin and model cluster of 36  $\text{SiO}_{4/2}$  tetrahedra was performed by the semi empirical PM3 method (package GAMESS) [1]. Hartree-Fock theory with 6-31G(d,p) basis and Kitaura-Morokuma method [2] were used to estimate the components of intermolecular interaction energy. The solvation model SM 5.42/PM3 and SM 5.42/6-31G(d) (GAMESSPLUS) [3] was used to calculate solvent effects for molecules, clusters and their complexes.

Since curcumin exists in solution in an equilibrium of ketone and enol forms, for which different structures are possible, Gibbs free energy calculations were performed for the most probable CUR conformers (Fig. 1) taking into account solvation effects. Three major conformers of the curcumin enol form (eCUR) and one conformer of the keto form (kCUR) were studied. The designation “*trans*-eCUR” indicates that the two phenol- $\text{OCH}_3$  groups are on opposite sides, and “*cis*-eCUR” means that they are on the same side. The symbols “*up*” and “*down*” refer to the position of the phenol  $-\text{OCH}_3$  groups in relation to the  $-\text{OH}$  and  $\text{C} = \text{O}$  groups in the eCUR molecule and indicate that they are on the same or opposite sides, respectively.

In aqueous solution, curcumin in the keto form turned out to be the most stable (Table 1), since the difference in Gibbs free energies of the enol tautomers relative to the keto tautomer is positive and ranges from 13.5 for *trans*-eCUR to 16.1 kJ/mol for *cis-up*-eCUR. Unlike aqueous solutions, interaction with the silica cluster leads to stabilization of enol tautomers. Since the calculated energy of interaction with the silica cluster is maximal for the *cis-up* enol tautomer, further calculations were performed for it.



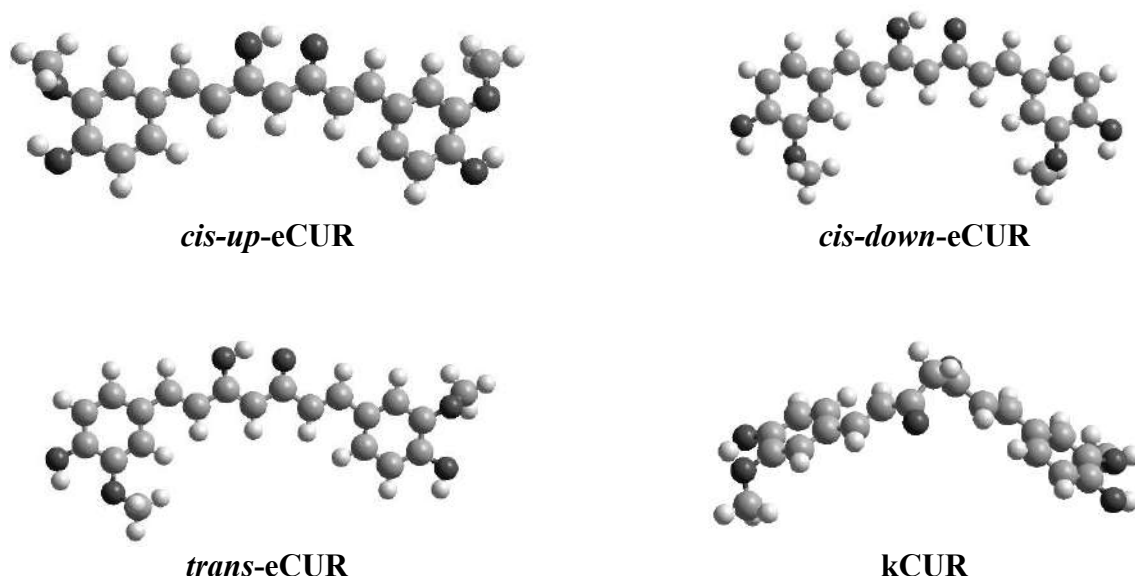


**Fig. 1.** Curcumin tautomer forms (optimized geometry).

**Table 1**

Difference in Gibbs free energies between eCUR and kCUR tautomers ( $\Delta G_{\text{liq(eCUR)}} - \Delta G_{\text{liq(kCUR)}}$ ); Gibbs free energies of solvation ( $\Delta G_s$ ) and adsorption ( $\Delta G_{\text{ads}}$ ) of curcumin in keto and enol forms on the silica surface in aqueous solution (PM3/SM5.42)

| Energies, kJ/mol                                            | Curcumin tautomer forms |              |               |                 |
|-------------------------------------------------------------|-------------------------|--------------|---------------|-----------------|
|                                                             | kCUR                    | eCUR         |               |                 |
|                                                             |                         | <i>trans</i> | <i>cis-up</i> | <i>cis-down</i> |
| $\Delta G_{\text{liq(eCUR)}} - \Delta G_{\text{liq(kCUR)}}$ | 0                       | 13.5         | 16.1          | 15.9            |
| $\Delta G_s$                                                | -70.9                   | -81.0        | -69.6         | -69.3           |
| $\Delta G_{\text{ads}}$                                     | 0.9                     | -0.7         | -19.3         | -15.8           |

To model the adsorption properties of curcumin, the energy of intermolecular interaction of *cis-up-eCUR* molecules with the  $\equiv\text{SiOH}$  groups of silica cluster in gas phase was calculated as the sum of various contributions – exchange, electrostatic, charge transfer, polarization, and higher order energies. Quantum chemical calculations showed that electrostatic interaction provides the main stabilizing contribution (75%) to the hydrogen bonding of curcumin molecules with the silica surface.

In water-ethanol solutions, the participation of water molecules bound to the surface is especially effective in the formation of adsorption complexes. OH groups both on the surface of silica and in the curcumin molecule demonstrate proton-donor ability, due to their acidic nature, while water molecules exhibit both proton-donor and proton-acceptor properties in hydrogen bonding. The energy of interaction of water molecules with the OH groups of curcumin and silica is higher than for alcohol molecules in these systems (Table 2).

**Table 2**

The Gibbs free energies of intermolecular interaction ( $\Delta G_{\text{ads}}$ ) of solute molecules with *cis-up-eCUR* and a silica cluster (6-31G(d)/SM5.42)

| Solvent | Solvate complex                                          | $\Delta G_{\text{ads}}$ , kJ/mol | Solvate complex                                        | $\Delta G_{\text{ads}}$ , kJ/mol |
|---------|----------------------------------------------------------|----------------------------------|--------------------------------------------------------|----------------------------------|
| Water   | $\text{H}_2\text{O} \dots \text{cis-up-eCUR}$            | -15.92                           | $\text{H}_2\text{O} \dots \text{SiO}_{4/2}$            | -5.34                            |
| Ethanol | $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} \dots \text{cis-up-eCUR}$ | -6.92                            | $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} \dots \text{SiO}_{4/2}$ | -2.73                            |

Thus, an increase in the number of water molecules in an aqueous ethanol solution increases the thermodynamic probability of the formation of adsorption complexes of curcumin with silica.

1. Schmidt M.W., Baldrige K.K., Boatz J.A., Elbert S.T., Gordon M.S., Jensen J.J., Koseki S., Matsunaga N., Nguyen K.A., Su S., Windus T.L., Dupuis M. The General Atomic and Molecular Electronic Structure System // *J. Comput. Chem.* – 1993. – V. 14. – P. 1347-1363.

2. Morokuma K., Kitaura K. Energy Decomposition Analysis of Molecular Interactions. In: Politzer P., Truhlar D.G. (eds). *Chemical Applications of Atomic and Molecular Electrostatic Potentials.* – New York: Plenum Press, 1981. - P. 215-242.

3. Higashi M., Marenich A. V., Olson R. M., Chamberlin A. C., Pu J., Kelly C. P., Thompson J. D., Xidos J. D., Li J., Zhu T., Hawkins G. D., Chuang Y.-Y., Fast P. L., Lynch B. J., Liotard D. A., Rinaldi D., Gao J. GAMESSPLUS – version 2010-2, University of Minnesota, Minneapolis, 2010, based on the General Atomic and Molecular Electronic Structure System (GAMESS).

## CONFORMATIONAL SAMPLING OF DUAL CK2/HDAC INHIBITORS BY CLUSTERING AND BOLTZMANN-TYPE DISTRIBUTION ANALYSIS IN DIFFERENT ENVIRONMENTS

*Klenina O.V.<sup>1,2</sup>, Márquez-Cantudo L.<sup>1</sup>, Coderch C.<sup>1</sup>, de Pascual-Teresa B.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup> Facultad de Farmacia. Universidad San Pablo CEU, Madrid, Spain,

<sup>2</sup> Danylo Halytsky Lviv National Medical University, Ukraine, [olena\\_klenina@yahoo.com](mailto:olena_klenina@yahoo.com)

Cancer remains one of the greatest health threats globally. Over the past decades, chemists and pharmacologists have been intensively searching for new anticancer drugs [1]. The discovery of multitargeting inhibitors has emerged as a promising strategy in anticancer therapy research aimed at simultaneous modulation of multiple molecular pathways [2]. CK2 and HDAC are both related in similar cancer-related biological pathways, the simultaneous inhibition of these targets by a dual-acting inhibitor should improve efficacy compared to single-target therapeutics [3].

The systematic development of CK2/HDAC dual inhibitors held by Drug Design and Synthesis Research Group of San Pablo CEU University, Madrid, Spain, lead to novel dual-target ligands construction through a generic three-part “Cap-linker-zinc binding group (ZBG)” pharmacophore model [5].

The objective of the present research was to perform a conformational sampling for dual CK2/HDAC inhibitors using MD simulations followed by clustering and Boltzmann-type distribution analysis in an aqueous environment and in a customer mixed water-trifluoroacetic acid (TFA) solvent. In various computational drug discovery workflows, identifying the most probable low-energy conformations of drug-like molecules is essential for predicting key chemical and physical properties relevant to their function and efficacy [4]. Employing computational techniques to explore the conformational landscape allows streamline lead optimization and accelerate the development of novel therapeutics.

Conformational search was performed for two dual CK2/HDAC inhibitors (Fig.1), combining the pharmacophoric groups of Tucidinostat as ZBG, chelating Zn<sup>2+</sup> cation at the catalytic domain of HDAC1, and the Cap group form CX-4945 as ATP-competitive CK2 inhibitor.

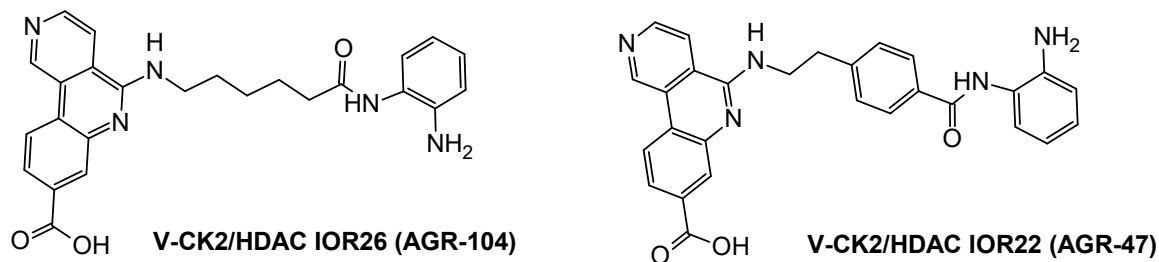


**Fig 1.** Structures of dual CK2/HDAC inhibitors.

The compounds under study varied in their linkers' structure only, containing the alkyl linear chain and alkyl chain incorporating phenyl motif.

In order to explore the conformational behavior of the compounds in aqueous and mixed water-TFA environments, the appropriate protonation states of the compounds were assigned at pH = 7.4 in case of aqueous environment and at pH = 2.0 for mixed solvent. Solvation of the compounds in mixed solvent environment was performed through the customized solvent box generation using PACKMOL webserver (<https://m3g.github.io/packmol/>).

Conformational search workflow included the molecular geometry optimization with Gaussian09 [6] followed MD simulations using Amber 22 suite [7]. MD simulations were performed in four stages: minimization, thermalization, equilibration, and production run. The MD production run was performed during 100 ns for aqueous solution, and during 20 ns in case of mixed solvation. Trajectories were analyzed using the cpptraj module.

Generated conformers were subjected to clustering analysis with cpptraj based on hierarchical agglomerative algorithm resulting in 10 clusters generation for each compound in different environments.

Boltzmann-type distribution analysis in an aqueous environment and in a customized water-TFA solvent box was also performed. The relative probabilities of each conformation being occupied were calculated considering the energy differences between various conformations. The Boltzmann distribution was used to understand the relative stability and population of various conformations.

*Acknowledgements: Financial support from MICINN for PID2021-123786OB-I00 project is kindly acknowledged. O. K. thanks Universidad San Pablo CEU for a Postdoctoral Contract for Ukrainian Researchers 2022-2025. L. M.-C. thanks Universidad San Pablo CEU and Banco Santander for a Young Researcher contract.*

1. Gach-Janczak K., Drogosz-Stachowicz J., Janecka A., Wtorek K., Mirowski M. Historical Perspective and Current Trends in Anticancer Drug Development//*Cancers (Basel)*. - 2024. - Vol.16. I.10. - P.1878.

2. Lembo V., Bottegoni G. Systematic Investigation of Dual-Target-Directed Ligands. - *Journal of Medicinal Chemistry*. - 2024. – Vol.67. I.12. - P. 10374-10385.

3. Martínez R., Geronimo B.D., Pastor M., Zapico J.M., Coderch C., Panchuk R., Skorokhyd N., Maslyk M., Ramos A., de Pascual-Teresa B. Multitarget Anticancer Agents Based on Histone Deacetylase and Protein Kinase CK2 inhibitors. - *Molecules*. - 2020. - Vol.25. I.7. - P.1497.

4. Terayama, K., Sumita, M., Katouda, M., Tsuda, K., Okuno, Y. Efficient search for energetically favorable molecular conformations against metastable states via gray-box optimization. - *Journal of Chemical Theory and Computation*. - 2021. - Vol.17. I.8. - P.5419-5427.

5. Rangasamy, L., Ortín, I., Zapico, J. M., Coderch, C., Ramos, A., & de Pascual-Teresa, B. New dual CK2/HDAC1 inhibitors with nanomolar inhibitory activity against both enzymes. - *ACS Medicinal Chemistry Letters*. - 2020. - Vol.11. I.5. - P.713-719.

6. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. *et al. Gaussian 09*. - Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.

7. Case D.A., Duke R.E., Walker, R. C. *et al. AMBER 2022*, University of California, San Francisco, United States - California.

## INTERACTION OF POLYPHENOLS WITH MODEL MEMBRANES: A MOLECULAR DYNAMICS STUDY

*Lonin D.O., Malovytsia U.K., Zhytniakivska O.A., Vus K.O., Trusova V.M., Gorbenko G.P.*  
V.N. Karazin Kharkiv National University, [lonin2022tb11@student.karazin.ua](mailto:lonin2022tb11@student.karazin.ua)

Polyphenols, a diverse group of naturally occurring compounds with a wide spectrum of biological activities, currently attract great attention in a variety of aspects. One of such aspects concerns the membrane-modifying properties of polyphenolic compounds in dependence on the lipid bilayer composition. The aim of the present study was to explore the interaction of a series of polyphenols (curcumin in enol and keto form, gallic acid, salicylic acid, quercetin, resveratrol, sesamin) with the model lipid membranes of different composition using the molecular dynamics technique.

To perform molecular dynamics (MD) simulations of the model membrane systems the input files were prepared using the web-based graphical interface CHARMM-GUI. The topologies of polyphenols were generated with the CHARMM-GUI Ligand Reader and Modeler. The obtained files were further used to generate the polyphenol-lipid systems using the Membrane Builder option. MD simulations were carried out for polyphenols with three different membrane systems with a nearly identical number of lipids. The first one was composed of 146 and 147 molecules of 1-palmitoyl-2-oleoyl-sn-glycero-3-phosphatidylcholine (POPC) in upper and lower leaflets, respectively. The second system was represented by heterogeneous lipid bilayer composed of POPC and anionic lipid cardiolipin (LOCCL2 lipid component in the CHARMM-GUI lipid bank) with POPC:LOCCL2 ratio 89:11, referred to here as CL11. The third type of the lipid bilayer (Chol30) was composed from 119 POPC and 51 cholesterol molecules in each monolayer (POPC:Chol molar ratio 7:3). The initial distance of polyphenol translation from the membrane midplane along the bilayer normal was 20 Å. To obtain a neutral total charge of the system the required amount of counterions was added. The molecular dynamics simulations of the model membrane systems and analysis of the trajectories were carried out using the GROMACS 2024.2 software with the CHARMM36m force field at a temperature of 310 K in the NPT ensemble with the time step for MD simulations 2 fs. The Particle Mesh Ewald method was utilized for correct treatment of the long-range electrostatic interactions. The bond lengths were constrained using the LINCS algorithm. The pressure and temperature controls were performed using the V-rescale thermostat. The energy minimization and subsequent equilibration included 50000 steps and 11150000 steps, respectively. The whole-time interval for MD calculations was 100 ns. The GROMACS command gmx density was used to calculate the mass density distribution for various components of the lipid bilayer and density distribution of polyphenols across a lipid bilayer. The molecular graphics and visualization of the simulation evolution over time were performed using the Visual Molecular Dynamics (VMD) software.

The analysis of the results of molecular dynamics simulation showed that all polyphenols (except sesamin in POPC bilayer) reside at the lipid-water interface and do not leave the lipid bilayer during the simulation time. As judged from the density distributions, the examined polyphenolic compounds do not exert significant influence on the molecular organization of headgroup, glycerol and acyl chain regions of POPC, CL11 and Chol30 bilayers. The maximum position in the mass density distribution profiles of the ligands are presented in Table.

**Table**

The separation between polyphenol center of mass and lipid bilayer midplane, nm

|                      | <b>Chol30</b> | <b>CL11</b> | <b>POPC</b>  |
|----------------------|---------------|-------------|--------------|
| Curcumin (enol form) | 1.344         | 1.148       | 1.146        |
| Curcumin (keto form) | 1.314         | 1.126       | 1.127        |
| Gallic acid          | 1.648         | 1.416       | 1.411; 2.574 |
| Salicylic acid       | 1.439         | 1.231       | 1.391        |
| Quercetin            | 1.708         | 1.287       | 1.295        |
| Resveratrol          | 1.677         | 1.269       | 1.274        |
| Sesamin              | 1.712         | 1.302       | 1.654; 3.047 |

As can be seen from Table, the polyphenols under study can be divided into three groups:

1) Curcumin (enol and keto forms) and salicylic acid reside in the interfacial region between the upper carbons of hydrophobic tails and the glycerol moiety (the peaks in the mass density profiles of acyl chains are located at 0.96, 0.62 and 0.66 nm, while those for the glycerol groups are located at 1.76, 1.45 and 1.5 nm for Chol30, CL11 and POPC bilayers, respectively);

2) Quercetin and resveratrol are situated in the interfacial region between the upper carbons of hydrophobic tails and the glycerol moiety in POPC and CL11 bilayers, while in the Chol30 lipid membranes the peaks in the mass distribution are observed at 1.71 nm and 1.68 nm, respectively, assuming the polyphenol location at the level of glycerol moiety;

3) Sesamin and gallic acid bind more rapidly to the CL- and Chol-containing model membranes than to the neat PC bilayer. It was found that in the CL- and Chol-containing membranes these polyphenols reside at the level of glycerol moiety, whereas in the neat PC bilayer sesamin leaves the lipid bilayer after 20 ns of MD run, while gallic acid appeared to retain its position at the lipid-water interface during ~ 70 ns of MD simulation.

To summarize, the analysis of the MD simulation results showed that the lipid bilayer partitioning and location of the examined polyphenols depend both on the membrane lipid composition and structural peculiarities of polyphenolic compounds.

## PHARMACOGNOSTIC POTENTIAL OF ESSENTIAL OIL PLANTS IN CREATING INNOVATIVE COSMETICS: THE EXPERIENCE OF THE "LAVENDER PROVINCE"

*Paientko V.V.<sup>1</sup>, Kapitula A.V.<sup>2</sup>, Matkovsky A.K.<sup>1</sup>, Kustovska A.V.<sup>3</sup>, Grygorieva O.V.<sup>4</sup>*

<sup>1</sup>Chuiko Institute of Surface Chemistry, Ukraine, [payentkovv@gmail.com](mailto:payentkovv@gmail.com)

<sup>2</sup>Sole Entrepreneur Anna Kapitula, Ukraine

<sup>3</sup>Dragomanov Ukrainian State University, Ukraine,

<sup>4</sup>M.M. Gryshko National Botanical Garden, NAS of Ukraine, Ukraine

Essential oil plants, such as lavender, sage and others, are an important source of biologically active substances that have antiseptic, anti-inflammatory, antioxidant and soothing properties. Modern approaches to the production of natural cosmetics require compliance with environmental standards, quality assurance and the implementation of sustainable cultivation methods.

The work highlights the experience of the company "Lavender Province" in using essential oil plants to create products in the field of pharmacy, cosmetology and health. The main aspects of the research are the use of environmentally friendly raw materials, modern distillation technologies and the development of innovative solid cosmetics.

The results showed that essential oils and hydrolates from lavender, sage and other plants have high biological activity. The company also developed solid shampoos, creams, shower gels and hair balms, which are distinguished by their effectiveness, natural composition and environmentally friendly packaging.

### Introduction

Plant raw materials have always been the basis for the creation of medicines and dietary supplements, thanks to their rich composition of biologically active substances. Lavender, sage and other essential oil plants are known for their antiseptic, anti-inflammatory, antioxidant and soothing properties. In modern conditions, the ecological purity of products, compliance with quality standards and the use of sustainable cultivation methods are of particular importance.

The experience of the company "Lavender Province" is an example of the successful implementation of ecological approaches and innovations in the field of growing essential oil plants and creating products for pharmacy, cosmetology and health.

## **Materials and methods**

### *Raw materials*

The study was conducted on the basis of ecologically clean plants grown on specialized plantations. Lavender, sage, lofant and wild herbs were used. The company provides control over the growing process, adhering to organic cultivation methods without the use of chemical fertilizers or pesticides.

### *Processing technologies*

To obtain essential oils and hydrolates, modern distillation equipment was used, which allows preserving the valuable components of plant raw materials. The technological process includes:

1. Collection of plants in the phase of maximum biological activity.
2. Processing of raw materials by steam distillation.
3. Separation of essential oils and obtaining hydrolates.

### *Composition studies*

Physico-chemical and organoleptic studies were conducted to determine the content of essential oils, their purity and activity. In addition, the antibacterial and antioxidant properties of essential oils were studied for potential use in medicines.

## **Results and discussion**

### *Biologically active properties of the product*

In addition to the production of hydrolates and essential oils, the company "Lavender Province" has developed a line of solid cosmetics that meet modern environmental and functional requirements:

Solid shampoo. Due to the content of natural essential oils and plant extracts, solid shampoo provides cleansing of the scalp, strengthens hair and helps restore its structure. This product does not contain synthetic components, which makes it safe for regular use.

2. Solid shower gel. The unique formula allows you to maintain skin moisture, giving it freshness and elasticity. Thanks to lavender essential oils, the gel has a soothing effect and is suitable for sensitive skin.

3. Solid cream. Created on the basis of lavender macerate, the cream has an intensive nourishing effect, helps restore the hydrolipid balance of the skin and promotes its regeneration. The product is suitable for dry and irritated skin, giving it softness and smoothness.

4. Hair balm. Enriched with extracts of lavender, sage and other essential oil plants, the balm helps restore hair after damage, gives it shine and makes it easier to comb. The natural composition makes this product effective and safe for different hair types.

### *Environmental benefits*

Solid cosmetics not only have beneficial properties, but also have environmental benefits. They are created without the use of liquid packaging, which significantly reduces plastic pollution. Packaging from biodegradable wax napkins emphasizes the company's commitment to environmental protection.

### *Prospects for use*

Solid hair and skin care products are particularly promising for the pharmaceutical industry due to their natural composition and high concentration of active ingredients. These products can be recommended for sensitive skin, people with allergic reactions or as part of preventive and health programs.

## **Conclusions**

The development of solid cosmetics has allowed the company "Lavender Province" to expand the range of products aimed at health and care. Thanks to the use of natural ingredients and ecological packaging, these products meet the modern demands of consumers focused on quality, safety and environmental friendliness.



## INNOVATIVE APPROACHES IN CREATING NATURAL COSMETICS: THE EXPERIENCE OF THE COMPANY "ZELENHA"

*Paientko V.V.<sup>1,3</sup>, Kurinna N.<sup>2</sup>, Matkovsky A.K.<sup>1</sup>, Wiśniewska M.<sup>3</sup>,  
Gładysz- Płaska A.<sup>3</sup>, Tkachuk O<sup>4</sup>*

<sup>1</sup>Chuiko Institute of Surface Chemistry, NAS of Ukraine, Ukraine,

<sup>2</sup>Sole Entrepreneur Kurinna Natalia, Ukraine,

<sup>3</sup>Maria Curie-Skłodowska University, Lublin, Poland,

<sup>4</sup>Apteka Curate calodobowa, Lublin, Poland, [olenatkachuk212@gmail.com](mailto:olenatkachuk212@gmail.com)

**Keywords:** natural cosmetics, nanoamber, ecological packaging, innovations in cosmetology, social responsibility.

### Introduction

The company "Zelenaha" specializes in the production of natural care cosmetics, combining natural ingredients, innovative technologies and an ecological approach. The product range includes soap "from scratch", solid shampoos, natural deodorants, toothpaste, as well as infusions and macerates from forest plants. The company actively cooperates with scientific institutions, developing unique formulas using modern technologies, such as nanoamber.

The company's goal is to create effective, natural and ecological products that meet modern standards of quality and environmental friendliness.

### Materials and methods

Main product components

Cedar and pine resin:

All products contain resin as a powerful natural component with anti-inflammatory and regenerative properties.

Amber powder and amber-based composites:

Used for hair, nail and skin care, promoting strengthening and restoration.

Infusions and macerates:

Enrich products with natural active substances.

Ecological surfactants:

Created on the basis of sunflower oil, gently cleanse without harming the environment.

Production technologies

Nanoamber and amber composites:

Developed jointly with UMCS. Ensure deep penetration of active substances and controlled release.

Mixing and pressing methods:

Used to create solid shampoos, soaps and creams with improved properties.

### Results and Discussion

Biological activity and effectiveness

Products of the company "Zelenaha" demonstrate high efficiency due to the use of natural components and innovative technologies:

#### *Solid shampoos*

The use of amber powder and cedar resin provides a comprehensive effect: strengthening hair, improving its structure and restoring natural shine. The use of amber-based composites promotes deep penetration of active substances into the hair.

#### *Nail oils*

The combination of amber composites and cedar resin improves the structure of nails, helps strengthen them, stimulates growth and provides intensive nutrition of the cuticle. The effect of long-term use of the oil is confirmed by positive user reviews.

#### *Soap with healing properties*

Thanks to activated carbon and resin, the soap deeply cleanses the skin, reduces inflammation and has an antiseptic effect. It is suitable even for sensitive skin, which is confirmed by consumers with allergic reactions.

#### *Face and body creams*

The use of nanoamber in creams increases their moisturizing ability, restores skin elasticity and gives it a healthy appearance. Controlled release of active substances provides a long-lasting effect.

#### *Ecological approach*

The company pays special attention to the environmental friendliness of its products:

#### *Biodegradable packaging*

For solid shampoos and soaps, kraft paper is used, which reduces dependence on plastic.

#### *Solid formats*

They reduce the amount of water in the product, which reduces energy costs during transportation.

#### *Scientific achievements and cooperation*

Joint work with Chuiko Institute of Surface Chemistry of the National Academy of Sciences of Ukraine, allowed the creation of innovative technologies:

Nanoamber as a powerful transport of active substances.

Development of effective formulas using activated carbon for deep skin cleansing.

The Marie Curie-Skłodowska University contributed to the improvement of controlled release of active substances, in particular in products with amber composites. Within the framework of the cooperation, formulas for shampoos, creams and nail oils were created, which received high marks in testing.

#### *Challenges and prospects*

Maintaining the availability of products against the background of increasing costs of natural raw materials.

The need to expand the sales market outside of Ukraine.

Further improvement of formulas using nanotechnology.

Development of new types of ecological packaging.

Increasing the share of exports to Europe due to high product quality.

#### *Social activity*

The company not only creates unique cosmetics, but also actively contributes to the development of society. Involving veterans and supporting their families demonstrates social responsibility. Charitable initiatives, including assistance to the Armed Forces of Ukraine, emphasize the company's role in restoring the country's economy.

#### **Conclusions**

The effectiveness of the products is confirmed by the results of scientific research and user reviews. The unique combination of amber composites and resin provides long-term care and restoration of hair, nails and skin.

Environmental friendliness is realized through the use of biodegradable materials and solid product formats.

Scientific cooperation contributes to the creation of innovative formulas with high competitiveness in the international market.

Social responsibility strengthens the company's reputation, shaping it as an ethical manufacturer and an active participant in public life.

The experience of the company "Zelenakha" is an example of how nature, science and environmental friendliness can effectively combine to create modern cosmetics.

## **“GREEN” NANOPARTICLES OF METALS AND NONMETALS IN ANIMAL AND POULTRY FEEDING**

*Tsekhmistrenko S.I., Polishchuk V.M., Rol N.V., Polishchuk S.A.*

Bila Tserkva National Agrarian University, [Svetlana.tsehmistrenko@gmail.com](mailto:Svetlana.tsehmistrenko@gmail.com)

Modern veterinary medicine and animal husbandry actively integrate nanotechnology to increase the bioavailability of nutrients, optimise metabolism and modulate the immune response of organisms. One of the most promising areas of research is the use of green metal and non-metal nanoparticles synthesised using biological methods involving plant extracts, microorganisms and enzymatic systems. ‘Green synthesis is based on the use of natural biological agents that act as reducing agents and stabilisers of nanoparticles, reducing the need for toxic chemicals. Plant extracts contain a wide range of bioactive compounds, such as flavonoids, phenolic acids, alkaloids, which contribute to the formation of nanoparticles with a given size and morphology. Microorganisms, including bacteria and fungi, play a dual role - they both reduce metal ions and provide a shell of protein and polysaccharide matrices that increase the stability and bioavailability of nanoparticles. The enzymatic systems used in biosynthesis act as catalysts for oxidation-reduction reactions, which allows the formation of nanostructures with precise crystal structure and high functionality. Thanks to these mechanisms, green synthesis provides an environmentally friendly and energy-efficient approach to creating nanoparticles with improved biological properties. These nanomaterials have unique physicochemical and biological characteristics that make them promising agents for innovative feed additives. They have low toxicity, high stability and the ability to control the bioavailability of key elements in animal metabolic processes [5].

The process of biosynthesis of green nanoparticles is based on the use of natural reducing agents, such as flavonoids, terpene compounds, phenolic acids contained in plant extracts, and metabolites of bacterial cultures. For example, silver nanoparticles (AgNPs) demonstrate pronounced antimicrobial properties by disrupting the cell membrane structure of pathogens and inhibiting their enzymatic activity [3]. They also affect cell signalling pathways, inhibiting the growth and proliferation of bacteria and fungal pathogens. Zinc nanoparticles (ZnO NPs) help to improve the absorption of nutrients, participate in the regulation of intestinal microflora activity, and also have an antioxidant effect, contributing to the normalisation of intestinal mucosal functions [4].

Copper nanoparticles (CuNPs) are capable of catalysing redox reactions, positively affecting the metabolism of proteins and lipids. Studies have shown that their addition to feed improves growth and reduces inflammation in animals. Of particular interest are selenium nanoparticles (SeNPs), as they act as effective bioregulators of the body's antioxidant status, participate in the synthesis of selenium proteins and ensure the stability of the endocrine system, in particular by activating thyroid hormones. Silicon nanoparticles (SiO<sub>2</sub> NPs) help strengthen bone tissue by participating in osteocyte mineralisation and regulating calcium and phosphorus metabolism.

The integration of green nanoparticles into the animal feeding system not only improves productivity but also increases resistance to pathogenic agents by modulating the immune system. It has been found that the addition of AgNPs, ZnONPs, CrO<sub>2</sub>NPs and SeNPs to feeds increases the expression of antioxidant enzymes (superoxide dismutase, catalase, glutathione peroxidase), which provides effective protection against oxidative stress [1, 7]. In addition, the use of nanomaterials can reduce the need for antibiotics, which is especially important in the context of the global fight against antimicrobial resistance. Research also suggests that nanoparticles can act as prebiotics, stimulating the growth of beneficial intestinal microflora [9].

Our studies have confirmed that the addition of selenium nanoparticles (SeNPs) to the feed of broiler chickens and quail has a positive effect on their growth, development and immune status [8]. An increase in the level of antioxidant defence was observed due to an increase in the activity of antioxidant system enzymes and a decrease in oxidative stress. In addition, the use of SeNPs contributed to the improvement of morphological parameters of the small intestine, indicating improved absorption of nutrients. An increase in the level of selenium proteins in the blood of

broilers indicated an optimisation of metabolic processes and a strengthening of the body's immune response. An improvement in survival rate was recorded in quail, which may be due to increased resistance to infectious agents. These results underline the effectiveness of SeNPs in poultry feeding as a means of increasing productivity and promoting health [2].

In terms of environmental safety, green nanoparticles are significantly superior to their chemically synthesised counterparts, as they decompose faster in the biological environment without the formation of toxic by-products. An important task remains to determine the optimal dosage, biodegradation mechanisms and impact on the body's functional systems during long-term use. In addition, it is necessary to investigate the possible long-term effects of their accumulation in animal tissues, the impact on reproductive function and their potential to increase resistance to environmental stress [6].

Thus, the use of 'green' metal and non-metal nanoparticles in animal and poultry feeding is an innovative strategy with significant potential in veterinary medicine and the agricultural sector. Given their multifunctionality, safety and high efficiency, further research in this area could help create new biotechnological products that will ensure sustainable livestock production. Given the current trends, it is worth considering the possibility of combining nanoparticles with other biologically active agents to obtain complex preparations that combine the properties of antioxidants, antimicrobial agents and modulators of intestinal microflora.

1. Цехмістренко О. С., Цехмістренко С. І., Бітюцький В. С., Мельниченко О. М., Олешко О. А. Біоміметична та антиоксидантна активність нанокрісталічного діоксиду церію. *Мир медицини и биологии*. – 2018. - (1 (63)). - 196-201.

2. Цехмістренко С.І., Бітюцький В.С., Цехмістренко О.С., Демченко О.А., Тимошок Н.О., Мельниченко О.М. Екологічні біотехнології “зеленого” синтезу наночастинок металів, оксидів металів, металоїдів та їх використання: за редакцією С.І. Цехмістренко. Біла Церква.- 2022. - 270.

3. Demchenko A., Bityutskii V., Tsekhmistrenko S., Tsekhmistrenko O., Kharchyshyn, V. Synthesis of functionalized selenium nanoparticles with the participation of flavonoids. *International Science Group*. – 2022. - ISG-KONF. COM.

4. Fatima A., Zaheer T., Pal K., Abbas R. Z., Akhtar T., Ali S., Mahmood M. S. Zinc oxide nanoparticles significant role in poultry and novel toxicological mechanisms // *Biological Trace Element Research*. - 2022. - (1). - 268-290.

5. Frippiat T., Art T. Silver Nanoparticles as Antimicrobial Agents in Veterinary Medicine: Current Applications and Future Perspectives. *Nanomaterials* - 2025. - 15(3), 202.

6. Nechitailo K. S., Sizova E. A., Lebedev S. V., Miroshnikov S. A., Ryazantseva K. V., Yausheva, E. V., Fisinin V. I. Modern approaches to the use of ultrafine and nanoparticles as components of feed additives in poultry farming. *World's Poultry Science Journal*. – 2025. - 1-40.

7. Tsekhmistrenko O. S., Bityutskyy V. S., Tsekhmistrenko S. I., Spivak M. Y. Influence of cerium dioxide nanoparticles on biochemical indicators in the organism of broiler chicken. *Veterinary science, technologies of animal husbandry and nature management* – 2025. – 6-112-117.

8. Tsekhmistrenko S. I., Bityutskyy V. S., Tsekhmistrenko O. S., Kharchishin V. M., Tymoshok N. O., Demchenko A. A., Tokarchuk T. S. Ecological and toxicological characteristics of selenium nanocompounds. *Ukrainian Journal of Ecology*. - 2021. - 11(3). - 199-204.

9. Tsekhmistrenko S. C., Bityutskyy V., Tsekhmistrenko O., Merzlo S., Tymoshok N., Melnichenko A., Yakymenko I. Bionanotechnologies: synthesis of metals' nanoparticles with using plants and their applications in the food industry: A review. *The Journal of Microbiology, Biotechnology and Food Sciences*. – 2021. - 10(6). - e1513.

# РОЗРОБКА ЕКСТРАКЦІЙНО-СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНОГО МЕТОДУ КІЛЬКІСНОГО ВИЗНАЧЕННЯ СЕРТРАЛІНУ ЗА РЕАКЦІЄЮ З НОВИМ АЗОБАРВНИКОМ – ПОХІДНИМ ТЕОФІЛІДИНУ

Баяурка С.В.<sup>1</sup>, Карпушина С.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Національний фармацевтичний університет, [serhii.baiurka@gmail.com](mailto:serhii.baiurka@gmail.com)

<sup>2</sup>Уманський національний університет садівництва

Сертралін (1*S*,4*S*)-4-(3,4-Дихлорфеніл)-1,2,3,4-тетрагідро-*N*-метил-1-нафталенамін – сучасний препарат антидепресивної дії, який широко використовується в медичній практиці для фармакокорекції важких депресивних захворювань. За певних умов сертралін здатний проявляти серйозні побічні ефекти [1]. В літературі описано чисельні випадки гострих та летальних отруєнь сертраліном [2], при цьому рівень смертельних концентрацій препарату в артеріальній крові знаходились в межах 0,1-8,3 мг/л [3]. Метою дослідження була розробка та валідація методики кількісного визначення сертраліну з використанням непрямої екстракційної спектрофотометрії, придатної для використання при хіміко-токсикологічних дослідженнях.

Матеріали і методи. Для побудови калібрувального графіку готували стандартний розчин препарату (300 мкг/мл). Як реагент використовували 0,1% розчин водний розчин азобарвника, отриманого на основі теофілідину, який раніше використовувався для кількісного визначення лікарських речовин основного характеру, що належали до різних фармакологічних груп. З сертраліном вказаний азобарвник утворював іонні асоціати, забарвлені в жовтий колір, які максимально екстрагувались хлороформом при рН 3,0. Для збільшення чутливості методики кількісного визначення отримані іонні асоціати в хлороформі руйнували додаванням 0,1% розчину купрум (II) сульфату в середовищі ацетатного буферного розчину з рН 6,0. При цьому водний шар набував інтенсивного червоного забарвлення. Обране значення величини рН ацетатного буферного розчину відповідало максимуму комплексоутворення. Світлопоглинання вимірювали на спектрофотометрі СФ-46 (довжина хвилі 540 нм, товщина кювети 10 мм). Вимірювання проводили на фоні «холостого» досліджу.

Результати та їх обговорення. Калібрувальний графік описувався рівнянням:  $y = (0,00321 \pm 1,2 \cdot 10^{-5}) \cdot x$ ; лінійність 30,0–300,0 мкг/мл; *LOD* та *LOQ* становили, відповідно, 10,2 мкг та 16,7 мкг в пробі. Правильність та прецизійність (*intra-day*) складала 100,9% (RSD=2,1%) в області низьких концентрацій аналіту, 100,6% (RSD=2,2%) в області середніх концентрацій, 99,2% (RSD=1,7%) в області високих концентрацій, що відповідає вимогам до методів, які використовуються при хіміко-токсикологічних дослідженнях.

Висновки. Розроблено чутливу та достатньо селективну методику кількісного визначення сертраліну методом непрямої екстракційної спектрофотометрії на основі реакції з новим азобарвником – 4-(4'-метиламіно-5'-метилкарбамоїл-2'-імідазолазо) бензолсульфофосфатом.

1. Duignan K.M., Quinn A.M., Matson A.M. Serotonin syndrome from sertraline monotherapy. – *American Journal of Emergency Medicine*. – 2020. – Vol. 38, No 8. – P. 1695.e5-1695.e6.

2. Moffat A.C., Osselton M.D., Widdop B. Clarke's analysis of drugs and poisons in pharmaceuticals, body fluids and postmortem material: 4-th ed. – London, Chicago: Pharmaceutical Press, 2011. – 2736 p.

3. Amundsen I., Oiestad A.M., Ekeberg D., Kristoffersen L. Quantitative determination of fifteen basic pharmaceuticals in ante- and post-mortem whole blood by high pH mobile phase reversed phase ultra-high performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry. – *Journal of Chromatography B, Analytical Technologies in the Biomedical Life Science*. – 2013. – Vol. 927, No 1. – P. 112-123.

## ПОШУК БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ СПОЛУК В РЯДІ КАРБОНІЛВМІСНИХ 1,2,4-ТРИАЗОЛІВ

*Борисенко Н.М.<sup>1</sup>, Губенко І.Я.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Черкаська медична академія, Україна, [borisenkonm1975@ukr.net](mailto:borisenkonm1975@ukr.net)

Дослідження хімії п'яти та шестичленних азотовмісних гетероциклів є одним із найрозвинутіших напрямків сучасної хімії гетероциклічних сполук, оскільки ці сполуки мають унікальні властивості та значну практичну цінність. Особливу увагу привертають 1,2,4-триазоли та їх S-похідні. Протягом останніх десятиліть ці гетероцикли залишаються об'єктом інтенсивних досліджень як для синтетичних хіміків, так і для вчених, які займаються пошуком нових біологічно активних речовин, що можуть діяти в широкому спектрі, а також для синтезу оптичних матеріалів, фотосенсибілізаторів, барвників, антиоксидантів, присадок для вуглеводневих палив і мастил, інгібіторів корозії тощо. Огляд літератури дозволяє зробити висновок, що практична цінність таких гетероциклів залежить не тільки від природи замісників у гетероциклічному кільці, але й від залишків, що містять атом Сульфуру. Це створює інтерес до введення в ці гетероцикли карбонільних фрагментів, оскільки такі структури демонструють високі фармакологічні властивості. Прогнозуючи біологічну активність карбонільних похідних, з'ясовано, що ймовірність прояву фармакологічної активності у цих сполук становить до 70%. Поєднання таких фрагментів дає перспективу синтезу нових біологічно активних речовин і сполук з різноманітними практичними застосуваннями. Серед похідних 1,2,4-триазолу у сучасній медицині використовуються малотоксичні препарати з протигрибковою, антидепресивною, гепатопротекторною та іншими видами активності. Особливий інтерес становлять похідні, що містять кетонів залишки. Таким чином, цілеспрямований пошук та синтез нових біологічно активних сполук на основі карбонільних похідних 1,2,4-триазолу, а також вивчення зв'язку між їх хімічною структурою та біологічною активністю є актуальними та перспективними напрямками для наукових і практичних досліджень. Розширюючи арсенал нових потенційних біологічно активних субстанцій була вивчена дія  $\alpha$ -галогенкетонів на відповідні тіоли. Встановлено [1], що при нагріванні відповідних тіолів з  $\alpha$ -галогенкетонами в етанолі в присутності лугів утворюються відповідні арилетанони. Синтез арилетанонів проведено за методикою описаною в дисертації [2]. Як і в попередніх випадках, ймовірно, що реакція тіолів з  $\alpha$ -галогенкетонами проходить за атомом Сульфуру. Будова синтезованих сполук підтверджена за допомогою фізико-хімічних методів аналізу (елементним аналізом, УФ-, ІЧ-спектроскопією, ПМР-, мас-спектрометрією, рентгеноструктурним аналізом, а їх індивідуальність – хроматографічно [3-5]. В ІЧ-спектрах цих сполук є чіткі смуги коливання СО-груп в межах  $1680-1702\text{ см}^{-1}$ , груп CN- в межах  $1640-1600\text{ см}^{-1}$  та смуг коливання NH-груп в межах  $3300-3500\text{ см}^{-1}$ . Крім того, є чіткі смуги коливання ароматичного кільця близько  $3021-2999\text{ см}^{-1}$ , а також чіткі смуги коливання метиленових та метильних замісників при  $1250-1175\text{ см}^{-1}$  і  $2950-2900\text{ см}^{-1}$  відповідно. Крім того, були досліджені ПМР-спектри арилетанонів. Так в ПМР-спектрі наявні чіткі сигнали протонів метильної групи ядра 1,2,4-триазолу (3.72 м.ч.), метиленової групи, зв'язаної з атомом Сульфуру (4.92 м. ч.), а також сигнали протонів фуранового циклу (7.93; 7.05; 6.72 м.ч.) відповідно.  $^1\text{H}$  ПМР-спектр сполуки характеризується хімічними зсувами синглетів трьох протонів метильної групи при 3.72 ppm, двопротонним синглетом метиленової групи при 4.92 ppm, триплетом та дублетами протонів фуранового ядру при 6.72 ppm, 7.93 ppm; 7.05 ppm відповідно. У мас-спектрі зареєстровано пік  $\text{M}^+$  з  $m/z$  389. Фрагментація сполуки проходить з утворенням трьох іонів з  $m/z$  68,  $m/z$  97,  $m/z$  227.



Отже, хімія азотовмісних гетероциклів, особливо 1,2,4-триазолів та їх S-похідних, є надзвичайно актуальною галуззю органічної хімії. Ці сполуки мають широкий спектр застосування у різних галузях, включаючи фармацію, агрохімію, матеріалознавство та інші. 1,2,4-Триазоли та їх S-похідні мають унікальні властивості, які зумовлюють їх біологічну активність та інші корисні властивості. Хімія 1,2,4-триазолів та їх S-похідних активно розвивається, і постійно з'являються нові дані про їх властивості та застосування. Подальші дослідження в цій області є перспективними для розробки нових лікарських засобів, пестицидів, матеріалів та інших продуктів з покращеними властивостями.

1. Bihdan O.A. Syntez, khimichna modyfikatsiya ta biolohichni vlastyivosti 3-,4-,5-tryzamishchenykh-1,2,4-triazol-3-tioniv (Dis. dokt. farm. nauk) [Synthesis, chemical modification and biological properties 3-, 4-, 5-three substituted-1,2,4-triazole-3-thiones Doctoral dissertation]. Zaporizhzhia State Medical University, Zaporizhzhia. - 2023.

2. Karpenko Y., Hunchak Y., Gutyj B., Hunchak A., Parchenko M., Parchenko V. Advanced research for physico-chemical properties and parameters of toxicity piperazinium 2-((5-(furan-2-YL)-4-phenyl-4H-1, 2, 4-triazol-3-YL) THIO) acetate. *ScienceRise: Pharmaceutical Science*. – 2022. - 2(36) - 18-25.

3. Gotsulia A. S., Zazharskyi V. V., Davydenko P. O. Synthesis and antituberculosis activity of N'-(2-(5-((theophylline-7'-yl)methyl)-4-R-4H-1,2,4-triazole-3-ylthio)acetyl)isonicotinohydrazide // *Запорізький медичний журнал*. - 2018. № 4 (109). - С. 578-583.

4. Karpun Y. O., Karpenko Y. V., Parchenko M. V., Bihdan O.A. Molecular docking and bioavailability of S-alkyl derivatives 5-(3-fluorophenyl)-, 5-(5-bromofuran-2-yl)- and-(((3-(pyridin-4-yl)-1H-1,2,4-triazole-5-yl))thio)methyl)-4-methyl-4H-1,2,4-triazolein silico methods. *Current Issues in Pharmacy and Medicine: Science and Practice*. – 2020. - 13(1).

5. Shcherbyna R.O. (2021). Spryamovanyy syntez, vyvchennya fizyko-khimichnykh ta biolohichnykh vlastyivostey novykh pokhidnykh 4-R-5-(morfolinometyl)-3-tio-1,2,4-tryazoliv [Directed synthesis, study of physico-chemical and biological properties of new derivatives of 4-R-5-(morpholinomethyl)-3-thio-1,2,4-triazoles]: dysertatsiya na zdob. stup. dokt. farm. n. Zaporizhzhya: ZDMU. - 494.

## ОЦІНКА ВЗАЄМОДІЇ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ, ЩО ЗДІЙСНЮЄТЬСЯ ЗА УЧАСТЮ ФЕРМЕНТІВ ЦИТОХРОМУ P450

*Валіводзь І.П., Ларіонов В.Б., Головенко М.Я.*

Фізико-хімічний інститут ім. О. В. Богатського НАН України, [valivodzirina@gmail.com](mailto:valivodzirina@gmail.com)

Взаємодія лікарських засобів (ВЛЗ) — це процес, у якому одночасне застосування кількох препаратів змінює фармакологічну дію кожного з них. З терапевтичної точки зору взаємодії поділяють на корисні, які сприяють посиленню ефектів лікування або зменшенню побічних реакцій, та шкідливі, які можуть спричинити небажані наслідки. У клінічній практиці часто використовують комбінації ліків з різними механізмами дії, що дозволяє досягти бажаного терапевтичного результату при невисоких дозах окремих препаратів та знизити ймовірність побічних ефектів. Цей підхід застосовується при лікуванні захворювань, таких як артеріальна гіпертензія, серцева недостатність, бронхіальна астма тощо.

У клінічній фармакології взаємодії лікарських засобів поділяються на фармацевтичні, фармакодинамічні та фармакокінетичні. Більшість значущих фармакокінетичних взаємодій відбувається під час метаболізму препаратів у печінці, за участю мікросомних ферментів, які містять цитохром P-450 (CYP). Це призводить до інактивації лікарських засобів і їх виведення з організму у вигляді водорозчинних метаболітів через нирки або через шлунково-кишковий тракт (ШКТ) у вигляді кон'югатів. Іноді метаболізм може збільшити активність препарату через утворення активних метаболітів або при застосуванні проліків.

Активність СYP може змінюватися під впливом різних препаратів. Препарати, що стимулюють активність цих ферментів, називають індукторами, і вони, як правило, знижують ефективність взаємодіючих ліків. Інгібітори метаболізму, знижуючи активність ферментів, можуть збільшити ризик токсичних реакцій через накопичення препаратів в організмі.

Проблема взаємодій на етапі метаболізму вивчається за участю ізоферментів СYP, серед яких найбільш важливими є: СYP1A2, СYP2B6, СYP2D6, СYP2C9, СYP2C19, СYP2E1, СYP3A4. Для кожного з цих ізоферментів детально описано їх структуру та властивості субстратів, інгібіторів та індукторів. Знання цих характеристик дає змогу точніше прогнозувати можливі результати взаємодії лікарських засобів під час метаболізму. При цьому слід враховувати, що ізоферменти СYP можуть мати перехресну специфічність до субстратів, інгібіторів та індукторів. За результатами досліджень, з 110 популярних лікарських засобів 66% метаболізуються за допомогою одного або кількох ізоферментів СYP: 44% — СYP3A4, 41% — СYP2D6, 26% — СYP2C19, 9% — СYP1A2 та 4% — СYP2C9. Тому на етапі розробки лікарських засобів важливо враховувати ці ізоформи для рутинної оцінки потенційних взаємодій.

Ферментативна активність ізоформ СYP має вирішальне значення в ефективності та безпечності лікарського засобу, залежного від його метаболізму. Більшість ліків піддається дезактивації СYP, але деякі речовини біоактивуються СYP з утворенням фармакологічно активних сполук. Також низка препаратів можуть підвищувати або знижувати активність різних СYP завдяки здатності зв'язуватися з ними. Тому важливим є визначення взаємодії новаторського препарату з найбільш клінічно значущими ізоферментами СYP.

Успішно проводяться клінічні випробування інноваційного анальгетичного засобу пропоксазепам, який розроблено сумісно Фізико-хімічним інститутом ім. О.В. Богатського НАН України та ТДВ «ІнтерХім». Основною мішенню для знеболення сполуки є  $\alpha 2$  і  $\alpha 3$  субодиниці рецепторів ГАМК [1] та інші біологічні мішені, які відповідають за перебіг болювого синдрому: гліцинові рецептори, потенціалзалежні калієві канали, дофамінергічна система, NMDA-рецептори, альфа-1 адренорецептори [2, 3]. Сполука має фармакодинамічний профіль, відмінний від усіх анальгетиків, оскільки одночасно гальмує і гострий, і хронічний біль з компонентами протизапальної та протисудомної дії [3]. За технологічними й терапевтичними показниками пропоксазепам є інноваційним засобом [4].

Новий препарат повинен не лише виявляти відповідну фармакологічну дію і бути достатньо безпечним, але й мінімізувати ризик взаємодії з іншими лікарськими засобами (ВЛЗ), яка може серйозно вплинути на ефективність препаратів, що одночасно вводяться. Причина більшості ВЛЗ пов'язана з ферментами цитохрому P450 (СYP), які відіграють важливу роль у метаболізмі значної кількості ксенобіотиків, у тому числі й лікарських засобів [5, 6]. На сьогодні у людей ідентифіковано 57 генів СYP, однак переважна більшість відомих препаратів метаболізуються лише декількома ізоформами СYP: 1A2, 2B6, 2C9, 2C19, 2D6 та 3A4 [7]. Основними причинами ВЛЗ, спричиненими лікарськими засобами, які метаболізуються СYP, є інгібування (70 %) або індукція СYP (23 %), що може призвести до небажаних побічних ефектів, пов'язаних з підвищенням або зниженням їх концентрації в плазмі, а отже, і послаблення ефективності лікування. Тому більшість фармацевтичних компаній проводять скринінгові тести для нових препаратів, щоб уникнути або послабити можливі ВЛЗ. Для цього застосовують методи *in vitro* з використанням мікросом або гепатоцитів печінки людини. Проте вони є громіздкими і мають обмежене застосування у вивченні співвідношення структура—активність (інгібування або індукції СYP). Навпаки, підходи *in silico* є привабливими з огляду на їх низьку вартість і можливість оцінювати за їх допомогою значну кількість сполук та використовувати на ранніх етапах розроблення препарату. Оцінка потенціалу нового анальгетичного засобу пропоксазепаму щодо пригнічення або активації СYP залишається важливою частиною програми його відкриття та розроблення [8]. Ця робота є першим звітом про використання моделювання

in silico для про-гнозування та пояснення можливої взаємодії пропоксазепаму з ізоензимами CYP на моле-кулярному рівні, що й становило мету дослідження.

Так, для пропоксазепаму для ізоформ 2B6, 2C9, 2D6 та 3A4 це значення перевищує 50 % загальної енергії зв'язку. Проте порівняно з відносним внеском у загальну енергію зв'язку із субстратом істотне пере-вищення спостерігається лише для 2C8 і помірне для 3A4 (з субстратом тестостероном). Відсотковий внесок у загальну енергію взаємодії референтних лігандів також досить різниться, що загалом вказує на те, що спільні амінокислотні залишки, хоч і беруть участь у орієнтації та фіксації цих сполук в активному центрі, але все ж значний внесок визначають й окремі амінокислотні залишки, що є специфічними для кожної з досліджуваних сполук. Тож з урахуванням відносного внеску енергій взаємодії із спільними амінокислотними залишками у загальну енергію взаємодії ймовірно є конкуренція між пропоксазепамом і відповідними субстратами у разі ізоформ 2B6, 2C8 та 3A4 (у реакції 6 $\beta$ -гідроксилювання тестостерону). Крім того, слід враховувати, що у формуванні міжмолекулярних зв'язків беруть участь також інші амінокислотні залишки, що є більш унікальними для кожного з ізоферментів та відповідного субстрату. Загалом аналіз взаємодій пропоксазепаму з різними ізоформами CYP з урахуванням їх індивідуальних субстратів дає підставу припустити можливість конкурентної взаємодії для 1A2, 2C19 та 2C8 і, меншою мірою, для 2C9, 3A4 та 2B6.

1. Reder A., Larionov V., Golovenko M. Subunit-dependent interaction of propoxazepam and its metabolite with the  $\gamma$ -aminobutyric acid type A receptor. *EUREKA: Health Sci.* 2022. - 5. - pp. 10-18.

2. Golovenko N. Ya., Larionov V. B., Reder A. S. & Valivodz, I. P. (2017). An effector analysis of the interaction of propoxazepam with antagonists of GABA and glycine receptors. *Neurochem. J.*, - 2017. - 11, No. 4. - pp. 302-308.

3. Voloshchuk N. I., Reder A. S., Golovenko M. Y., Taran I. V., Pashinska, O. S. Pharmacological analysis of neurochemical antinociceptive mechanisms of propoxazepam action. *Pharmacology and Drug Toxicology.* – 2020. - No. 1, pp. 3-11.

4. Pat. 119018 UA, IPC C07D 243/24, A61K 31/5513, A61P 25/04, The use of 7-brom-5-(o-chlorophenyl)-3-propoxy-1,2-dihydro-3H-1,4-benzodiazepine-2-one for inhibition of pain syndrome on diabethicpolyneuropathy without neurotoxic action, Reder, A. S., Andronati, S. A., Golovenko, M. Ya., Larionov, V. B. Voloshyuk, N. I., Publ. 10.04.2019.).

5. Pat. 11,304,956 B2 US, IPC A61K 31/5513, A61P 23/00, A61P 25/08, A61P 29/00, A61K 9/00, Use of 7-bromo-5-(o-chlorophenyl)-3-propoxy-1,2-dihydro-3H-1,4-benzodiazepin-2-one for inhibition of neuropathic pain and seizures of different etiology, Reder, A. S., Adronati, S. A., Golovenko, M. Ya., Pavlovski, V. I., Kabanova, T. A., Khalimova, O. I., Larionov, V. B. & Voloshchuk, N. I., Publ. 19.04.2022.

6. Wilkinson G. R. Drug metabolism and variability among patients in drug response. *N. Engl. J. Med.* – 2005. - 352. - pp.2211-2221.

7. Sim S. C. Ingelman-Sundberg, M. The Human Cytochrome P450 (CYP) Allele Nomenclature website: a peer-reviewed database of CYP variants and their associated effects. *Hum. Genomics.* – 2010. - 4, No. 4. - pp. 278-281.

8. Golovenko M. Ya. Propoxazepam is an innovative analgesic that inhibits acute and chronic pain and has polymodal mechanism of action. *Visn. Nac. Acad. Nauk Ukr.* – 2022. No. 4. - pp. 76-90.

# ВПЛИВ КАЛІКС[4]АРЕНІВ C-107 ТА C-1130 НА $\text{Na}^+, \text{K}^+$ -АТРа́зу ПЛАЗМАТИЧНОЇ МЕМБРАНИ ТА СКОРОТЛИВУ АКТИВНІСТЬ МІОМЕТРІЯ

*Веклич Т.О.<sup>1</sup>, Цимбалюк О.В.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Інститут біохімії ім. О.В. Палладіна НАН України, [veklich@biochem.kiev.ua](mailto:veklich@biochem.kiev.ua)

<sup>2</sup>Навчально-науковий інститут високих технологій Київського національного університету імені Тараса Шевченка

$\text{Na}^+, \text{K}^+$ -АТРа́за – електрогенна  $\text{Mg}^{2+}, \text{Na}^+, \text{K}^+$ -АТР-залежна транспортна система плазматичної мембрани (ПМ), яка здійснює активне перенесення одновалентних іонів  $\text{Na}$  і  $\text{K}$  і тим самим підтримує їх електрохімічні градієнти, які є необхідними для нормального функціонування клітини. Доведено, що у випадку деяких патологій відбувається зміна активності натрієвої помпи, зокрема, при діабеті та ішемії ця активність знижується [1-3]. Таким чином,  $\text{Na}^+, \text{K}^+$ -АТРа́за має велике значення для контролю скоротливої активності, зокрема гладеньких м'язів (ГМ). З огляду на вищезазначене перспективним є пошук сполуки, яка дозволяла б змінювати активність натрієвої помпи ПМ.

У цьому аспекті, зокрема, представляють інтерес каліксарени – макроциклічні сполуки, синтезовані шляхом циклоконденсації пара-заміщених фенолів і формальдегіду. Каліксарени вивчаються як молекулярні платформи для дизайну сполук, здатних впливати на протікання біохімічних процесів [4-6].

Наші попередні результати вказували на те, що калікс[4]арен C-1130 (а також калікс[4]арен C-107) здатні до інгібувальної дії на натрієву помпу ПМ. Метою роботи було вивчення закономірностей інгібіторного впливу зазначених калікс[4]аренів на натрієву помпу ПМ та скоротливу активність ГМ матки.

Каліксарен C-107 (5,17-ди(фосфоно-2-піридил-метил)аміно-11,23-ди-*трет*-бутил-26,28-дигідрокси-25,27-дипропоксикалікс[4]арен) та калікс[4]арен C-1130 (5,17-ди(фосфоно-2-піридилметил)аміно-11,23-ди-*трет*-бутил-26,28-дигідрокси-25,27-диоктилоксикалікс[4]арен) (рис. 1) були синтезовані та охарактеризовані із використанням методів ЯМР та інфрачервоної спектроскопії. Сполука була синтезована академіком НАН України В.І. Кальченком та його колегами (Інститут органічної хімії НАН України).

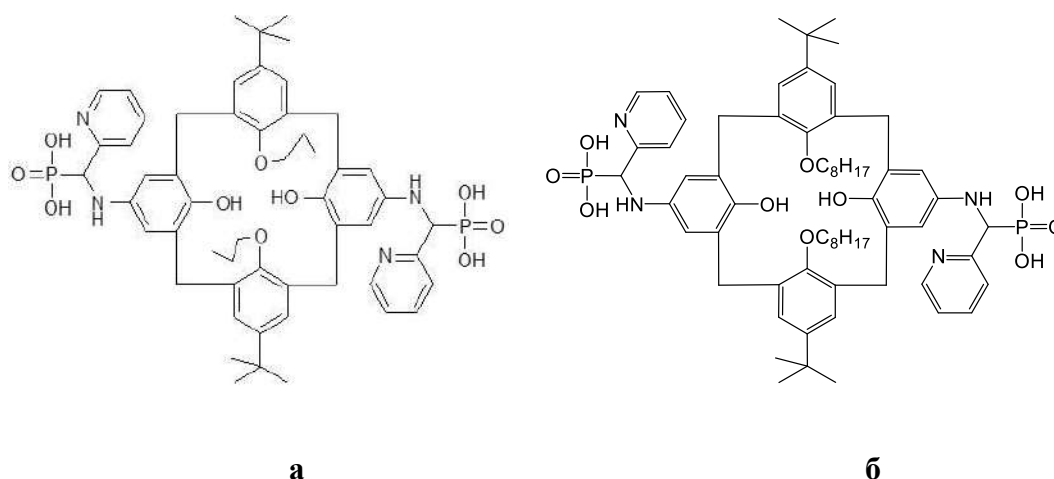


**Рис. 1.** Структурні формули калікс[4]арену C-107 (а) та калікс[4]арену C-1130 (б).

Ензиматичні дослідження були проведені у відділі біохімії м'язів Інституту біохімії ім. О.В. Палладіна НАН України (зав. відділом – академік НАН України С.О. Костерін).

Експерименти були виконані на фракції ПМ клітин міометрія, оброблених 0,1 % розчином дигітоніну, та препаратах поздовжніх ГМ рогів матки.

Фракцію ПМ виділяли з міометрія свині, як було описано раніше [7]. Вміст білка в мембранній фракції визначали методом М. Bredford [8]. АТРазну активність визначали у фракції ПМ при 37 °С у стандартному середовищі (об'єм – 0,4 мл), яке містило (мМ): 3 АТР, 3 MgCl<sub>2</sub>, 25 NaCl, 125 KCl, 1 ЕГТА, 20 Нерес-трис-буфер (pH 7,4), 1 NaN<sub>3</sub>, 1 убаїн, 0,1 мкМ тапсигаргін і 0,1 % дигітонін. “Убаїнчутливу” Na<sup>+</sup>,K<sup>+</sup>-АТРазну активність розраховували по різниці між величинами “загальної” АТРазної активності та “базальної” Mg<sup>2+</sup>-АТРазної активності. “Базальну” Mg<sup>2+</sup>-АТРазну активність визначали в тому ж середовищі, але в присутності 1 мМ убаїну. Кількість продукту реакції P<sub>i</sub> визначали за методом W. Rathbun et V. Betlach [9]. Встановлено, що для сарколеми міометрія свині питома ензиматична активність Na<sup>+</sup>,K<sup>+</sup>-АТРази ПМ складає 10,2 ± 0,7 мкмоль P<sub>i</sub>/мг протеїну за 1 год відповідно (M ± m; n = 7).

У попередніх дослідженнях ми показали, що макроциклічна сполука калікс[4]арен С-107 в концентрації 100 мкМ на 96 % відносно контролю інгібує активність Na<sup>+</sup>,K<sup>+</sup>-АТРази ПМ міоцитів матки (рис. 1). При цьому С-107 практично не впливає на “базальну” Mg<sup>2+</sup>-АТРазну активність (зменшення активності лише до 93 % від контрольного значення) та Mg<sup>2+</sup>-незалежну Ca<sup>2+</sup>-АТРазу (зменшення активності лише до 91 % від контрольного значення) (рис. 1). Поряд з цим, калікс[4]арен С-107 (100 мкМ) пригнічує ензиматичну активність Ca<sup>2+</sup>,Mg<sup>2+</sup>-АТРази ПМ на 19 % відносно контролю (рис. 2).

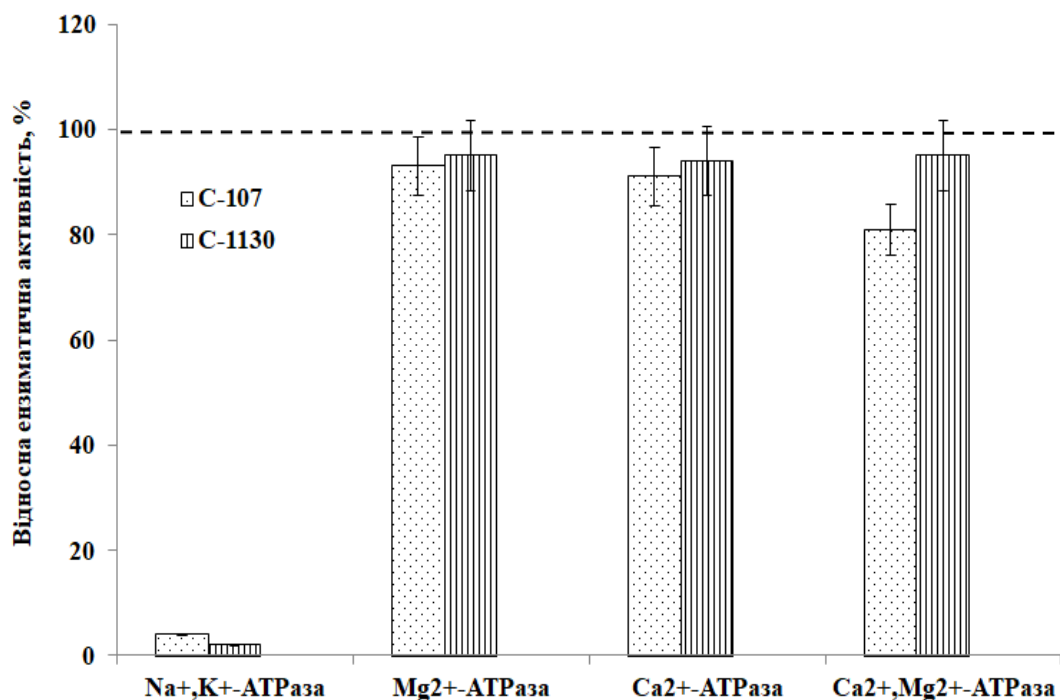


**Рис. 2.** Результати вивчення порівняльного впливу калікс[4]аренів С-107 та С-1130 (100 мкМ) на АТР-гідролазні активності в плазматичних мембранах клітин міометрія (M ± m; n = 5).

За 100 % прийнято значення питомих ензиматичних активностей у відсутності калікс[4]аренів у середовищі інкубації.

Тому в подальших експериментах, ми дослідили дію цілого ряду калікс[4]аренів (дані не наведені), структурних аналогів калікс[4]арену С-107, на Na<sup>+</sup>,K<sup>+</sup>-АТРазну активність ПМ, і з'ясували, що ще більшу інгібіторну ефективність та селективність, ніж калікс[4]арен С-107, має калікс[4]арен С-1130. Ми показали, що калікс[4]арен С-1130 в концентрації 100 мкМ ефективно пригнічує Na<sup>+</sup>,K<sup>+</sup>-АТРазну активність ПМ клітин міометрія до рівня 2,1 ± 0,6 % відносно контрольного значення (прийнятого за 100 %) (M ± m; n = 5) (рис. 2).

У той же час ця сполука, що була використана у такій ж самій концентрації, практично не впливала на ензиматичні активності “базальної”  $Mg^{2+}$ -АТРази,  $Ca^{2+}$ -АТРази і  $Ca^{2+}, Mg^{2+}$ -АТРази ПМ: відповідні активності становили  $95,2 \pm 0,7$ ;  $94,0 \pm 0,8$  і  $95,1 \pm 1,0$  % щодо контрольного значення ( $M \pm m$ ;  $n = 5$ ) (рис. 2). Таким чином, калікс[4]арен С-1130, використаний у концентрації 100 мкМ, ефективно інгібував активність  $Na^+, K^+$ -АТРази у фракції ПМ міоцитів матки. При цьому він майже не впливав на активність інших АТР-гідролаз ПМ. Отже, калікс[4]арен С-1130 селективно (на рівні ПМ) пригнічує активність  $Na^+, K^+$ -АТРази ПМ, не впливаючи на активності  $Mg^{2+}$ -АТРази,  $Ca^{2+}$ -АТРази і  $Ca^{2+}, Mg^{2+}$ -АТРази ПМ.

У наших подальших дослідженнях, ми вивчали концентраційну залежність інгібуючої дії калікс[4]аренів С-107 та С-1130 ( $10^{-8}$  –  $10^{-4}$  М) на активність  $Na^+, K^+$ -АТРази ПМ. Як видно з рис. 3, обидві сполуки дозозалежно пригнічують  $Na^+, K^+$ -АТРазну активність ПМ. Втім, калікс[4]арен С-1130 діє з більшою ефективністю ніж калікс[4]арен С-107. Розраховані величини коефіцієнта інгібування  $I_{0,5}$  складають  $59 \pm 6$  нМ та  $38 \pm 5$  нМ, значення коефіцієнта Хілла  $n_H$  становить  $0,51 \pm 0,05$  і  $0,42 \pm 0,03$  для калікс[4]аренів С-107 та С-1130 відповідно ( $n = 5$ ).

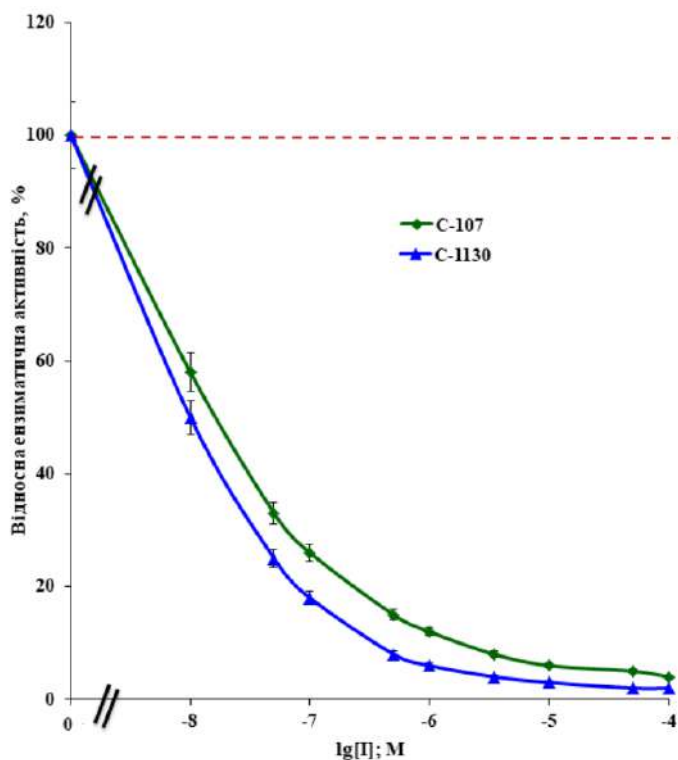


**Рис. 2.** Концентраційні залежності впливу калікс[4]аренів С-107 та С-1130 на ктивність  $Na^+, K^+$ -АТРази плазматичних мембран клітин міометрія ( $M \pm m$ ;  $n = 5$ ).

*За 100 % прийнято значення питомої ензиматичної активності у відсутності калікс[4]аренів у середовищі інкубації*

З одержаних результатів випливає, що досліджений калікс[4]арен С-1130 з високою ефективністю ( $I_{0,5} = 38 \pm 5$  нМ) пригнічує ензиматичну активність  $Na^+, K^+$ -АТРази ПМ, при цьому він не впливає на активності  $Mg^{2+}$ -АТРази,  $Ca^{2+}$ -АТРази і  $Ca^{2+}, Mg^{2+}$ -АТРази ПМ (рис. 2, 3).

Наші наступні дослідження стосувалися вивчення спонтанної скорочувальної активності мультиклітинних гладеньком'язових препаратів рогів матки невагітних щурів. Тензометричними дослідженнями продемонстровано, що С-1130 суттєво активує спонтанну скорочувальну активність міометрія щурів, зареєстровану в ізометричному та ізотонічному



режимах. За аплікації калікс[4]арену C-1130 у концентрації 10 мкМ спостерігалось суттєве збільшення амплітуди спонтанних скорочень (у середньому до  $183,7 \pm 6,8 \%$ ,  $n=5$ ,  $p<0.01$ ), тоді як їх частота була на рівні контролю (дані не наведені).

Комплексним механокінетичним аналізом встановлено, що цей калікс[4]арен змінює часові, силові, швидкісні параметри ізометричних та ізотонічних спонтанних скорочень. Також на тлі дії калікс[4]арену C-1130 суттєво та в однаковій мірі зростали параметри скорочення ( $\Delta L_C$  та  $\Delta L_R$ ): так, за дії C-1130 параметр скорочення, при якому має місце характеристичний час  $\tau_C$  фази скорочення ( $\Delta L_C$ ) у середньому становив  $198,3 \pm 10,2 \%$  ( $n=5$ ,  $p<0.01$ ) та параметр скорочення, при якому реєструється максимальна швидкість фази розслаблення ( $\Delta L_R$ ) становив у середньому  $182,1 \pm 6,6 \%$  ( $n=5$ ,  $p<0.01$ ).

Встановлено, що на тлі сполуки C-1130 показники часових параметрів мають тенденції до збільшення у середньому на третину щодо контрольних ( $\tau_0$ ,  $\tau_C$  і  $\tau_R$  у середньому становили  $139,0 \pm 9,9 \%$ ,  $130,1 \pm 8,7 \%$  та  $142,3 \pm 12,8 \%$  відповідно, у всіх випадках ( $n=5$ ,  $p>0.05$ ).

В умовах попередньої дії уабаїну сполука C-1130 не змінює жодного механокінетичного параметру спонтанних скорочень, що вказує на те, що цей калікс[4]арен лише блокує  $\text{Na}^+, \text{K}^+$ -АТРау плазматичної мембрани та не впливає на інші протеїни, які залучені до процесів скорочення-розслаблення міометрія.

Передбачається, що отримані експериментальні дані, які були одержані з використанням калікс[4]арену C-1130 – селективного та ефективного інгібітора  $\text{Na}^+, \text{K}^+$ -АТРази, можуть мати значення для з'ясування ролі натрієвої помпи ПМ у контролі (через систему  $\text{Na}^+, \text{Ca}^{2+}$ -обміну) внутрішньоклітинної концентрації іонів  $\text{Ca}$  міоцитах матки.

Автори вдячні академіку НАН України проф. С.О. Костеріну та академіку НАН України проф. В.І. Кальченко за обговорення результатів дослідів та творчі дискусії.

1. Fedosova N., Habeck M., Nissen P. Structure and Function of Na,K-ATPase-The Sodium-Potassium Pump. *Compr. Physiol.* - 2021. - V.12, N.1. –P.2659-2679.
2. Contreras R., Torres-Carrillo A., Flores-Maldonado C., Shoshani L., Ponce A.  $\text{Na}^+/\text{K}^+$ -ATPase: More than an Electrogenic Pump. *Int J Mol Sci.* – 2024. – V.25, N.11. -P.6122.
3. Staehr C., Aalkjaer C., Matchkov V. The vascular Na,K-ATPase: clinical implications in stroke, migraine, and hypertension. *Clin Sci (Lond).* – 2023. – V.137, N.20. – P.1595-1618.
4. Coleman A.W., Jebors S., Cecillon S. et al. Toxicity and biodistribution of para-sulfonato-calix[4]arene in mice. *New J. Chem.* – 2008. – V.32, N.5. – P.780-782.
5. Костерін С.О., Кальченко В.І., Векліч Т.О. та ін. Калікс[4]арени як модулятори АТР-гідролазних систем гладеньком'язових клітин. Київ: Наукова Думка, 2019. 266 с.
6. Perret F., Lazar A.N., Coleman A.W. Biochemistry of the para-sulfonato-calix[n]arenes. *Chem. Commun.* – 2006. – P.2425-2438.
7. Кондратюк Т.П., Быченко С.Ф., Прищепа Л.А., Бабич Л.Г., Курский М.Д., Осипенко А.А. Выделение и характеристика фракции плазматических мембран миометрия свинки // *Укр. биохим. журн.* – 1986. – Т.58, №.4. – С. 50-56.
8. Bradford M.M. A rapid and sensitive method for the quantitation of microgram quantities of protein utilizing the principle of protein-dye binding // *Anal. Biochem.* – 1976. – V.72, N.1. – P.248-282.
9. Rathbun W., Betlach V. Estimation of enzymically produced orthophosphate in the presence of cystein and adenosine triphosphate // *Anal. Biochem.* – 1969. – V.28, N.1-3. – P.436-445.

## ФУНГІЦИДНІ ВЛАСТИВОСТІ КОМПОЗИТНИХ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ КОМПОНЕНТІВ З ЦЕОЛІТОМ

*Головань А.П., Сіора І.В., Крупська Т.В.*

Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України, [alyusik2001@ukr.net](mailto:alyusik2001@ukr.net)

Одним із ключових завдань сучасної агрохімії є розробка ефективних фунгіцидних препаратів на основі бактеріальних культур. Перспективним напрямком у цій сфері є адсорбційне закріплення антигрибкових бактерій на мінеральному носії, зокрема на кремнеземі або цеоліті, які можуть стимулювати метаболічні процеси мікроорганізмів.

Метою даного дослідження було визначення оптимального складу композиту на основі цеоліту і біофунгіциду, який володітиме найвищим рівнем антигрибкової активності порівняно з вихідними компонентами. Для експерименту були відібрані біологічно активні антигрибкові препарати на основі бактерій *Bacillus subtilis*, спор грибів *Trichoderma harzianum* та цеоліту (ТзОВ "Сокиринський цеолітовий завод") у співвідношеннях (0,01:1; 0,05:1; 0,1:1).

Композити наносили на поверхню насіння пшениці (опудрювали) безпосередньо перед висівом. Ступінь зараження грибковими хворобами насінин пшениці визначали як відношення кількості заражених грибом зернин пшениці до загальної кількості оброблених зернівок. Результати досліджень на 14-й день представлені в таблиці.

**Таблиця**

Ступінь зараження грибковими хворобами насінин пшениці

|                                    |            | <i>Bacillus subtilis</i> |      |      | <i>Trichoderma harzianum</i> |       |       |
|------------------------------------|------------|--------------------------|------|------|------------------------------|-------|-------|
| <b>контроль</b>                    | <b>8 %</b> | <b>8 %</b>               |      |      | <b>4 %</b>                   |       |       |
| <b>Кількості<br/>фунгіцидів, г</b> |            | 0,01                     | 0,05 | 0,1  | 0,01                         | 0,05  | 0,1   |
| <b>цеоліт</b>                      | <b>4 %</b> | 8 %                      | 8 %  | 18 % | 100 %                        | 100 % | 100 % |

Контрольний зразок містив 8% уражених грибами зернин пшениці (таблиця 1), що є базовим рівнем для порівняння. Використання цеоліту зменшило кількість грибів до 4%, що свідчить про його певний антифунгіцидний ефект. Зернівки пшениці, оброблені композитами на основі бактерій *Bacillus subtilis* (у різних концентраціях) та цеоліту демонстрували різні результати. Низький ступінь зараження 8% грибів спостерігався при незначних концентраціях *Bacillus subtilis*, але збільшення дози до 100 мг призводило до зростання ступеня зараження (18%), що може свідчити про токсичний вплив на корисні мікроорганізми. Зерно, оброблене розчином *Bacillus subtilis* також показує низький ступінь зараження грибами 8%, що дорівнює контрольному зразку.

Обробка пшениці розчином *Trichoderma harzianum* приводить до 4% зараження, що є одним із кращих результатів обробки зернівок і подібний до використання вихідного цеоліту (табл. 1). Низький ступінь зараження грибами при обробці зерен цеолітом, свідчить про його певний антифунгіцидний ефект. При обробці зернівок пшениці композитами на основі спор гриба *Trichoderma harzianum* з цеолітом, у всіх випадках спостерігалось до 100% грибного ураження. Це свідчить про те, що спори *Trichoderma harzianum* стимулювали ріст інших грибкових організмів, а цеоліт у цьому випадку не пригнічував їх ріст.

Отже, аналізуючи антифунгіцидні властивості досліджених зразків, можна зробити наступні висновки: вихідний цеоліт знижує ступінь зараження грибковими хворобами; для пригнічення грибкових уражень доцільно використовувати композитні матеріали на основі *Bacillus subtilis* з цеолітом у низьких концентраціях (менше 100 мг/г), уникаючи комбінацій зі спорами грибів *Trichoderma harzianum*.

## ЦИТОТОКСИЧНА ДІЯ СПОЛУК РУТЕНІЮ

*Каплюк Н.А.<sup>1</sup>, Жолобак Н.М.<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup> Київський національний університет технологій та дизайну, [natkap942@gmail.com](mailto:natkap942@gmail.com)

<sup>2</sup> Інститут мікробіології і вірусології ім. Д. К. Заболотного НАН України,

Сполуки на основі рутенію привернули значну увагу як багатообіцяючі протипухлинні засоби завдяки своїм унікальним хімічним властивостям, що відрізняють їх від традиційних препаратів на основі платини, таких як цисплатин [1-5]. Хоча препарати платини широко використовуються в хіміотерапії, вони часто призводять до серйозних побічних ефектів, що супроводжуються пошкодженням клітин кісткового мозку, волосяних фолікулів та клітин епітелію ротової порожнини, шлунково-кишкового тракту та репродуктивної системи [6]. Рутенієві комплекси виявляють кращу селективність до ракових клітин, меншу токсичність для нормальних тканин і здатні впливати на пухлини через різні молекулярні механізми внутрішньоклітинної регуляції. Ці переваги спонукали до широких досліджень їхніх цитотоксичних властивостей, механізмів дії та потенційного клінічного застосування.

На даний час відомо, що сполуки на основі рутенію проявляють свою цитотоксичну дію за допомогою багатьох механізмів, проте насамперед – через безпосередню взаємодію з ДНК, порушення функціонування мітохондрій та активацію шляхів апоптозу [1-3].

Показано, що комплекси рутенію виявляють потужну цитотоксичну активність проти широкого спектру ліній ракових клітин, включаючи рак молочної залози, товстої кишки, легенів і яєчників [1,2,4]. Кілька поліпіридилових комплексів рутенію (II) продемонстрували значну цитотоксичність *in vitro* проти клітинних ліній MCF-7 (рак молочної залози) і HT-29 (рак товстої кишки) зі значеннями IC<sub>50</sub> в мікромольному діапазоні [1]. На ефективність цих сполук впливають їхні структурні особливості, зокрема природа та розмір їхніх поліпіридилових лігандів, які зумовлюють їх здатність проникати в клітини, зв'язуватися з біомолекулами та індукувати апоптоз. Було показано [1-3,7], що структурні модифікації, такі як зміна складу ліганду або введення додаткових функціональних груп, підвищують їх протиракову ефективність, що робить їх перспективними кандидатами для подальшого вивчення.

На відміну від традиційних препаратів на основі платини, які утворюють жорсткі поперечні зшивки з ДНК, комплекси рутенію можуть інтеркалювати між парами основ ДНК, викликаючи структурні спотворення, які перешкоджають процесам реплікації та транскрипції [3,4,7,8]. Деякі сполуки рутенію також здатні ковалентно зв'язуватися із залишками гуаніну, що призводить до пошкодження ДНК і зупинки клітинного циклу. Крім того, певні фотоактивні рутенієві комплекси при активації світлом можуть генерувати високо реактивні форми, ще більше пошкоджуючи ДНК і вибірково індукуючи клітинну смерть саме у ракових клітинах [9].

Інший механізм впливу полягає в порушенні функціональності мітохондрій. Сполуки рутенію можуть деполаризувати мітохондріальну мембрану, що призводить до вивільнення цитохрому С. Він активує ферменти каспази, що спричиняють запрограмовану смерть клітин. Деякі сполуки рутенію викликають окисний стрес шляхом збільшення виробництва активних форм кисню, що призводить до мітохондріальної дисфункції та апоптозу. Крім того, вони можуть змінювати баланс між проапоптотичними та антиапоптотичними білками, що призводить до незворотного апоптозу клітин [1,2,7]. Такі мітохондріальні ефекти сполук рутенію дозволяють очікувати їх високу ефективність у терапії стійких до ліків новоутворень.

Комплекси рутенію також можуть спровокувати загибель трансформованих клітин через імунний механізм: активацію шляху рецептора смерті. Підвищуючи регуляцію ліганду Fas (FasL), вони активують рецептор Fas, ініціюючи каскад, який і призводить до апоптозу [3]. Деякі сполуки рутенію також сенсibiliзують ракові клітини до фактора некрозу пухлини-альфа (TNF-α) і пов'язаного з TNF ліганду, що індукує апоптоз (TRAIL), внаслідок чого вони стають більш вразливими до імунно-опосередкованого руйнування [8]. Ця здатність

залучати численні апоптотичні шляхи відрізняє препарати на основі рутенію від звичайних хіміотерапій та робить їх перспективними кандидатами для майбутніх комбінованих терапій і цільового лікування пухлин.

Рутенієві сполуки є багатообіцяючим класом протипухлинних агентів завдяки унікальним механізмам дії та покращеній селективності порівняно з традиційними препаратами на основі платини. З метою подальшого розширення застосування рутенієвих комплексів в протипухлинній терапії необхідні дослідження із вдосконалення лігандного дизайну (в тому числі, нанотехнологічних підходів), методів цільової доставки та відпрацювання максимально ефективних терапевтичних схем для оптимального використання їх лікувальних властивостей. Висока ефективність у подоланні лікарської резистентності та вибіркове знищення ракових клітин при мінімальному впливі на здорові тканини роблять їх перспективними кандидатами для клінічного застосування. Завдяки активним дослідженням та випробуванням рутенієві сполуки можуть стати важливою складовою у сучасній онкологічній практиці, забезпечуючи ефективніші й менш токсичні варіанти терапії для пацієнтів з агресивними формами раку.

1. Antonarakis E. S., Emadi A. Ruthenium-based chemotherapeutics: are they ready for prime time? – *Cancer chemotherapy and pharmacology*. – 2010. – Vol. 66, No. 1. – P. 1–9.
2. Hikiş P., Namiecińska E., Paneth P., et al. Mechanistic studies of arene–ruthenium(II) complexes with carbothioamidopyrazoles as alternative cancer drugs. – *Molecules*. – 2023. – Vol. 28, No. 9. – P. 3969.
3. Allardyce C. S., Dyson P. J. Ruthenium in medicine: current clinical uses and future prospects. – *Platinum metals review*. – 2001. – Vol. 45, No. 2. – P. 62–69.
4. Skoczynska A., Lewinski A., Pokora M., et al. An overview of the potential medicinal and pharmaceutical properties of Ru(II)/(III) complexes. – *International journal of molecular sciences*. – 2023. – Vol. 24, No. 11. – P. 9512.
5. Lin K., Zhao Z.Z., Bo H.B., et al. Applications of ruthenium complex in tumor diagnosis and therapy. – *Frontiers in pharmacology*. – 2018. – Vol. 9. – Article 1323.
6. Chemotherapy side effects. – *American Cancer Society*. – URL: <https://www.cancer.org/cancer/managing-cancer/treatment-types/chemotherapy/chemotherapy-side-effects.html> (date of access: 15.03.2025).
7. Lee S. Y., Kim C. Y., Nam T.-G. Ruthenium complexes as anticancer agents: a brief history and perspectives. – *Drug design, development and therapy*. – 2020. – Vol. 14. – P. 5375–5392.
8. Kavukcu S.B., Ensarioğlu H.K., Karabıyık H., et al. Cell death mechanism of organometallic ruthenium(II) and iridium(III) arene complexes on HepG2 and Vero cells/ – *ACS omega*. – 2023. – Vol. 8, No. 40. – P. 37549–37563.
9. Bonnet S. Ruthenium-Based photoactivated chemotherapy. – *Journal of the american chemical society*. – 2023. – Vol. 145, No. 43. – P. 23397–23415.

# ГІПОГЛІКІМІЧНА АКТИВНІСТЬ ПОХІДНИХ В РЯДУ 6-(4-ЕТИЛ-5-МЕРКАПТО-4Н-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ІЛ)ПІРИМІДИН-2,4(1Н,3Н)-ДІОНІВ

Карпенко Ю.В.

Запорізький державний медико-фармацевтичний університет, [karpenko.y.v@gmail.com](mailto:karpenko.y.v@gmail.com)

$\alpha$ -Глюкозидаза є ключовим ферментом у перетравленні вуглеводів і біосинтезі глікопротеїнів, який відіграє важливу роль у лікуванні дегенеративних захворювань, таких як діабет 2 типу та ВІЛ-інфекція. Інгібітори  $\alpha$ -глюкозидази можуть зменшити ускладнення цукрового діабету, зменшуючи вивільнення глюкози в кровотік шляхом перешкоджання ферментативної дії кишкової  $\alpha$ -глюкозидази. Крім того, враховуючи важливість  $\alpha$ -глюкозидази в глікозилюванні білків оболонки вірусу, які необхідні для інфекційності ВІЛ, інгібування цього ферменту є багатообіцяючою стратегією в розробці нових засобів проти ВІЛ. Тому розробка нових інгібіторів  $\alpha$ -глюкозидази є привабливою метою в галузі медичної хімії.

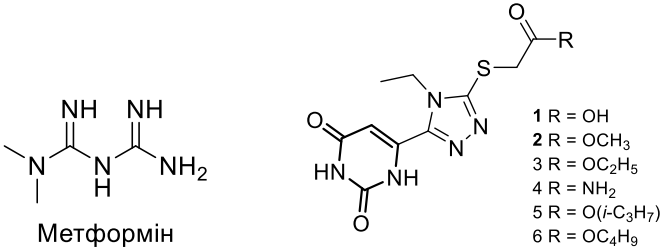
Піримідини є привілейованими каркасами, які містяться в багатьох біологічно активних сполуках. Було показано, що ці гетероцикли володіють широким діапазоном біоактивності: протипухлинна, антибактеріальна, противірусна, антифолатна та інші види активності. Нещодавно в літературі повідомлялося, що кілька похідних піридо[2,3-d]піримідинів проявляють себе, як потужний інгібітор  $\alpha$ -глюкозидази.

Будову досліджуваних сполук представлено на рис. 1. Молекулярний докінг проводили за допомогою програми AutoDock 4.2.6. Підготовлені ліганди та рецептори докували за допомогою AutoDock Vina для розрахунку афінності зв'язування та спостереження за типами незв'язуючих взаємодій між досліджуваними комплексами. Скринінг проводився на основі кристалографічної структури ферменту «Alpha-glucosidase GSJ», отриманого з RCSB Protein Data Bank (кристалічний код 2ZE0). Візуалізацію проводили за допомогою програми Discovery Studio Visualizer. Активні сайти в оброблених рецепторах були визначені за допомогою програмного забезпечення AutoDock перед стикуванням. Сітка для поля зв'язування мала розміри 40 Å × 40 Å × 40 Å, що було достатньо великим, щоб охопити всю область ферменту. Усі використовувані програми були загальнодоступними.

Аналіз молекулярного докінгу на ферменті «Alpha-glucosidase GSJ» показав (табл.), що всі досліджувані сполуки мають нижчу енергію зв'язування, ніж метформін, що свідчить про їхню сильнішу взаємодію з білком. Найкращі результати продемонстрували **DKP148 (-7,4482 kcal/mol)** та **DKP147 (-7,4079 kcal/mol)**, що робить їх найбільш перспективними кандидатами для подальших досліджень. Інші сполуки мають подібні значення енергії зв'язування, коливаючись у межах від -7,0780 до -7,3313 kcal/mol, що свідчить про їхню подібну спорідненість до ферменту. Метформін, із енергією -6,9581 kcal/mol, взаємодіє з ферментом слабше, ніж усі інші сполуки. Отримані результати вказують на доцільність подальшого дослідження, зокрема їхньої взаємодії у зв'язуючому сайті, типів міжмолекулярних контактів та структурної стабільності комплексів.

Таблиця

Результати молекулярного докінгу на ферменті «Alpha-glucosidase GSJ»

| №         | Binding energy (kcal/mol) | Будова досліджуваних сполук                                                                                                                                                                                                                                                          |
|-----------|---------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Метформін | -6,9581                   |  <p>1 R = OH<br/>2 R = OCH<sub>3</sub><br/>3 R = OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub><br/>4 R = NH<sub>2</sub><br/>5 R = O(<i>i</i>-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>)<br/>6 R = OC<sub>4</sub>H<sub>9</sub></p> |
| 1         | -7,3313                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
| 2         | -7,1266                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
| 3         | -7,3227                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
| 4         | -7,0780                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
| 5         | -7,4079                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
| 6         | -7,4482                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                      |

# ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОТИГРИБКОВОЇ ТА АНТИБАКТЕРІАЛЬНОЇ АКТИВНОСТІ 5-АРИЛСУЛЬФАНІЛ-, 5-АРИЛСУЛЬФОНІЛ-1,3-ОКСАЗОЛІВ ТА ОКСАЗОЛО-5-СУЛЬФОНАМІДІВ

Качаєва М.В., Година Д.М., Шульга Ю.В., Северін О.О., Пільо С.Г., Броварець В.С.

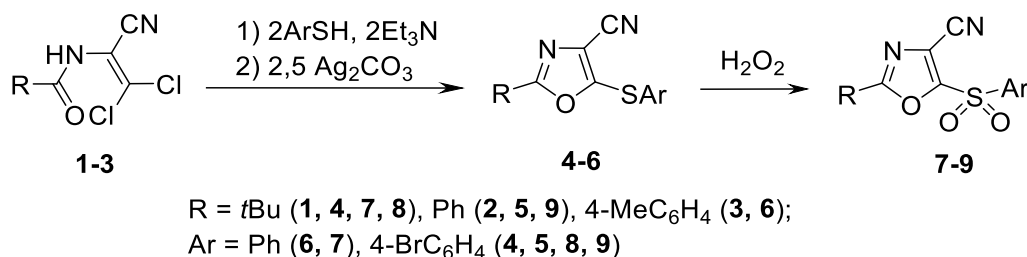
<sup>1</sup>Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря НАН України,

[marinaka4aeva@gmail.com](mailto:marinaka4aeva@gmail.com)

Похідні 1,3-оксазолу в останні роки викликають все більший інтерес з точки зору використання в якості антибактеріальних препаратів. Серед 4-ціано-1,3-оксазолів були віднайдені сполуки із яскраво вираженою антимікробною активністю [1]. Проте дослідження механізму їх біологічної дії та зв'язку структура-активність залишається маловивченим, але перспективним напрямом, який дозволяє оптимізувати структуру речовини для синтезу більш активних сполук. Серед таких речовин вже знайдено перспективні протиракові агенти [2-4]. Порівняння результатів протипухлинної активності похідних 1,3-оксазолу з різними замісниками у положеннях 4 і 5 кільця виявило зв'язок структури і природи замісників в 5 му положенні із рівнем протипухлинного ефекту сполук [2]. Аналізуючи результати протиракової активності *in vitro* 5-сульфанільних похідних 1,3-оксазолу **4-6** та 5-сульфонільних похідних **7-9**, можна зробити висновок, що сполуки із SO<sub>2</sub> замісником, який знаходиться у положенні 5 оксазольного кільця, виявилися значно активнішими, ніж сполуки із аміно і сульфанільною групами [2]. Цікаво було б порівняти результати антимікробної активності 5-сульфуровмісних похідних 1,3-оксазолу (5-сульфаніл-, 5-сульфонілзаміснених та оксазоло-5-сульфонамідів), а також 5-аміно-4-ціано-1,3-оксазолів, які вже показали себе перспективними бактерицидними агентами.

Синтез нових 5-сульфанільних похідних **4-6** включає дві стадії: реакція 2-ациламіно-3,3-дихлороакрилонітрилів **1-3** з арентіолами в присутності триетиламіну та подальша циклізація отриманих 3,3-біс(арилсульфаніл)акрилонітрилів у присутності карбонату срібла, яка дає 5-арилсульфаніл-1,3-оксазол-4-карбонітрили **4-6**. Останні були перетворені у відповідні 5-сульфонільні похідні **7-9** при окисненні їх пероксидом водню [3] (схема 1).

Схема 1



З метою синтезу потенційних біологічно активних 4-ціано-1,3-оксазол-5-сульфоніламідів **12-15** нами було використано реакцію отриманих раніше 2-арил-4-ціано-1,3-оксазол-5-сульфонілхлоридів **10** або **11** [4] із відповідними амінами – метилпіперидинами, 2-(4-хлорофеніл)-2-піперидин-1-ілетанаміном і *N*-метилетаноламіном (схема 2).

Естери 1,3-оксазол-4-карбонової кислоти із аміноазольним фрагментом **18, 19** було синтезовано реакцією метил 5-хлоросульфоніл-2-арил-1,3-оксазол-4-карбоксилату **17** з доступними 1*H*-піразол-5-амінами в діоксані та в присутності триетиламіну [5] (схема 3).

Антимікробну та протигрибкову активність досліджуваних сполук визначали диско-дифузійним методом, який полягає у дифузії сполук з паперових дисків у поживне серовище, поверхня якого колонізована культурою [6]. Для дослідження активності використовували бактеріальні штами *Escherichia coli* (ATCC 25922 та клінічний ізолят), та грибові штами *Candida albicans* М 885 (ATCC 10231) і клінічні ізоляти грибів *Candida albicans* та *Candida krusei*. Мікробне навантаження становило 1·10<sup>5</sup> колонієутворюючих одиниць в 1 мл (КУО/мл) культуральної рідини і контролювалося за оптичним стандартом мутності за МакФарландом.



Схема 2

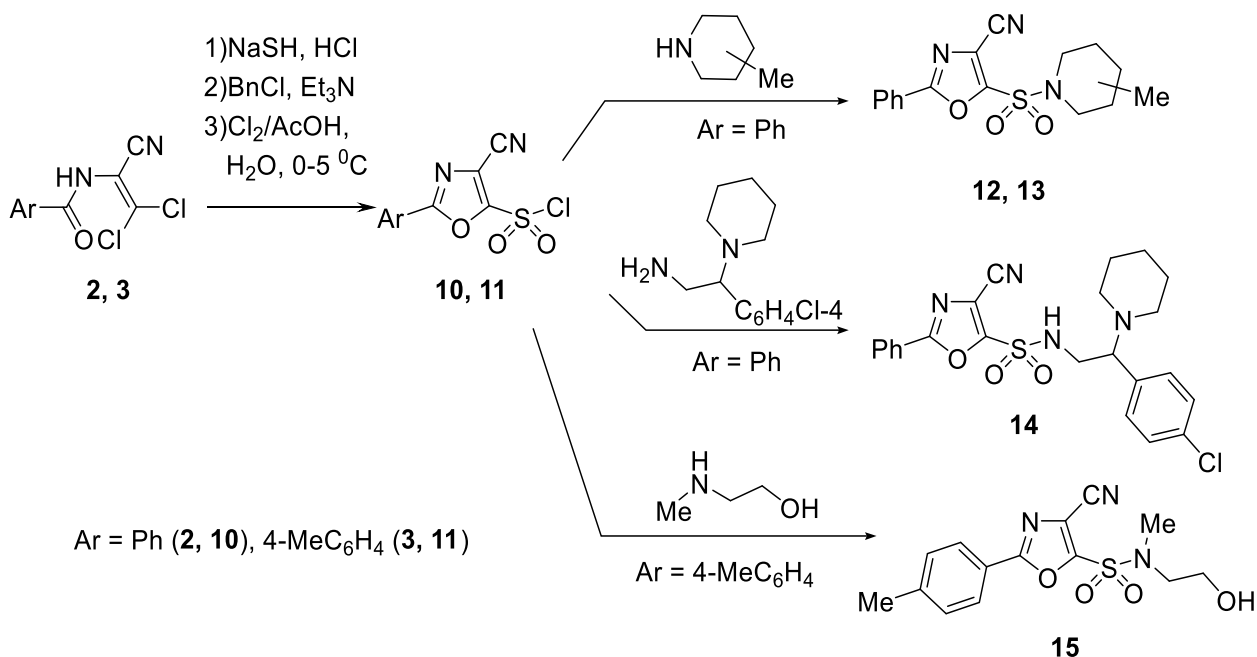
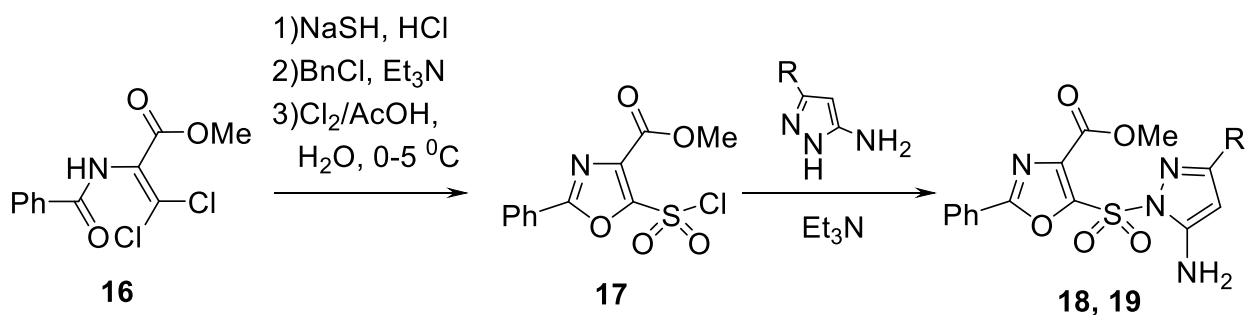


Схема 3

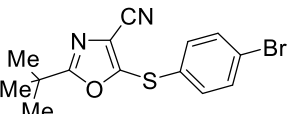
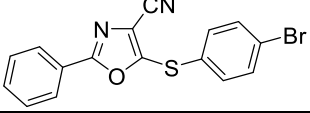
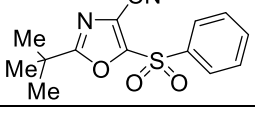
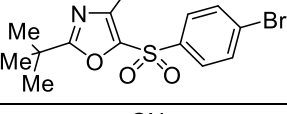
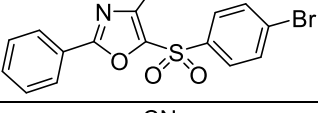
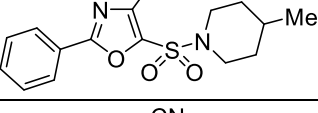
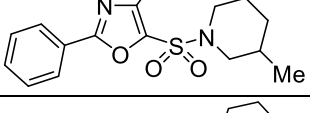
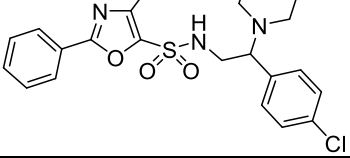
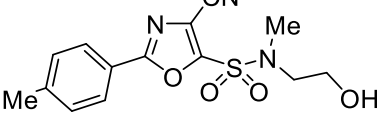
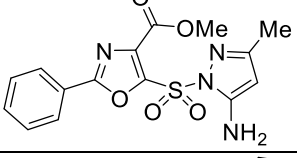
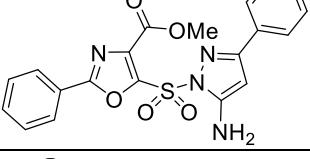


Для культивування бактерій використовували поживне середовище Мюлера-Хінтона (рН 7,2), а для грибів роду *Candida* – поживне середовище Сабуро (рН 6,0-6,8). Сполуки досліджували в концентрації 1,0 %, розчиняли в диметилсульфоксиді (ДМСО) та наносили в об'ємі 0,02 мл на паперові диски (діаметром 6 мм). Інокулят поміщали на чашки Петрі з поживним середовищем та інкубували протягом 24 годин при температурі +37 °С. Антимікробну активність визначали за діаметрами зон затримки росту мікроорганізмів у мм.

Наведені у таблиці дані свідчать, що похідні 1,3-оксазолу проявили слабкий антибактеріальний та фунгістатичний ефект. Досліджувані сполуки проти культури *E. coli* (ізолят) активності не проявили. Найбільш активними проти культури *C. albicans* (АТСС) виявилися 5-сульфонільні похідні із трет-бутильною групою **7** та **8** – діаметр зони затримки росту складав 16 мм. Найвищий рівень активності щодо *C. albicans* (ізолят) проявив сульфоніламід **12** (діаметр зони затримки росту – 18 мм). Найвищу протигрибкову активність щодо *C. krusei* проявили сполуки **7** та **8** (19 і 17 мм відповідно), яка перевищувала контроль (Флуконазол) на 4 і 2 мм відповідно. Антибактеріальна активність щодо *E. coli* (АТСС) спостерігалася також для сполук **7** і **8** (8 і 10 мм відповідно), проте цей результат є низьким.

Таблиця

Протигрибкова та антибактеріальна активність похідних 1,3-оксазолу

| №          | Сполуки                                                                             | <i>C. albicans</i><br>ATCC | <i>C. albicans</i><br>ізолят | <i>C. krusei</i><br>ізолят | <i>E. coli</i><br>ATCC | <i>E. coli</i><br>ізолят |
|------------|-------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------|------------------------------|----------------------------|------------------------|--------------------------|
| 4          |    | HA*                        | HA                           | HA                         | HA                     | HA                       |
| 5          |    | HA                         | 11                           | 14                         | HA                     | HA                       |
| 7          |    | 16                         | 15                           | 19                         | 8                      | HA                       |
| 8          |    | 16                         | 14                           | 17                         | 10                     | HA                       |
| 9          |    | HA                         | HA                           | HA                         | HA                     | HA                       |
| 12         |   | HA                         | 18                           | HA                         | HA                     | HA                       |
| 13         |  | HA                         | HA                           | HA                         | HA                     | HA                       |
| 14         |  | HA                         | HA                           | HA                         | HA                     | HA                       |
| 15         |  | HA                         | HA                           | HA                         | HA                     | HA                       |
| 18         |  | 10                         | HA                           | HA                         | HA                     | HA                       |
| 19         |  | HA                         | HA                           | HA                         | HA                     | HA                       |
| Флуконазол |                                                                                     | 25                         | HA                           | 15                         | -                      | -                        |

\*HA – сполука неактивна, діаметр зони затримки росту <8 мм. Вміст сполук на диску становив 0,6 мкмоль, вміст флуконазолу на диску – 0,13 мкмоль.

Таким чином, за результатами визначення антибактеріальної та протигрибкової активності 5-арилсульфанільні, 5-арилсульфонільні та 5-сульфоніламідні похідні 1,3-оксазолу проявили антимікробний ефект з діапазоном значень діаметру зон затримки росту від 8 до 19 мм.

Найактивнішими сполуками були 5-арилсульфонільні похідні **7** і **8** із трет-бутильною групою у положенні 2 оксазольного кільця, чутливість до яких виявили штами *C. albicans* (ATCC), *C. albicans* (ізолят), *C. krusei* і *E. coli* (ATCC). *E. coli* (ізолят) виявився резистентним до дії досліджених сполук.

Сполуки, які містять сульфуровмісний замісник в положенні 5 оксазольного кільця (5-арилсульфанільну, 5-арилсульфонільну або 5-сульфоніламідну групу), демонструють помірний антибактеріальний ефект, на відміну від 5-аміно-4-ціано-1,3-оксазолів, які проявляють високу антибактеріальну дію [1]. Перспективою подальших досліджень є більш поглиблене специфічне вивчення біологічної активності та особливостей впливу різних замісників у сполуках даного класу на біоактивність.

1. Semenyuta, D. Hodyna, V. Kovalishyn, B. Demydchuk, M. Kachaeva, S. Pilyo, V. Brovarets, L. Metelytsia Development and application of in silico models to design new antibacterial 5-amino-4-cyano-1,3-oxazoles against colistin-resistant *E. coli* strains. *Artificial Intelligence Chemistry*. - 2023. - V. 1. 100024.

2. Kachaeva M.V., Hodyna D.M., Obernikhina N.V., Pilyo S.G., Kovalenko Yu.S., Prokopenko V.M., Kachkovsky O.D., Brovarets V.S. Dependence of the anticancer activity of 1,3-oxazole derivatives on the donor/acceptor nature of his substitutes. *Journal of Heterocyclic Chemistry*. - 2019. - P. 1–13.

3. Kachaeva M.V., Pilyo S.G., Zhirnov V.V., Brovarets V.S. Synthesis, characterization, and in vitro anticancer evaluation of 2-substituted 5-arylsulfonyl-1,3-oxazole-4-carbonitriles. *Medicinal Chemistry Research* - 2019. - V 28. I.1. - P. 71–80.

4. Kachaeva M.V., Pilyo S.G., Demydchuk B.A., Prokopenko V.M., Zhirnov V.V., Brovarets V.S. 4-Oxazole-5-sulfonamides as novel promising anticancer lead compounds. *International Journal of Current Research*. - 2018. - V.10. I.5. - P. 69410–69425.

5. Kachaeva M., Pilyo S., Popilnichenko S., Kornienko A., Rusanov E., Prokopenko V., Zhabrev V., Brovarets V.S. Synthesis of fused heterocycles from 2-aryl-5-(chlorosulfonyl)-1,3-oxazole-4-carboxylates and  $\alpha$ -aminoazoles involving the Smiles rearrangement. *Current Chemistry Letters*. - 2018. - V.7. I.4. - P. 101–110.

6. Bauer A., Kirby W., Sherris J. [et al.] Antibiotic susceptibility testing by a standardized single disk method. *American Journal of Clinical Pathology*. - 1966. - V. 45. - P. 493-496.

*Робота виконана за підтримки Національної академії наук України в рамках роботи по гранту НАН України дослідницьким лабораторіям/групам молодих вчених НАН України для проведення досліджень за пріоритетними напрямками розвитку науки і техніки у 2024-2025 рр. згідно договору №29/02-2025(5) від 15.01.2025 р.*

# ІНГІБІТОР НАТРІЄВОЇ ПОМПИ ПЛАЗМАТИЧНОЇ МЕМБРАНИ - КАЛІКС[4]АРЕН C-1220 ПІДВИЩУЄ КОНЦЕНТРАЦІЮ $\text{Ca}^{2+}$ У МІОЦИТАХ МАТКИ

Малюк О.В., Веклич Т.О.

Інститут біохімії ім. О.В. Палладіна НАН України, [o.maliuk@biochem.kiev.ua](mailto:o.maliuk@biochem.kiev.ua)

В плазматичній мембрані (ПМ) клітин гладеньких м'язів функціонує низка АТРаз. Зокрема, фундаментальне значення має електроензим  $\text{Na}^+, \text{K}^+$ -АТРаза, що підтримує у цитоплазмі високі концентрації  $\text{K}^+$  та низькі концентрації  $\text{Na}^+$ , забезпечуючи клітинну збудливість та інші біохімічні та біофізичні процеси. Цей ензим присутній у всіх тканинах, а його активність дуже чутлива до енергетичного стану клітини, отже, в деякому розумінні можна стверджувати, що каталітична та транспортна активність  $\text{Na}^+, \text{K}^+$ -АТРази характеризує енергетичний потенціал клітини.  $\text{Na}^+, \text{K}^+$ -АТРаза займає ключову роль у регуляції багатьох біохімічних процесів і тому є мішенню впливу як фізіологічних регуляторних чинників, так і фармакологічних агентів [1-2].

Спрямований синтез і вивчення властивостей ефекторів, які здатні проникати через ПМ та оборотно з високою спорідненістю і селективністю змінювати ензиматичну чи транспортну активність окремих внутрішньоклітинних мембранозв'язаних і цитоплазматичних протеїнів – одне з найважливіших завдань сучасної біологічної, біофізичної та біоорганічної хімії. У такому контексті перспективними слід вважати каліксарени – макроциклічні сполуки, специфіка молекулярної будови та варіативність структурної модифікації яких дозволяють із доцільними фінансовими та трудовими витратами синтезувати якісні таргетовані ефектори. Унікальна будова та властивості молекул каліксаренів дають змогу модифікувати їх структуру (із залученням різних функціональних груп на верхньому й нижньому вінцях молекули), а отже, пошук нових каліксаренових ефекторів ензимів тільки розпочато. Слід зазначити, що каліксаренам притаманні низькі токсичність [3] та імуногенність [4], а також доступний синтез і його низька вартість.

Метою цієї роботи було дослідження закономірностей дії калікс[4]арену C-1220 як на ензиматичну активність  $\text{Na}^+, \text{K}^+$ -АТРази, так і на внутрішньоклітинний  $\text{Ca}^{2+}$ -гомеостаз в гладеньких м'язах матки.

Калікс[4]арен C-1220 (5,17-біс(дигідроксифосфоніл(сульфамідотоліл)метил)-25,27-дипропоксикалікс[4]арен) (рис. 1) був синтезований та охарактеризований із використанням методів ЯМР та інфрачервоної спектроскопії. Сполука була синтезована академіком НАН України В.І. Кальченком та його колегами (Інститут органічної хімії НАН України).

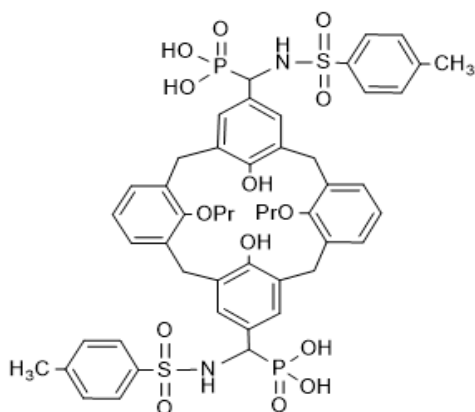


Рис. 1. Структурна формула калікс[4]арену C-1220.

Ензиматичні дослідження були проведені у відділі біохімії м'язів Інституту біохімії ім. О.В. Палладіна НАН України (зав. відділом – академік НАН України С.О. Костерін).

Експерименти були виконані на фракції ПМ клітин міометрія, оброблених 0,1 % розчином дигітоніну, та суспензії міоцитів щурів.

Фракцію ПМ виділяли з міометрія свині, як було описано раніше [5]. Вміст білка в мембранній фракції визначали методом М. Bredford [6]. АТРазну активність визначали у фракції ПМ при 37 °С у стандартному середовищі (об'єм – 0,4 мл), яке містило (мМ): 3 АТР, 3 MgCl<sub>2</sub>, 25 NaCl, 125 KCl, 1 ЕГТА, 20 Нерес-трис-буфер (рН 7,4), 1 NaN<sub>3</sub>, 1 убаїн, 0,1 мкМ тапсигаргін і 0,1 % дигітонін. “Убаїнчутливу” Na<sup>+</sup>,K<sup>+</sup>-АТРазну активність розраховували по різниці між величинами “загальної” АТРазної активності та “базальної” Mg<sup>2+</sup>-АТРазної активності. “Базальну” Mg<sup>2+</sup>-АТРазну активність визначали в тому ж середовищі, але в присутності 1 мМ убаїну. Кількість продукту реакції P<sub>i</sub> визначали за методом W. Rathbun et V. Betlach [7]. У наших дослідях середнє значення питомих активностей Na<sup>+</sup>,K<sup>+</sup>-АТРази та “базальної” Mg<sup>2+</sup>-АТРази ПМ становить 10,2 ± 0,7 і 18,1 ± 1,2 мкмоль P<sub>i</sub>/мг протеїну за 1 год відповідно (M ± m; n = 7).

При вивченні концентраційної залежності дії калікс[4]арену C-1220 на ензиматичну активність, значення коефіцієнтів інгібування I<sub>0,5</sub> та коефіцієнтів Хілла n<sub>H</sub> розраховували із використанням лінеаризованих графіків Хілла відповідно до рівняння  $\lg[(A_{max}-A)/A] = -n_H \lg I_{0,5} + n_H \lg [C-1220]$ , де A<sub>max</sub> та A – питомі ензиматичні активності у відсутності (“нульова точка”) та у присутності в середовищі інкубації калікс[4]арену в концентрації [C-1220].

На початку нашої роботи ми намагалися з'ясувати селективність дії калікс[4]арену C-1220 на АТР-гідролазні активності ПМ міоцитів та показали, що калікс[4]арен C-1220 в концентрації 100 мкМ ефективно пригнічує Na<sup>+</sup>,K<sup>+</sup>-АТРазну активність ПМ клітин міометрія до рівня 4,2 ± 0,7 % відносно контрольного значення (прийнятого за 100 %) (M ± m; n = 5) (рис. 2).

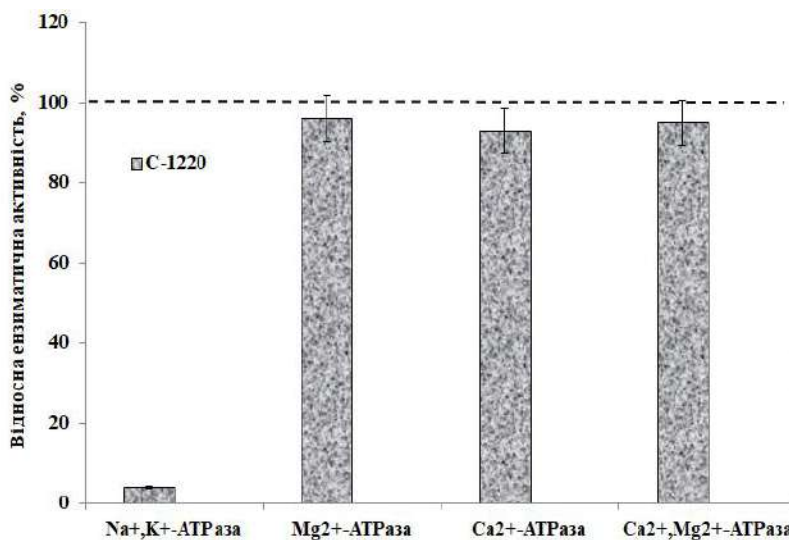


**Рис. 2.** Вплив калікс[4]арену C-1220 (100 мкМ) на АТР-гідролазні активності в плазматичних мембранах клітин міометрія (M ± m; n = 5).

За 100 % прийнято значення питомих ензиматичних активностей у відсутності калікс[4]арену у середовищі інкубації

У той же час ця сполука, що була використана у такій ж самій концентрації, практично не впливала на ензиматичні активності “базальної” Mg<sup>2+</sup>-АТРази, Ca<sup>2+</sup>-АТРази і Ca<sup>2+</sup>,Mg<sup>2+</sup>-АТРази ПМ: відповідні активності становили 96,2 ± 0,8; 93,4 ± 0,9 і 95,3 ± 0,8 % щодо контрольного значення (M ± m; n = 5) (рис. 2). Таким чином, калікс[4]арен C-1220, використаний у концентрації 100 мкМ, ефективно інгібував активність Na<sup>+</sup>,K<sup>+</sup>-АТРази у фракції ПМ міоцитів матки. При цьому він майже не впливав на активність інших АТР-гідролаз ПМ. Отже, калікс[4]арен C-1220 селективно (на рівні ПМ) пригнічує активність Na<sup>+</sup>,K<sup>+</sup>-АТРази ПМ, не впливаючи на активності Mg<sup>2+</sup>-АТРази, Ca<sup>2+</sup>-АТРази і Ca<sup>2+</sup>,Mg<sup>2+</sup>-АТРази ПМ.

У наших подальших дослідженнях, ми вивчали концентраційну залежність інгібуючої дії калікс[4]арену C-1220 ( $10^{-8}$  –  $10^{-4}$  М) на активність  $\text{Na}^+, \text{K}^+$ -АТРази ПМ. Як видно з рис. 3, калікс[4]арен C-1220 у всьому діапазоні концентрацій ( $10^{-8}$  –  $10^{-4}$  М) дозозалежно пригнічує  $\text{Na}^+, \text{K}^+$ -АТРазну активність ПМ. Розрахована величина коефіцієнта інгібування  $I_{0,5}$  складає  $48 \pm 2$  нМ, значення коефіцієнта Хілла  $n_H$  становить  $0,42 \pm 0,04$  ( $M \pm m$ ;  $n = 5$ ).

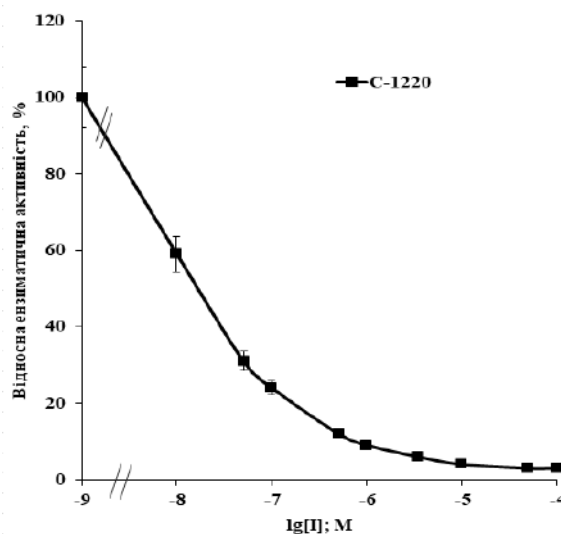


**Рис. 3.** Концентраційна залежність впливу калікс[4]арену C-1220 на активність  $\text{Na}^+, \text{K}^+$ -АТРази плазматичних мембран клітин міометрія ( $M \pm m$ ,  $n = 5$ ).

*За 100 % прийнято значення питомої ензиматичної активності у відсутності калікс[4]арену C-1220 у середовищі інкубації.*

З отриманих результатів випливає, що досліджений калікс[4]арен C-1220 з високою ефективністю ( $I_{0,5} = 48 \pm 5$  нМ) пригнічує ензиматичну активність  $\text{Na}^+, \text{K}^+$ -АТРази ПМ, при цьому він не впливає на активності  $\text{Mg}^{2+}$ -АТРази,  $\text{Ca}^{2+}$ -АТРази і  $\text{Ca}^{2+}, \text{Mg}^{2+}$ -АТРази ПМ (рис. 2, 3).

Важливим питанням було з'ясувати, чи буде впливати калікс[4]арен C-1220 на внутрішньоклітинну концентрацію  $\text{Ca}^{2+}$  гладеньком'язових клітинах.

Тому у своїх подальших експериментах ми оцінювали кількість  $\text{Ca}^{2+}$  в міоплазмі методом конфокальної мікроскопії із використанням  $\text{Ca}^{2+}$ -чутливого зонду fluo-4 під впливом калікс[4]арену C-1220. Було показано, що під дією калікс[4]арену C-1220 (10 мкМ) відбувається різке зростання флуоресцентної відповіді  $\text{Ca}^{2+}$ -чутливого зонду fluo-4 АМ у клітині (рис. 4). Протягом наступних 2 хв концентрація  $\text{Ca}^{2+}$  знижується, що свідчить про залучення інших механізмів регуляції гомеостазу концентрації  $\text{Ca}^{2+}$  ( $\text{Ca}^{2+}, \text{Mg}^{2+}$ -АТРаза ПМ,  $\text{Ca}^{2+}$ -уніпортер мітохондрій). Незмінним лишався рівень флуоресценції Hoechst, який був локалізований в основному в ядрі ГМК і фону. Отже, калікс[4]арен C-1220 – інгібітор  $\text{Na}^+, \text{K}^+$ -АТРази ПМ підвищує концентрацію цитозольного  $\text{Ca}^{2+}$  у ГМК.

Ці результати свідчать про те, що під впливом калікс[4]арену C-1220 (10 мкМ) відбувається різке підвищення концентрації  $\text{Ca}^{2+}$  у клітині, що вірогідно пов'язане зі зниження активності  $\text{Na}^+, \text{K}^+$ -АТРази ПМ, яку інгібує даний тіакалікс[4]арен. Разом з тим протягом наступних 100 сек концентрація  $\text{Ca}^{2+}$  знижується до початкового рівня, що свідчить про залучення компенсаторних  $\text{Ca}^{2+}$ -транспортувальних систем в міоцитах до релаксації кальцієвого сигналу, які мають нижчу афінність до  $\text{Ca}^{2+}$  та реагують, головним чином, на його високі концентрації в клітині ( $\text{Ca}^{2+}$ -уніпортер мітохондрій,  $\text{Na}^+ - \text{Ca}^{2+}$ -обмінник ПМ).



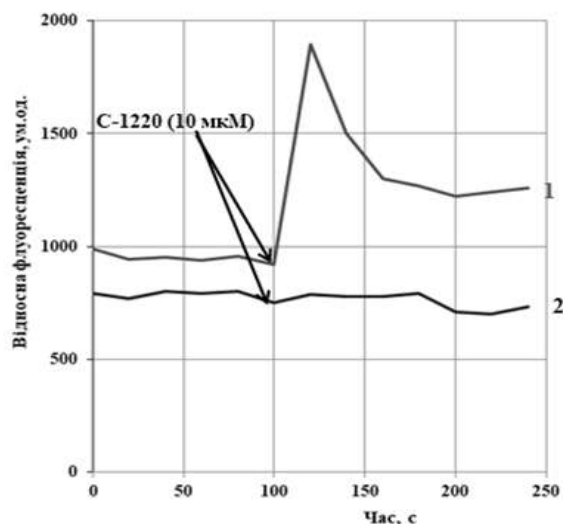


**Рис. 4.** Зміна, за умов дії калікс[4]арену C-1220, флуоресценції зондів в міоциті матки, зареєстрована за допомогою конфокальної мікроскопії:  $\text{Ca}^{2+}$ -чутливого fluo-4 AM та ДНК-чутливого Hoechst. Стрілками показано внесення аліквоти розчину калікс[4]арену C-1220 (кінцева концентрація - 10 мкМ). Наведено результати типового експерименту.

Передбачається, що отримані експериментальні дані, які були одержані з використанням калікс[4]арену C-1220 – селективного та ефективного інгібітора  $\text{Na}^+, \text{K}^+$ -АТРази, можуть мати важливе значення для з'ясування мембранних механізмів катіонного обміну у гладеньких м'язах, зокрема, під час вивчення ролі плазматичної мембрани в забезпеченні електро- та фармако механічного sprzęження в них, а також в регуляції іонного гомеостазу в гладеньком'язових клітинах.

*Автори вдячні академіку НАН України проф. С.О. Костеріну та академіку НАН України проф. В.І. Кальченко за обговорення результатів дослідів та творчі дискусії.*

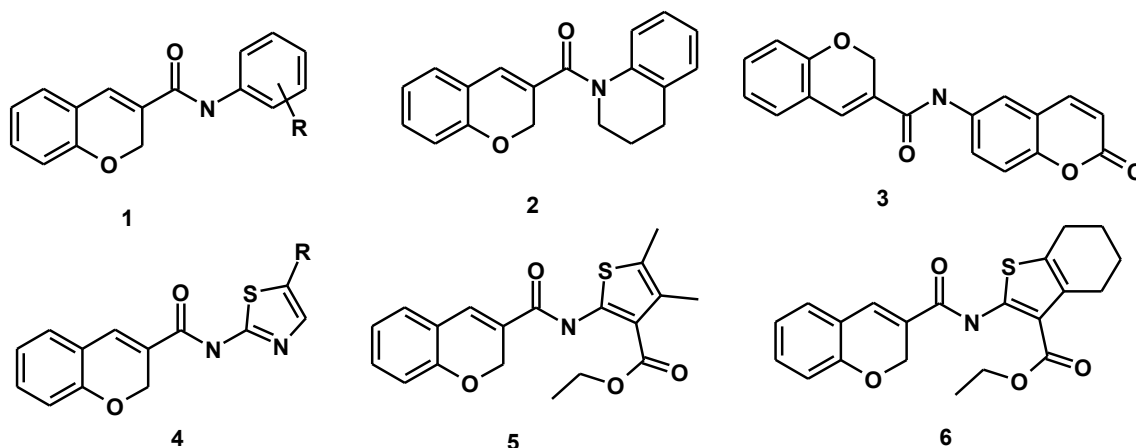
1. Fedosova N. U., Habeck M., Nissen P. Structure and Function of Na,K-ATPase-The Sodium-Potassium Pump. - *Compr. Physiol.* – 2021. - 12(1). - 2659-2679.
2. Contreras R. G., Torres-Carrillo A., Flores-Maldonado C., Shoshani L., Ponce A.  $\text{Na}^+/\text{K}^+$ -ATPase: More than an Electrogenic Pump. - *Int J Mol Sci* . – 2024. - 25(11). - 6122.
3. Coleman A.W., Jebors S., Cecillon S. et al. Toxicity and biodistribution of para-sulfonato-calix[4]arene in mice. - *New J. Chem.* – 2008. - 32(5). - 780-782.
4. Костерін С.О., Кальченко В.І., Векліч Т.О., Бабіч Л.Г., Шликов С.Г. Калікс[4]арени як модулятори АТР-гідролазних систем гладеньком'язових клітин. Монографія. – Київ: – Наукова Думка, 2019. – 266 с.
5. Кондратюк Т.П., Быченко С.Ф., Прищепа Л.А., Бабич Л.Г., Курский М.Д., Осипенко А.А. Выделение и характеристика фракции плазматических мембран миометрия свинки // *Укр. биохим. журн.* – 1986. – 58, № 4. – С. 50-56.
6. Bradford M.M. A rapid and sensitive method for the quantitation of microgram quantities of protein utilizing the principle of protein-dye binding // *Anal. Biochem.* – 1976. – 72, N 1. – P. 248-282.
7. Rathbun W., Betlach V. Estimation of enzymically produced orthophosphate in the presence of cystein and adenosine triphosphate // *Anal. Biochem.* – 1969. – 28, N 1-3. – P. 436-445.

## 2H-ХРОМЕН-3-КАРБОКСАМІДИ ЯК ПЕРСПЕКТИВНІ БІОЛОГІЧНО АКТИВНІ РЕЧОВИНИ

Матійчук Ю.Е., Хома О.Я., Дранак І.В.

Львівський національний медичний університет імені Данила Галицького,  
[yu.matiichuk@ukr.net](mailto:yu.matiichuk@ukr.net)

Здійснено аналіз сучасного стану дизайну лікарських засобів на основі 2H-хромен-3-карбоксамідів. Згенеровано комбінаторну бібліотеку різноманітних 2H-хромен-3-карбоксамідів **1-6** з аліфатичними, ароматичними та гетероароматичними радикалами в амідному фрагменті.

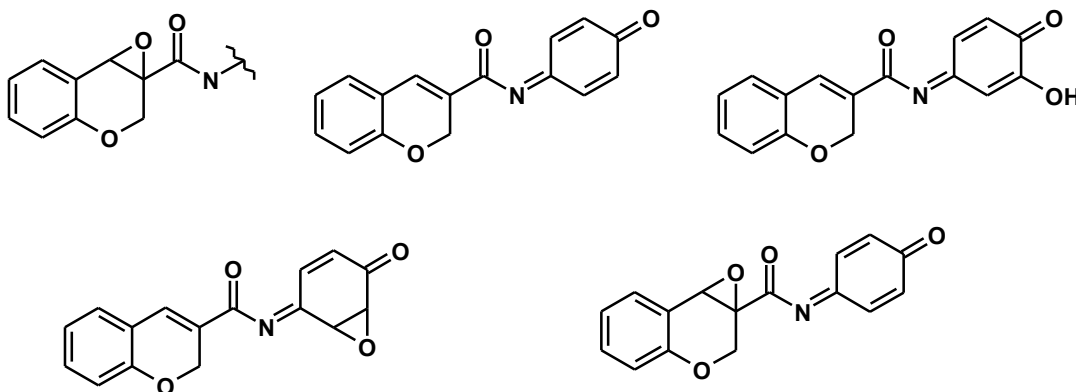


За своєю структурою для них характерна висока молекулярна схожість зі сполуками, для яких підтверджена висока біологічна активність, з високим значенням коефіцієнта Танімото. Для більшості досліджуваних 2H-хромен-3-карбоксамідів прогнозується висока ймовірність інгібіторної активності щодо кіназ. Також передбачається висока імовірність антимікробної дії щодо збудників інфекційних хвороб та хвороби Альцгеймера.

Усі сполуки відповідають критеріям лікоподібності. Здійснено прогноз ADME-Tox параметрів з використанням інтернет-ресурсів SwissADME, OSIRIS Property Explorer, ProTox 3.0, pkCSM.

Молекулярний докінг проведено з використанням Autodock Vina, Discovery Studio Visualizer та Protein Data Bank. Здійснено докінгові дослідження 2H-хромен-3-карбоксамідів **1a** (R = CF<sub>3</sub>), **1b** (R = C(O)CH<sub>3</sub>), **4a** (R = H), **4b** (R = 5-(2-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>CH<sub>2</sub>)), **4c** ((R = 5-(3-CF<sub>3</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>CH<sub>2</sub>))) в активному центрі Rho II кінازی (PDB ID 2F2U). Енергія зв'язування для вказаних сполук знаходиться в інтервалі -7.9 – -9.6 ккал/моль. У випадку *N*-{5-[3-(трифторметил)бензил]-1,3-тіазол-2-іл}-2H-хромен-3-карбоксаміду **4c** має місце деструктивна взаємодія, що призводить до зниження енергії зв'язування.

Проаналізовано шляхи метаболічних перетворень, передбачено можливе утворення токсичних метаболітів:



## ЕФЕКТИВНІСТЬ НАНОЧАСТИНОК МІДІ ТА СРІБЛА ЯК АНТИБАКТЕРІАЛЬНИХ ПРЕПАРАТІВ

*Муквич В.Ю., Пшеничний Р.М.*

Сумський державний університет, [mukvichvlada@gmail.com](mailto:mukvichvlada@gmail.com)

Відкриття антибіотиків на початку ХХ століття викликало значний інтерес науковців, оскільки ці препарати розглядалися як ефективний засіб проти інфекційних захворювань. Однак, після широкого впровадження цих препаратів почали виявляти штами бактерій, стійкі до дії антибіотиків. Як наслідок, доступний арсенал ефективних антибіотичних препаратів невпинно скорочується, оскільки патогенні мікроорганізми дедалі активніше розвивають механізми опору відомим класам антибіотиків. За таких умов нагальним стає пошук і впровадження альтернативних підходів до боротьби з інфекціями, зокрема використання колоїдних розчинів міді й срібла, які демонструють широкий спектр антимікробної дії та здатні підсилити або доповнити дію традиційних антибіотиків.

Нанорозмір частинок забезпечує високе співвідношення поверхні до об'єму, що забезпечує суттєву взаємодію з бактеріями та ефективну антимікробну дію навіть при мінімальних концентраціях. Інтерес до срібла пов'язаний зі здатністю металу вбивати як грампозитивні, так і грамнегативні бактерії, грибки і навіть віруси. Наночастинки міді викликають інтерес серед металевих наночастинок через їх нетоксичність, низьку вартість, поширеність у природі, простоту виготовлення та виняткові фотоелектричні можливості [1].

Наночастинки Ag здатні фізично взаємодіяти з клітинною поверхнею різних бактерій. Багато досліджень показали, що наночастинки Ag можуть пошкоджувати клітинні мембрани, що призводить до структурних змін, які роблять бактерії більш проникними. Цей ефект значною мірою залежить від розміру, форми та концентрації наночастинок [2]. Не зважаючи на те, що антибактеріальні засоби на основі срібла ефективні проти бактерій і малотоксичні, але не настільки ефективні проти грибків, як мідні наночастинки. Антимікробні характеристики наночастинок Cu можна пояснити їх сильною спорідненістю до карбоксильних груп і амінів, які є компонентами клітинної стінки бактерій. Ця спорідненість сприяє більш міцній взаємодії з мікроорганізмами. У високих концентраціях ця властивість дозволяє наночастинкам міді нейтралізувати певні бактерії з більшою ефективністю, ніж інші металеві наночастинки, включаючи срібло, з точки зору бактерицидної активності [3].

У наукових дослідженнях наночастинки срібла та наночастинки міді розглядаються як перспективні антимікробні засоби проти багатьох поширених патогенів. Обидва типи наночастинок виявляють активність щодо грампозитивних (*Staphylococcus aureus*, *Bacillus subtilis*, *Enterococcus faecalis* тощо) та грамнегативних (\**Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Klebsiella pneumoniae*, *Salmonella Typhi* тощо) бактерій [4, 5].

**Таблиця**

Порівняння мінімальних інгібувальних концентрацій наночастинок срібла та міді

| Бактерія                     | Мінімальна інгібувальна концентрація, мкг/мл |                   |
|------------------------------|----------------------------------------------|-------------------|
|                              | Наночастинки срібла                          | Наночастинки міді |
| <i>Staphylococcus aureus</i> | 25 [6]                                       | 1,25 [7]          |
| <i>Escherichia coli</i>      | 6,25 [6]                                     | 2,5 [7]           |

При цьому наночастинки срібла вважаються ефективнішими й часто застосовуються в медичних виробках, наприклад у покриттях для імплантів та антисептичних пов'язках, завдяки вираженій антимікробній дії й добрій сумісності з біологічними тканинами. Натомість наночастинки міді можуть слугувати економічно вигіднішою альтернативою, оскільки мідь має нижчу вартість порівняно зі сріблом. Їх використовують для виготовлення антибактеріальних покриттів у промисловості (фільтри для води, пакувальні матеріали, текстиль тощо).

Таким чином, наночастинки міді та срібла демонструють широкий спектр антимікробної активності, обумовлений здатністю пошкоджувати клітинні мембрани та

підвищувати проникність бактеріальних клітин. Завдяки цьому вони розглядаються як перспективні компоненти протимікробних препаратів у контексті посилення резистентності до традиційних антибіотиків. Подальші дослідження доцільно зосередити на оптимізації концентрації, розміру й форми наночастинок, детальному вивченні їх безпечності та екологічних ризиків, а також на впровадженні «зелених» методів синтезу, здатних зменшити екологічне навантаження та підвищити біосумісність наноматеріалів.

1. Menazea A. A. et al. Synthesis and antibacterial activity of graphene oxide decorated by silver and copper oxide nanoparticles. - *J. Mol. Struct.* - 2020. - Vol. 1218. - P. 128536.
2. Franci G. et al. Silver nanoparticles as potential antibacterial agents. - *Molecules.* - 2015. Vol. 20, - no. 5. - P. 8856–8874.
3. Sampath S. et al. A review on algal mediated synthesis of metal and metal oxide nanoparticles and their emerging biomedical potential. - *Journal of biotechnology.* 2022.
4. Devaraji M., Thanikachalam P. V., Elumalai K. The potential of copper oxide nanoparticles in nanomedicine: a comprehensive review. - *Biotechnology notes.* 2024.
5. Vanlalveni C. et al. A review of microbes mediated biosynthesis of silver nanoparticles and their enhanced antimicrobial activities - *SSRN electronic journal.* 2024.
6. Behera S. S. et al. Green synthesis of silver-chitosan nanocomposite exhibits promising antibiofilm properties against pathogenic bacteria *Escherichia coli* and *Staphylococcus aureus*. - *The microbe.* - 2025. - P. 100264.
7. Vakili N. et al. Eco-friendly synthesis of copper nanoparticles by using *Ralstonia* sp. and their antibacterial, anti-biofilm, and antivirulence activities. - *Biochemistry and biophysics reports.* - 2025. - Vol. 42. - P. 101978.

## МОДЕЛЮВАННЯ МЕХАНІЗМІВ ВЗАЄМОДІЇ АЛЬБУМІНУ З КОМПЛЕКСНИМИ СПОЛУКАМИ РТ(II)

Першко Н.Ю.<sup>1</sup>, Дем'яненко Є.М.<sup>2</sup>, Журавський С.В.<sup>2</sup>, Сігарьова Н.В.<sup>2</sup>,  
Юр'єва К.А.<sup>2</sup>, Сидоренко М.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Інститут проблем кріобіології і кріомедицини НАН України,

<sup>2</sup> Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйки НАН України, [microft2@ukr.net](mailto:microft2@ukr.net)

Для розробки прогностичного тесту на оцінку зв'язування препаратів платини з білками крові пацієнта використовують розроблену методику [1] реєстрації спектрів поглинання тонких плівок крові та інших біологічних речовин у середньому ІЧ-діапазоні, у смузі Амід 1 (1600...1700 см<sup>-1</sup>), у якій спектр формується переважно за рахунок білкових компонентів крові, більшу частину яких становить альбумін.

Авторами [2] розроблений експрес-метод, який дозволяє оцінити (зафіксувати) взаємодію альбуміну з хіміопрепаратами, в тому числі цисплатину та карбоплатину. Встановлено, що при взаємодії кожного з досліджуваних хіміопрепаратів з альбуміном відбувається структурна перебудова альбуміну, яка в ІЧ-спектрі виражається зміною піків в області 1620...1650 см<sup>-1</sup>, що характеризують стан альфа-спіральних та бета-структурних ділянок альбуміну.

Метою даної роботи було: методом квантово-хімічного моделювання визначити найбільш ймовірні механізми взаємодії комплексних сполук Pt<sup>2+</sup> (цисплатину) з білками крові людини, переважну частину яких становить альбумін.

За допомогою програми GAMESS (US) [3], методом теорії функціонала густини з функціоналом B3LYP та дисперсійною поправкою Грімме в межах валентного наближення з ефективним остовним потенціалом SBKJCS, було змодельовано міжмолекулярну взаємодію молекули цисплатину та амінокислот, які найбільш поширені в складі альбуміну.

Енергія міжмолекулярної взаємодії розраховувалась за формулою:

$$\Delta E = E_{tot} ([Pt(NH_3)_2Cl_2] \cdots A_m A_c) - (E_{tot} ([Pt(NH_3)_2Cl_2]) - E_{tot}(A_m A_c)),$$

де  $E_{tot} ([Pt(NH_3)_2Cl_2] \cdots A_m A_c)$  – повна енергія міжмолекулярного комплексу цисплатину з відповідною амінокислотою,  $E_{tot} ([Pt(NH_3)_2Cl_2])$  – повна енергія молекули цисплатину,  $E_{tot}(A_m A_c)$  – повна енергія відповідної молекули амінокислоти.

При моделювання припускається, що цисплатин взаємодіє з гідрофільними амінокислотними залишками альбуміну, а гідрофобні – є малодоступні для взаємодії з молекулою цисплатину. Тому, виходячи з будови альбуміну [4] було обрано шість амінокислот, функціональні групи яких, найбільш ймовірно можуть взаємодіяти з цисплатином (аргінін ARG, глутамін GLN, лізин LYS, аспарагінова кислота ASP, серин SER, цистеїн CIS).

**Таблиця**

Розраховані величини енергії міжмолекулярної взаємодії молекули цисплатину з обраними амінокислотами

| Амінокислота          | ARG    | GLN    | LYS   | ASP   | SER   | CYS   |
|-----------------------|--------|--------|-------|-------|-------|-------|
| $\Delta E$ (кДж/моль) | -128.9 | -131.5 | -82.4 | -92.6 | -69.8 | -33.4 |

З даних таблиці видно, що найменша енергія міжмолекулярної взаємодії характерна для комплексу цисплатин–цистеїн (-33,4 кДж/моль). А найбільше її значення виявлено для комплексу цисплатин–глутамін (-131,5 кДж/моль) та для комплексу цисплатин–аргінін (-128,9 кДж/моль), що свідчить про найбільшу ймовірність взаємодії цисплатину з амінокислотними залишками глутаміну і аргініну в складі білка альбуміну.

Будова цих міжмолекулярних комплексів зображена на рисунку 1. Як видно з рисунку, обидві амінокислоти в своєму складі мають аміногрупи, які беруть участь у формуванні міжмолекулярного комплексу. Відстань між атомами водню молекули аргініну і атомами хлору цисплатину становить 2,45 і 2,57 Å, а для комплексу цисплатин–глутамін ця величина незначно менша і становить 2,38 Å. Крім цього для останнього комплексу наявний водневий зв'язок між атомом кисню карбонільної групи глутаміна і атомом водню молекули цисплатину.

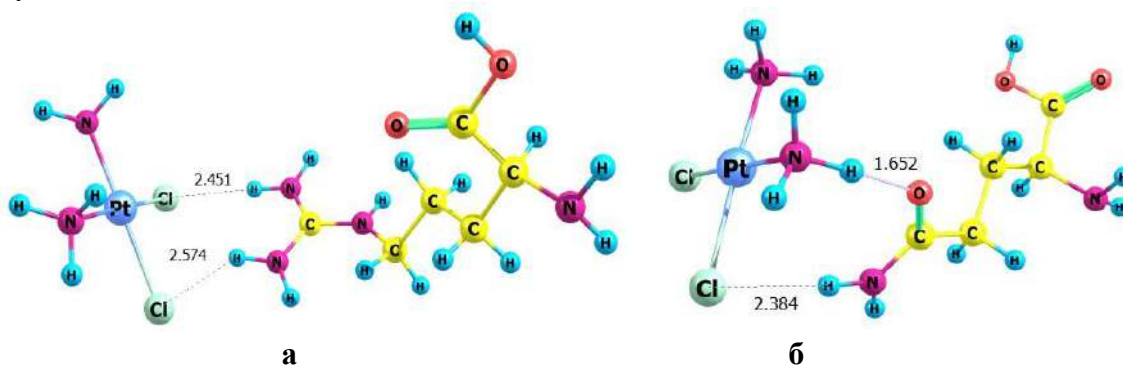


**Рис. 1.** Будова міжмолекулярних комплексів, енергії взаємодії яких є найбільшими:  
а – комплекс цисплатин–аргінін, б – комплекс цисплатин–глутамін.

Отже, аналіз результатів квантовохімічних розрахунків свідчить, що цисплатин з найбільшою ймовірністю взаємодіє з амінокислотними залишками глутаміну та аргініну у структурі білка альбуміну.

1. Левченко О.Є., Першко Н.Ю., Сидоренко М.В. Свідоцтво про реєстрацію права на твір, Україна, №108568. Комп'ютерна програма "Програма автоматизов. обробки даних "SPECTRA TRIO".

2. Першко Н.Ю., Левченко О.Є., Пономарьова О.В., Червинський І.С., Сидоренко М.В. Патент на корисну модель №152091 "Спосіб визначення зв'язування хіміопрепаратів з альбуміном", опубл. 26.10.2022, Бюл. № 43, Україна.

3. Barca G., Bertoni C., Carrington L. et al. Recent developments in the general atomic and molecular electronic structure system - *J. Chem. Phys.* – 2020. – V. 152. – P. 154102-1–154102-26.

4. Sugio S., Kashima A., Mochizuki S., Noda M., Kobayashi K. Crystal structure of human serum albumin at 2.5 Å resolution - *Protein Engineering* – 1999 - V. 12 (6). – P. 439 –446.

## СИНЕРГІЯ КРЕМНЕЗЕМУ ТА ДОПОМІЖНИХ РЕЧОВИН У СКЛАДІ ГЕЛЕПОДІБНИХ ДІЄТИЧНИХ ДОБАВОК СОРБЦІЙНОЇ ДІЇ

*Сіора І.В., Геращенко І.І.*

Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка НАН України, [siora@ukr.net](mailto:siora@ukr.net)

Ентеросорбенти на основі високодисперсного кремнезему ( $\text{SiO}_2$ ), серед яких зокрема «Атоксіл» і «Біле вугілля», посідають належне місце на фармацевтичному ринку України. В основі лікувальної дії цих препаратів лежить насамперед надзвичайно висока білоксорбційна здатність, адже відомо, що значна частина токсинів у шлунково-кишковому тракті пов'язана з білками або мають білкове походження. Для контролю білоксорбційної активності ентеросорбентів запропоновано визначати величину адсорбції (мг/г) харчової желатини – цей кількісний тест увійшов до Методичних рекомендацій МОЗ України (2010 р.).

Останнім часом поряд із порошкоподібною формою набувають популярності суспензії та гелі на основі  $\text{SiO}_2$ , наприклад, «Атоксіл гель». Нещодавно компанії ТОВ «Біосил» і ТОВ «Київфармгруп» вийшли на ринок із власними гелеподібними дієтичними добавками на основі діоксиду кремнію. Вважається, що гелеподібна форма дозволяє покращити органолептичні характеристики завдяки введенню смакових та ароматичних добавок, а також є зручнішою для застосування дітьми. Як гелеутворюючий компонент, або загущувач, до складу гелів вводять високомолекулярні гідрофільні полісахариди – альгінат натрію (E401), натрій карбоксиметилцелюлозу (Na-КМЦ, E466) тощо.

Під час проведення фізико-хімічних і фармако-технологічних досліджень згаданих гелів було встановлено, що за білоксорбційною активністю (у перерахунку на  $\text{SiO}_2$ ) вони у декілька разів перевершують власне діоксид кремнію, тобто можна припустити існування специфічної синергії між сорбентом та допоміжними речовинами. Особливо виразно цей ефект проявляється у гелях серії «Абітокс» (ТОВ «Біосил», Вінницька обл, с. Махнівка) (табл. 1). Так, за адсорбцією желатини осаджений кремнезем марки А500, що є діючою речовиною «Абітоксу», значно поступається пірогенному кремнезему А300. Це пояснюється тим, що велика питома поверхня кремнеземів, синтезованих методом осадження, зумовлена їхньою пористою структурою, на відміну від пірогенних кремнеземів, які є високодисперсними непористими сорбентами. Як результат, внутрішній об'єм мікропор кремнезему А500 залишається недоступним для великих молекул желатини. Але у складі гелю кремнезем А500 за білоксорбційною активністю майже у 10 разів перевершує індивідуальну субстанцію, що очевидно є проявом синергетичного ефекту.

**Таблиця 1**

Білоксорбційна активність різних ентеросорбентів на основі  $\text{SiO}_2$

| Ентеросорбент,<br>виробник          | Марка діоксиду кремнію,<br>спосіб його одержання                                                         | Адсорбція желатини, мг/г                |                                                           |
|-------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------|-----------------------------------------------------------|
|                                     |                                                                                                          | для індивіду-<br>ального $\text{SiO}_2$ | у перерахунку на<br>вміст $\text{SiO}_2$<br>у складі гелю |
| Атоксіл гель,<br>ТОВ «Орісіл-Фарм»  | А300, пірогенний,<br>питома поверхня $\sim 300 \text{ м}^2/\text{г}$                                     | 240–300                                 | 702                                                       |
| Гель сорбент, ТОВ<br>«Київфармгруп» |                                                                                                          |                                         | 711                                                       |
| Абітокс,<br>ТОВ «Біосил»            | А500, осаджений, одержаний за<br>безфторидною технологією,<br>питома поверхня $540 \text{ м}^2/\text{г}$ | 64                                      | 610                                                       |
| Абітокс Плюс,<br>ТОВ «Біосил»       |                                                                                                          |                                         | 662                                                       |



Для з'ясування, які саме інгредієнти спричиняють синергетичний ефект, нами проведено визначення білоксорбційної активності різних комбінацій цих інгредієнтів, узятих у такому ж співвідношенні, що й у складі гелів. Визначення здійснювали за адсорбцією желатини («желатиновий тест»). Стандартизована методика полягає у перемішуванні 80 мг сорбенту з 10 мл 0,6 % розчину харчової желатини протягом 2 год з наступним вимірюванням залишкової концентрації білка біуретовим методом спектрофотометрично, при  $\lambda = 554$  нм. За різницею між вихідною та залишковою концентраціями желатини розраховували показник білоксорбційної активності, мг/г. Результати наведені в табл. 2 і 3.

**Таблиця 2**

Вплив допоміжних речовин на білоксорбційну активність гелів «Абітокс»

| № | A500, мг | Сорбат калію, мг | Альгінат натрію, мг | Лимонна кислота, мг | Адсорбція желатини, мг/г |
|---|----------|------------------|---------------------|---------------------|--------------------------|
| 1 | 80       | -                | -                   | -                   | 64                       |
| 2 | 80       | 6,7              | -                   | -                   | 90                       |
| 3 | 80       | -                | 23                  | -                   | 266                      |
| 4 | 80       | 6,7              | 23                  | -                   | 250                      |
| 5 | 80       | 6,7              | 23                  | 5                   | 620                      |

Як видно, індивідуальний кремнезем А500 демонструє невисоку білоксорбційну здатність. Додавання сорбату калію, який виконує функцію антимікробного консерванту (склад 2), дає незначний приріст адсорбції желатини порівняно з вихідним А500. Після додавання загущувача – альгінату натрію, досягається суттєве, майже вчетверо, збільшення білоксорбційної активності (склад 3). Поєднання А500, альгінату натрію та сорбату калію (склад 4) дає ефект, близький до активності комбінації зі складом 3. Проте, подальше введення лимонної кислоти призводить до різкого збільшення показника адсорбційної здатності (склад 5). Таким чином, можна припустити, що при взаємодії  $\text{SiO}_2$  з альгінатом натрію утворюється комплекс з великим числом центрів зв'язування білка, яке зростає далі у кислому середовищі після додавання лимонної кислоти.

**Таблиця 3**

Білоксорбційна активність окремих інгредієнтів і їх комбінацій для «Гелю сорбенту»

| № | A300, мг | Інулін, мг | КМЦ, мг | Адсорбція желатини, мг/г |
|---|----------|------------|---------|--------------------------|
| 1 | 80       | -          | -       | 253                      |
| 2 | -        | -          | 80      | 107                      |
| 3 | 80       | 25         | -       | 225                      |
| 4 | 80       | -          | 20      | 626                      |

Для «Гелю сорбенту» (ТОВ «Київфармгруп») також виявлено синергетичний ефект після введення полісахариду Na-КМЦ: білоксорбційна активність у перерахунку на  $\text{SiO}_2$  збільшується у 2,5 рази (табл. 3). Індивідуальна субстанція Na-КМЦ формує густий гель, який можна видалити центрифугуванням, проте його здатність зв'язувати желатину незначна. Додавання пребіотику інуліну не сприяє адсорбції желатини. Отже, в обох випадках – як для гелів «Абітокс», так і для «Гелю сорбенту» – полісахаридні інгредієнти відіграють ключову роль у підвищенні показника білоксорбційної активності.

Достовірність отриманих результатів підтверджується аналізом спектрів поглинання продукту взаємодії білка з біуретовим реактивом: в усіх випадках спектри мають симетричну будову, з чітким максимумом близько 554 нм, що свідчить про відсутність сторонніх речовин, здатних впливати на результати вимірювань.

Таким чином, комплексний підхід до розробки гелеподібних ентеросорбентів на основі кремнезему, що передбачає оптимізацію складу з урахуванням взаємодії основного сорбенту та допоміжних речовин, дозволяє значно підвищити білоксорбційну активність препарату. Це відкриває перспективи для створення ефективніших засобів для виведення токсинів з організму та розширення асортименту сучасних фармацевтичних продуктів.

## СИНЕРГЕТИЧНИЙ ВПЛИВ L – КАРНІТИНУ І L – АРГІНІНУ У РЕГУЛЯЦІЇ МЕТАБОЛІЧНИХ ПРОЦЕСІВ ЛЮДСЬКОГО ОРГАНІЗМУ

*Скорейко Р.С.<sup>1</sup>, Скорейко Н.Т.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>ЗВО «Рівненська медична академія», [omast@i.ua](mailto:omast@i.ua)

<sup>2</sup>КП Рівненська обласна клінічна лікарня

Сьогодні захворювання щитоподібної залози спостерігають у 10% дорослого населення світу. У переважній більшості таких пацієнтів спостерігаються значні зміни у концентрації тиреоїдних гормонів, які відіграють значну роль у регуляції метаболічних процесів людського організму, особливо серцево-судинної системи. З'ясовано, що зміни концентрації тиреоїдних гормонів зумовлюють зростання у 2-3 рази кардіальної патології та у 2 рази поширення смертності пацієнтів. Показано, що тиреоїдна дисфункція впливає на серцево-судинну систему згідно чисельних механізмів, а саме: дисліпідемії, порушення енергетичного обміну, артеріальної гіпертензії та інших. Важливе значення має також ішемія та гіпоксія міокарда, що призводить до порушення балансу між радикальним окисленням та антиоксидантним захистом, який можна усунути лікарськими препаратами.

З'ясовано, що відповідне лікування навіть незначної патології щитоподібної залози та нормалізація показників тиреоїдних гормонів, призведе до попередження серцево-судинних ускладнень. Зважаючи на те, що зміни у концентрації гормонів щитоподібної залози викликають зміни у функціонуванні інших органів та систем людського організму, непотрібно обмежуватися лише корекцією тиреоїдних гормонів. Особливо це стосується процесів енергетичного обміну [1]. Сприяти поліпшенню енергетичного обміну можна за використання комбінації двох біологічно-активних сполук L-карнітину та L-аргініну, синергетична взаємодія яких проявлятиметься у поліпшенні забезпечення енергією серцевого м'яза, посиленню окислення вуглеводів і поліпшенням антиоксидантних цитопротекторних і антигіпоксичних властивостей, і як результат, покращення ендотеліальної функції.

Карнітин – природна низькомолекулярна сполука, похідна вітамінів групи В. Синтезується в організмі людини ендогенним синтезом з незамінних амінокислот лізину та метіоніну. За хімічним складом карнітин [3-гідрокси-4-(N-триметиламоніо)-бутаноат] є амфотерною сполукою, що містить катіонну триметиламонієву групу та аніонну гідроксильну групу. У людському організмі близько 80-85% карнітину міститься у вільному стані у плазмі [2]. Головна фізіологічна роль L-карнітину – забезпечення транспорту довголанцюгових жирних кислот у мітохондрії, де відбувається їхнє β-окиснення з подальшим утворенням енергії (АТФ) [2,3]. Крім того, L-карнітин відіграє важливу роль у різних стадіях проміжного метаболізму. Це означає, що карнітин, з одного боку, є основною частиною катаболізму жирних кислот у мітохондріях, з іншого, що він тісно пов'язаний з ацетил-КоА в різних органелах клітини. Тому ацетил-L-карнітин можна вважати «другою формою активованої оцтової кислоти», ацетильний буфер або депо ацетильних груп. [3] Необхідна організму енергія утворюється у процесі метаболізму вуглеводів, жирів та білків, іншими словами в результаті ланцюга метаболічних процесів, у ході яких утворюється ацетил-КоА. Ацетил-КоА необхідний синтезу інших ацетильованих сполук, холестерину і кетонів, для ресинтезу жирних кислот, як субстрат циклу лимонної кислоти (циклу Кребса). Також, карнітин сприяє переміщенню жирних кислот до мітохондрій, прискорюючи таким чином метаболізм жирів в організмі.

Аргінін (σ-гуанідин-α-амінопропанова кислота) – умовно незамінна амінокислота і є регулятором важливих функцій [2,3]. Існує у вигляді L і D ізомерів. Входить до складу білків, амінокислот. Аргінін відіграє суттєву роль у синтезі ряду гормонів, а саме: соматотропного гормону, глюкагону, інсуліну.

Встановлено, що вплив гормонів щитоподібної залози пов'язаний з метаболізмом L – аргініну та синтезом нітроген(II) оксиду для забезпечення певних властивостей серцево-судинної системи. Встановлено кореляцію між значеннями тиреотропного гормону і

нітроген(II) оксиду. Згідно літературних даних з'ясовано, що рівень нітроген(II) оксиду виступає біохімічним маркером захворювань щитоподібної залози.

Отже, використання L – карнітину і L – аргініну зумовлюють синергетичний вплив для корекції факторів кардіоваскулярного ризику при порушеннях функції щитоподібної залози, забезпечуючи підвищення життєдіяльності міокарда, покращуючи при цьому якість життя пацієнтів.

1. Зініч О.В. Неохоплені механізми кардіопротекції при тереїдній дисфункції. *Український медичний часопис*. - 2023. - Т.1 № 1 (153) - С. 43-48.

2. Мехед О. Б., Яковенко Б. В., Третяк О. П. М 55 Біоорганічна хімія: Навчальний посібник. – Чернігів: Чернігівський національний педагогічний університет імені Т. Г. Шевченка -2013. – 208 с.

3. Біологічна і біоорганічна хімія: у 2 книгах. Книга 1. Біоорганічна хімія: підручник / Б.С. Зіменковський, В.А. Музиченко, І.В. Ніженковська та ін. - 3-є видання

### **ЗАСТОСУВАННЯ СИНТЕТИЧНИХ ПОХІДНИХ ПРИМІДИНУ ДЛЯ ІНТЕНСИФІКАЦІЇ ПРОЦЕСУ ФОТОСИНТЕЗУ У РОСЛИН СОРГО ЦУКРОВОГО**

*Циганкова В.А., Василенко Н.М., Андрусевич Я.В., Коніч В.М., Пільо С.Г., Броварець В.С.*

Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря НАН України, [vtsygankova@ukr.net](mailto:vtsygankova@ukr.net)

Сорго цукрове (*Sorghum saccharatum* L.) є важливою для аграрної галузі України зерновою та технічною культурою. Вельми актуальним питанням є розробка нових ефективних регуляторів росту рослин для поліпшення росту цієї культури протягом періоду вегетації та підвищення її урожайності в умовах глобальних кліматичних змін [1].

На сьогодні перспективним напрямком є розробка нових регуляторів росту рослин на основі синтетичних низькомолекулярних азагетероциклічних сполук, похідних піримідину. Найбільш відомими представниками цього класу сполук є синтетичні сполуки, похідні натрієвої і калієвої солей 6-метил-2-меркапто-4-гідроксипіримідину (Метіур і Каметур), які виявляють подібний природним фітогормонам ауксином та цитокінінам вплив на ріст та розвиток рослин протягом періоду вегетації, активують процеси фотосинтезу в листках рослин та підвищують їх врожайність [2-4]. Поряд із дослідженням цих відомих сполук, проводиться також скринінг нових синтетичних низькомолекулярних азагетероциклічних сполук, похідних піримідину, які виявляють подібну ауксином та цитокінінам регуляторну активність на рослинах [5, 6].

Метою даної роботи є вивчення впливу синтетичних низькомолекулярних азагетероциклічних сполук, похідних піримідину на біосинтез фотосинтетичних пігментів у рослинах сорго цукрового (*Sorghum saccharatum* L.) сорту Силосне 42, вирощеної у лабораторних умовах протягом періоду вегетації. З цією метою досліджувались синтетичні сполуки, похідні піримідину, синтезовані в Інституті біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря НАН України, такі як натрієва і калієва солі 6-метил-2-меркапто-4-гідроксипіримідину (Метіур і Каметур), а також нові синтетичні сполуки № 1 – 7, хімічні структури яких детально описані у нашій раніше опублікованій роботі [5]. Для дослідження регуляторної активності, синтетичні сполуки, похідні піримідину застосовували у концентрації  $10^{-6}$  М для обробки насіння сорго протягом 48-ми годин. Насіння контрольних рослин сорго оброблювали дистильованою водою. Порівняльний аналіз вмісту фотосинтетичних пігментів у листках рослин сорго цукрового (*Sorghum saccharatum* L.) сорту Силосне 42, вирощених у лабораторних умовах протягом 3-х тижней, проводили згідно методики [7].

Проведені дослідження показали, що синтетичні сполуки, похідні піримідину № 1 -7, виявляють подібний синтетичним сполукам, похідним натрієвої і калієвої солей 6-метил-2-

меркапто-4-гідроксипіримідину (Метіур і Каметур) вплив на біосинтез фотосинтетичних пігментів в листках рослин сорго цукрового (*Sorghum saccharatum* L.) сорту Силосне 42.

Під впливом синтетичних сполук, похідних натрієвої і калієвої солей 6-метил-2-меркапто-4-гідроксипіримідину (Метіуру та Каметуру) вміст фотосинтетичних пігментів у листках рослин сорго підвищувався, відповідно, хлорофілу а: на 11,97 % - під впливом Метіуру, на 15,53 % - під впливом Каметуру; хлорофілу б: на 11,71% - під впливом Метіуру, на 19,82 % - під впливом Каметуру; хлорофілів а+б: на 11,9 % - під впливом Метіуру, на 16,65 % - під впливом Каметуру; каротиноїдів: на 7,59 % - під впливом Метіуру, на 10,7 % - під впливом Каметуру, порівняно з контрольними рослинами.

Найвищу активність за показниками вмісту фотосинтетичних пігментів в листках 3-х тижневих рослин серед досліджених синтетичних сполук виявили синтетичні сполуки, похідні піримідину № 2, 3, 5 та 7, під впливом яких міст фотосинтетичних пігментів у листках рослин сорго підвищувався, відповідно, хлорофілу а: на 25,6–33,24 %; хлорофілу б: на 43,66–72,68 %; хлорофілів а+б: на 34,57–40,24 %; каротиноїдів: на 4,41–36,53 %, порівняно з контрольними рослинами.

Меншу активність за показниками вмісту фотосинтетичних пігментів в листках рослин виявили синтетичні сполуки, похідні піримідину № 1, 4 та 6, під впливом яких міст фотосинтетичних пігментів у листках рослин сорго підвищувався, відповідно, хлорофілу а: на 19,17–19,63 %, хлорофілу б: на 25,22–44,71 %, хлорофілів а+б: на 20,74–26,07 %, каротиноїдів: на 4,22–15,51 %, порівняно з контрольними рослинами.

Отримані дані свідчать про перспективу практичного застосування синтетичних сполук, похідних 6-метил-2-меркапто-4-гідроксипіримідину натрієвої та калієвої солей (Метіуру та Каметуру) та найбільш біологічно активних сполук, похідних піримідину № 2, 3, 5 та 7 для інтенсифікації процесу фотосинтезу у рослинах сорго цукрового (*Sorghum saccharatum* L.) сорту Силосне 42 протягом періоду вегетації.

1. Аверчев А.В., Осінній А.О. Сучасний стан та перспективи вирощування сорго в умовах зміни клімату півдня України. Стратегічні напрями соціально-економічного розвитку аграрного сектору економіки України: Колективна монографія / за заг. редакцією А.В. Руснак. Херсон: ТОВ «ВКФ «СТАР» ЛТД». - 2017. - С. 341–348.

2. Tsygankova V.A., Voloshchuk I.V., Kopich V.M., Pilyo S.G., Klyuchko S.V., Brovarets V.S. Studying the effect of plant growth regulators Ivin, Methyur and Kamethur on growth and productivity of sunflower. *Journal of Advances in Agriculture*. - 2023. - N 14. - P. 17–24. DOI:

3. Tsygankova V.A., Kopich V.M., Vasylenko N.M., Golovchenko O.V., Pilyo S.G., Malienko M.V., Brovarets V.S. Increasing the productivity of wheat using synthetic plant growth regulators Methyur, Kamethur and Ivin. *Znanstvena misel journal*. - 2024. - N 94. - P. 22 - 26.

4. Tsygankova V.A., Voloshchuk I.V., Pilyo S.H., Klyuchko S.V., Brovarets V.S. Enhancing Sorghum Productivity with Methyur, Kamethur, and Ivin Plant Growth Regulators. *Biology and Life Sciences Forum*. - 2023. - Vol. 27, - N 1. - P. 36.

5. Tsygankova V.A., Kopich V.M., Vasylenko N.M., Andrusevich Ya.V., Pilyo S.G., Brovarets V.S. Phytohormone-like effect of pyrimidine derivatives on the vegetative growth of haricot bean (*Phaseolus vulgaris* L.). *Polish Journal of Science*. - 2024. - Vol. 1, - N 71. - P. 6–13.

6. Tsygankova V.A., Andrusevich Ya.V., Vasylenko N.M., Kopich V.M., Solomyannyi R.M., Popilnichenko S.V., Kozachenko O.P., Pilyo S.G., Brovarets V.S. The use of thioxopyrimidine derivatives as new regulators of growth and photosynthesis of barley. *J Plant Sci Phytopathol*. - 2024. - 8(2): 090-099.

7. Lichtenthaler H. Chlorophylls and Carotenoids: Pigments of Photosynthetic Biomembranes *Methods Enzymol*. - 1987. - Vol. 148. - P. 331-382.

## ВИЗНАЧЕННЯ ВІДНОВЛЮВАЛЬНОЇ ЗДАТНОСТІ ЕКСТРАКТІВ ПРОПОЛІСУ З ВИКОРИСТАННЯМ ІОНІВ ФЕРУМУ

*Шевчук К.Р.<sup>1</sup>, Гордєєва І.О.<sup>1,2</sup>, Куц О.В.<sup>1,2</sup>, Шендрік О.М.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Донецький національний університет імені Василя Стуса, [shevchuk-k@donnu.edu.ua](mailto:shevchuk-k@donnu.edu.ua)

<sup>2</sup>Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України

Прополіс є продуктом бджільництва, що складається з смолистої речовин бруньок рослин, квіткового пилку та секретів залоз бджоли. Він використовується у народній медицині з давніх часів через його протипухлинну, антиоксидантну, протимікробну, протизапальну, протидіабетичну, анестезуючу та імунологічну дію. Біологічні властивості прополісу обумовлені комплексом хімічних сполук, що входять до його складу, перш за все наявності поліфенолів – флавоноїдів та фенольних кислот. Вони відіграють важливу роль у захисті організму від оксидативного стресу завдяки своїм антиоксидантним властивостям. Їх здатність до передачі електронів може не тільки знешкоджувати вільні радикали та активні форми кисню, але також зменшувати ступінь окислення металів. Відновна здатність поліфенолів є важливим показником їхньої антиоксидантної ефективності і вимірюється через окисно-відновні реакції з різними іонами металів, такими як ферум, купрум, хром і церій.

Вивчення відновлювальної здатності поліфенолів прополісів, зокрема у взаємодії з йонами феруму, є актуальним для фармакології, харчової промисловості та медицини, адже антиоксиданти здатні запобігати розвитку багатьох захворювань, спричинених вільними радикалами. Розробка методів оцінки таких властивостей сприяє пошуку ефективних антиоксидантів у природних джерелах та оптимізації їх використання.

Загальну антиоксидантну здатність неферментативних і нехелатних антиоксидантів можна виміряти за допомогою їх відновлення  $\text{Fe}^{3+}$  за наявності стехіометричних кількостей хромогенних лігандів, що утворюють комплекси з  $\text{Fe}^{2+}$ , наприклад феріціаніду калію або 2,4,6-трипіридил-s-тріазину (TPTZ). У ході реакції  $\text{Fe}^{2+}$  з феріціанідом калію утворюється берлінська лазурь, кількість якої визначається спектрофотометрично за 750 нм (рисунок 1) та вказує на відновну здатність досліджуваних антиоксидантів. У феріціанідному методі, як стандарт, використовуємо тролокс (6-гідрокси-2,5,7,8-тетраметилхроман-2-карбонова кислота), який є водорозчинним аналогом вітаміну Е. Еквівалентна антиоксидантна здатність тролокса (TEAC) – це визначення антиоксидантної ємності певної сполуки порівняно із стандартом тролоксом, що вимірюється в одиницях, які називаються еквівалентами тролокса (TE).

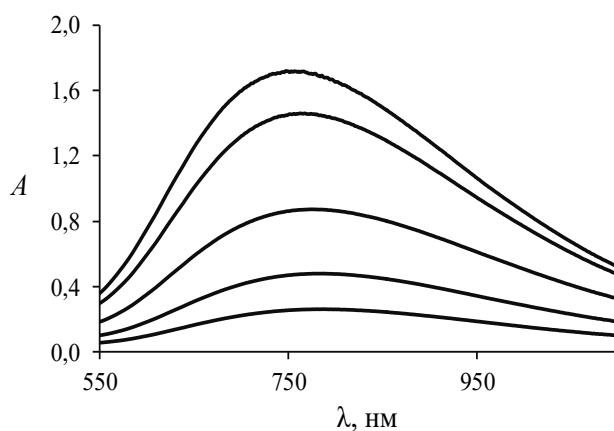


**Рис.1.** Оглядові спектри феріціаніду калію з  $\text{Fe}^{2+}$  при додаванні тролоксу в діапазоні концентрацій 0,125 – 1,0 мМ.

Метод з використанням TPTZ ґрунтується на окисно-відновній реакції, де  $\text{Fe}^{3+}$  відновлюється до  $\text{Fe}^{2+}$  за участі антиоксидантів етанольного екстракту прополісу. Утворений  $\text{Fe}^{2+}$  зв'язується з TPTZ, утворюючи інтенсивно забарвлений комплекс із максимумом поглинання за 593 нм (рисунок 2). Інтенсивність забарвлення прямо пропорційна концентрації відновленого  $\text{Fe}^{2+}$ , що дозволяє оцінити відновлювану здатність зразка.

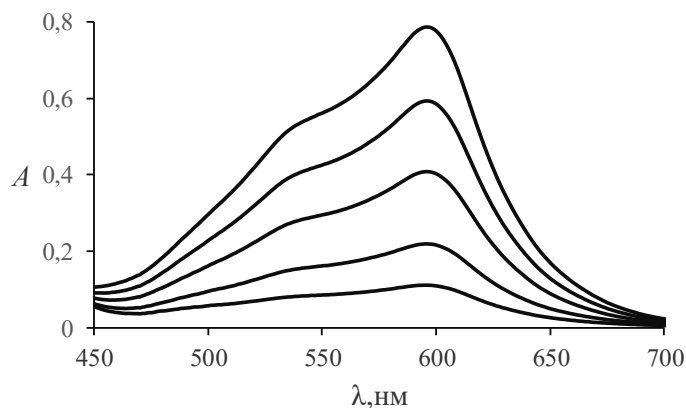


**Рис.2.** Оглядові спектри комплексу TPTZ з  $\text{FeSO}_4$  в діапазоні концентрацій 0,125 – 1,0 мМ.

Ферриціанідний метод демонструє різний рівень відновлюваної здатності зразків прополісу із різних регіонів України. Найвищу активність показали зразки з Львівщини, Івано-Франківщини і Тернопільщини тоді як найменшу – з Вінниччини і Донецчини. Метод FRAP підтверджує, що найвищу відновлювальну здатність мають зразки із західних регіонів України, тоді як найнижчу – зі східних.

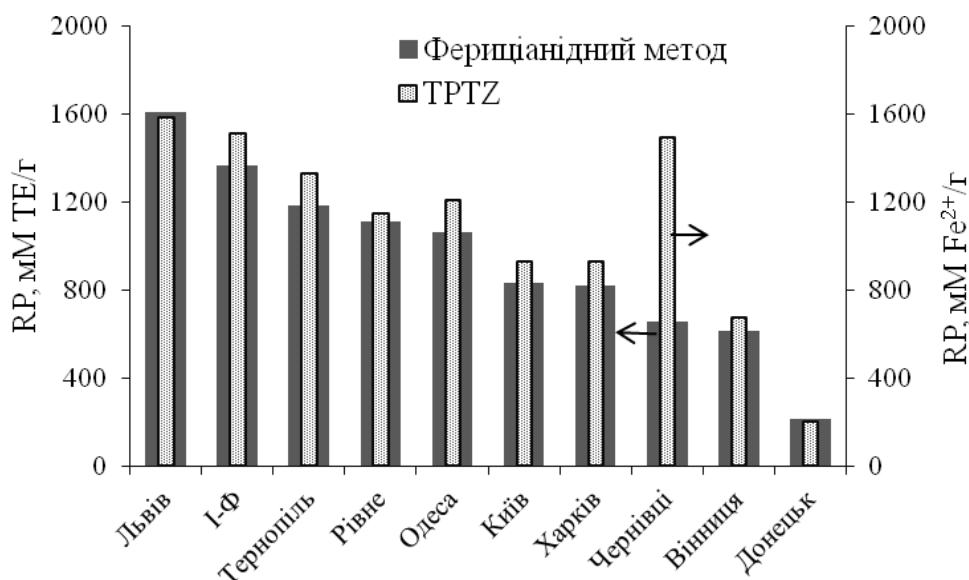


**Рис. 3.** Відновлювальна властивість етанольних екстрактів прополісів з різних регіонів України фериціанідним методом і TPTZ.

Результати демонструють регіональні відмінності у складі біологічних зразків, що може бути корисним для подальшого дослідження природних антиоксидантів. Ці результати свідчать про вплив кліматичних факторів на склад досліджуваних біологічних зразків.



**ОРГАНІЧНА ХІМІЯ,  
ХІМІЯ ВИСОКОМОЛЕКУЛЯРНИХ  
СПОЛУК**

## APPLICATION OF COMPOSITE MATERIALS BASED ON MANGANESE AND TITANIUM OXIDES FOR THE DEGRADATION OF POLYETHYLENE FILMS

*Gayuk N.V., Tsekhmistrenko S.I., Mykhailenko O.V., Yakhnovska O.V.*

Білоцерківський національний аграрний університет, [gayukn\\_14@ukr.net](mailto:gayukn_14@ukr.net)

The extensive utilization of polyethylene as a packaging material necessitates the development of efficient degradation methodologies to mitigate environmental concerns. Among the various degradation strategies, photocatalytic degradation emerges as a highly promising and sustainable approach, as it facilitates polymer mineralization without the formation of toxic by-products.

Titanium (IV) oxide ( $\text{TiO}_2$ ) has been extensively employed as a photocatalyst due to its stability and strong oxidative properties; however, its photocatalytic efficiency is constrained by its wide bandgap ( $\sim 3.2$  eV), which limits its activity to the ultraviolet spectrum. The incorporation of manganese oxides ( $\text{MnOx}$ ) into the  $\text{TiO}_2$  matrix facilitates the formation of heterojunctions, improving charge carrier separation and transfer while enhancing the quantum efficiency of photocatalytic reactions. Furthermore,  $\text{MnOx}$  doping induces modifications in the valence and conduction bands of  $\text{TiO}_2$ , extending its spectral response into the visible light region ( $\lambda > 400$  nm), thereby augmenting its photocatalytic potential. The synergistic interactions between  $\text{MnOx}$  and  $\text{TiO}_2$  contribute to an increased density of reactive oxygen species (ROS), including hydroxyl radicals ( $\bullet\text{OH}$ ), superoxide anions ( $\text{O}_2^{\bullet-}$ ), and hydrogen peroxide ( $\text{H}_2\text{O}_2$ ), which drive the oxidative degradation of polyethylene. Additionally, recent advances in theoretical modeling and density functional theory (DFT) calculations offer critical insights into the electronic interactions governing catalyst performance, enabling the rational design of next-generation  $\text{MnOx}/\text{TiO}_2$  nanocomposites. Research efforts also focus on the optimization of nanoparticle morphology, surface functionalization, and dopant concentration to enhance charge carrier mobility and suppress recombination losses, thereby improving the overall photocatalytic efficiency [2, 3].

The synthesis of  $\text{MnOx}/\text{TiO}_2$  composite materials was performed via co-precipitation, followed by thermal treatment at  $450\text{--}600$  °C to achieve controlled crystallization and phase stabilization. Structural characterization was conducted using X-ray diffraction (XRD) to confirm the formation of the anatase  $\text{TiO}_2$  phase and the presence of  $\text{MnOx}$  species in various oxidation states [4]. The surface morphology and elemental distribution were analyzed via scanning electron microscopy (SEM) and energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS), respectively. Optical absorption properties were assessed using UV-Vis diffuse reflectance spectroscopy (DRS) to determine the extent of bandgap modulation induced by  $\text{MnOx}$  incorporation. Polyethylene degradation kinetics were monitored through Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR), which enabled tracking of carbonyl group formation, and gel permeation chromatography (GPC), which provided molecular weight distribution data. Additionally, the quantification of ROS generation was performed using electron paramagnetic resonance (EPR) spectroscopy, allowing a detailed examination of radical species dynamics. To gain deeper mechanistic insights, time-resolved photoluminescence (TRPL) spectroscopy was employed to assess charge carrier lifetimes, elucidating recombination pathways that govern photocatalytic efficiency. Stability assessments of the composite catalysts were conducted over multiple degradation cycles to evaluate their long-term usability in practical applications [1].

The synthesized  $\text{MnOx}/\text{TiO}_2$  composites exhibited a redshift in their absorption spectra, with the absorption edge extending into the visible region by  $20\text{--}30$  nm, confirming the enhanced light-harvesting ability [5]. The generation of ROS, quantified via EPR spectroscopy, demonstrated a notable increase in hydroxyl radical concentrations, reinforcing the catalytic efficacy of the composites in polyethylene degradation. Kinetic analyses revealed that the degradation rate of polyethylene films in the presence of  $\text{MnOx}/\text{TiO}_2$  was approximately 60% higher compared to pristine  $\text{TiO}_2$ , with a corresponding 50 % reduction in molecular weight after 100 hours of UV exposure. High-resolution X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) indicated dynamic shifts in Mn

oxidation states during photocatalysis, suggesting the involvement of Mn(III)/Mn(IV) redox cycles in enhancing electron transport processes. Advanced microscopic studies using atomic force microscopy (AFM) provided insights into surface roughness and porosity alterations post-degradation, further corroborating the effectiveness of the catalyst. Furthermore, environmental simulation studies, including variable humidity and light intensity conditions, affirmed the robustness of MnO<sub>x</sub>/TiO<sub>2</sub> nanocomposites under real-world application scenarios, demonstrating consistent catalytic performance across diverse operational environments. A key finding was the superior recyclability of MnO<sub>x</sub>/TiO<sub>2</sub>, which retained over 85% of its initial catalytic efficiency after five successive degradation cycles, confirming its viability for large-scale implementation [6].

The integration of MnO<sub>x</sub> into TiO<sub>2</sub> has proven to be a viable strategy for extending the photocatalytic activity of TiO<sub>2</sub> into the visible range and enhancing charge carrier separation efficiency. The experimental findings substantiate the high efficacy of MnO<sub>x</sub>/TiO<sub>2</sub> nanocomposites in promoting the oxidative degradation of polyethylene films, achieving significant reductions in polymer molecular weight and facilitating the breakdown of complex macromolecular structures. The mechanistic elucidation provided by spectroscopic and computational analyses underscores the pivotal role of Mn-induced electronic modifications in augmenting photocatalytic performance. Future research directions will prioritize the development of hierarchical MnO<sub>x</sub>/TiO<sub>2</sub> architectures with tunable mesoporous structures to further optimize charge carrier dynamics and reaction kinetics. Additionally, efforts will be made to scale up synthesis protocols and integrate these composites into continuous-flow photoreactors for industrial waste treatment applications. Investigating synergistic hybridization with enzymatic or microbial degradation approaches may also offer novel avenues for achieving a comprehensive and sustainable polyethylene waste management strategy.

1. Гаюк Н.В., Михайленко О.В., Селезнева О.О. Деструкція поліетиленових плівок, композитними матеріалами на основі оксидів Мангану та Титану. Екологія, охорона навколишнього середовища та збалансоване природокористування: освіта – наука – виробництво: мат. міжн. наук.-практ. конф. 26 жовтня 2023 р. Біла Церква, 74-76.

2. Гетьманчук Ю.П., Братичак М.М. Хімія та технологія полімерів. Львів: Бескид Біт. – 2006. - 495 с.

3. Кравцов В.С., Кравцов О.В., Бурмістр М.В. Хімія і фізика високомолекулярних сполук. Дніпропетровськ: УДХТУ. - 2002. - 560.

4. Cheng J., Wang X., Shi G., Zhang S., Zhou Y., Cui Y. Green synthesis of Bio-CuS quantum dots by sulfate reducing bacteria for solid-phase photocatalytic degradation of polyethylene film. - *Separation and Purification Technology*. – 2025. – 354. - 129374.

5. Liu G., Liao S., Zhu D., Cui J. Solid-phase photocatalytic degradation of polyethylene film with manganese oxide OMS-2. - *Solid State Sciences*. – 2023. - 33, 13 (1). - 88–94.

6. Xu T., Wang X., Shi Q., Liu H., Chen Y., Liu J. Review of Soil Microplastic Degradation Pathways and Remediation Techniques. *International Journal of Environmental. - Research*. – 2024. - 18(5). - 77.

## HYDROLYSIS AND REDUCTIVE CYCLIZATION ETHYL 5-CHLORO-4-(4-NITROPYRROLIDIN-3-YL)PYRROLE-3-CARBOXYLATES

*Dorokhov V.I.<sup>1</sup>, Grozav A.N.<sup>2</sup>, Chornous V.A.<sup>2</sup>, Vovk M.V.<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>Polissia National University, [vdorokhov2@gmail.com](mailto:vdorokhov2@gmail.com)

<sup>2</sup>Bukovinian State Medical University,

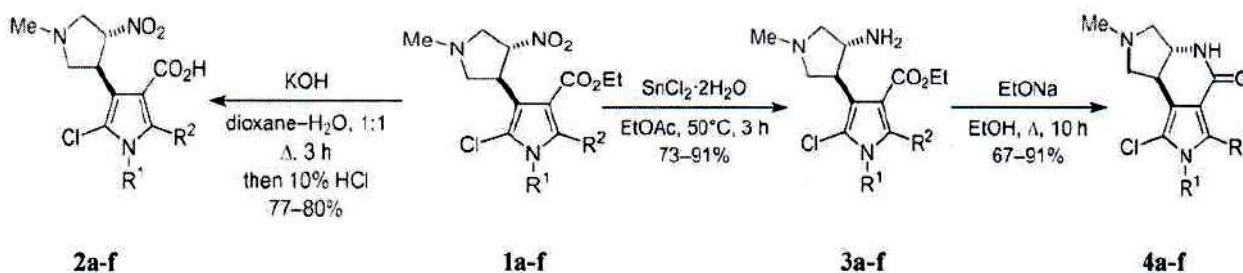
<sup>3</sup>Institute of Organic Chemistry, NAS of Ukraine

Modern drug development programs are largely focused on the creation of heterocyclic structures capable of effective interaction with diverse biological targets. Such types of structures confidently include substituted pyrrolidines. Among the functionalized pyrrolidines, a special place is occupied by nitro derivatives, which have found application as substrates for the design of pharmacologically promising compounds [1,2].

The presence of several reactive sites in the structure of pyrrolidinylpyrroles 1a–f, which previously received by us [3], creates favorable conditions for obtaining promising synthetic blocks on their basis. For example, during 3-hour boiling in a water-dioxane solution of KOH, only the ester group is converted, which leads to the corresponding acids 2a–f. In turn, the reduction of the nitro group of compounds 1a–f by tin dichloride to EtOAc was successfully used for the synthesis of 4-aminopyrrolidine derivatives of 3a–f with high yields.

We found that amino esters 3a–f are also prone to intramolecular cyclocondensation and, in boiling EtOH, in the presence of EtONa as a base, form derivatives of a new heterocyclic system of hexahydrodipyrrolo[3,4-b:3'4'-d]-pyridine 4a–f (Scheme)

**Scheme**



a  $R^1 = R^2 = \text{Me}$ ; b  $R^1 = n\text{-Pr}$ ,  $R^2 = \text{Me}$ ; c  $R^1 = n\text{-Bu}$ ,  $R^2 = \text{Me}$ ; d  $R^1 = \text{Bn}$ ,  $R^2 = \text{Me}$ ; e  $R^1 = \text{Me}$ ,  $R^2 = \text{Ph}$ ; f  $R^1 = n\text{-Pr}$ ,  $R^2 = \text{Ph}$

To confirm the structure and composition of products 1, 2, 3, 4 a–f was performed using IR, NMR and fluoroscopy methods.

Thus, the possibility of effective use of previously undescribed polyfunctional pyrroles containing 4-nitro-3-pyrrolidinyl fragment for the construction of representatives of a new heterocyclic system – hexahydrodipyrrolo[3,4-b:3'4'-d]pyridines, which are analogues of compounds with a pronounced pharmacological profile, has been demonstrated.

1. Michael, J. P. *Nat. Prod. Rep.* – 2005. - 22. - 603.

2. Hovinga, C. A. *Pharmacotherapy* 2001. - 21. - 1375.

3. Dorokhov V. I., Grozav A. N., Chornous V. A., Vovk M. V. Synthesis ethyl 5-chloro-4-(4-nitropyrrolidin-3-yl)pyrrole-3-carboxylates Збірник наукових праць VIII Всеукраїнської наукової конференції «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи» (1 травня 2024 р., м. Житомир). Житомир : ЖДУ ім. І. Франка. - 2024. - С 283.

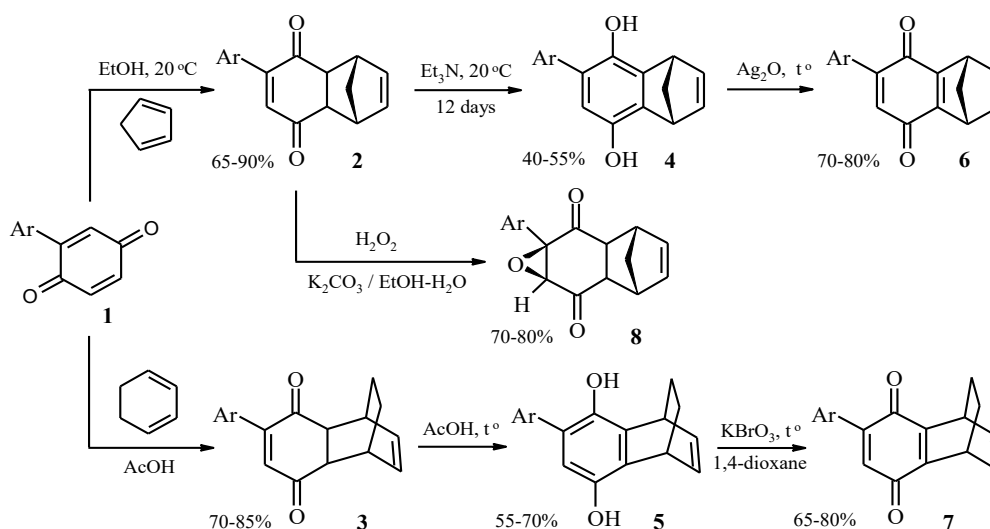
## REACTION OF SOME CYCLIC DIENES WITH 2-ARYL-1,4-BENZOQUINONES

*Martyak R.L.<sup>1</sup>, Filitovych I.D.<sup>1</sup>, Kinzhybalov V.V.<sup>2</sup>, Obushak M.D.<sup>1</sup>*

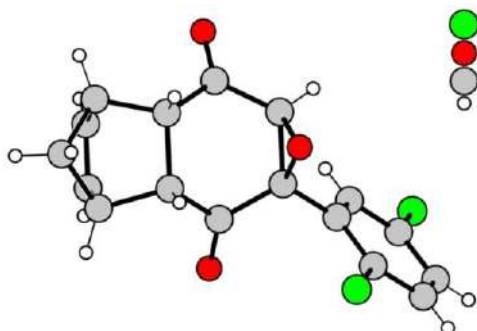
<sup>1</sup>Ivan Franko National University of Lviv, [roman.martyak@lnu.edu.ua](mailto:roman.martyak@lnu.edu.ua)

<sup>2</sup>Institute of Low Temperature and Structure Research, Polish Academy of Science

The 4+2-cycloaddition reaction of conjugated dienes to the 1,4-benzoquinone system forms the basis of convenient methods for the synthesis of many natural compounds and their synthetic analogues. This reaction is often the main stage of multi-step syntheses during the construction of various polycyclic systems. The high regioselectivity of the cycloaddition of 1,3-dienes to substituted quinones played a major role in the first synthetic methods for obtaining such important natural compounds as steroids (cholesterol, cortisone, estrone), alkaloids (morphine, reserpine, ibogaine), analogues of tetracycline and anthracycline antibiotics and antimalarial drugs, terpenoids (gibberellic acid, hirsuten, myrocin C). Another important area of application of the Diels–Alder reaction with 1,4-benzoquinones is the synthesis of 1,4-naphthoquinone and 9,10-anthraquinone derivatives based on them, which are used not only as intermediates in the synthesis of organic dyes and pigments, but also as important biologically active compounds and drugs [1, 2].



2-Aryl-1,4-benzoquinones **1** react with cyclopentadiene and cyclohexadiene (Diels–Alder reaction), at room temperature and 1:1 reagent ratio, stereoselectively to form cycloaddition *endo*-adducts **2**, **3**. The isomerization of these adducts to hydroquinones **4** and **5** was carried out (under basic or acid catalysis).



Molecular structure of 1a-(2,5-dichlorophenyl)-1a,2a,3,6,6a,7a-hexahydro-3,6-methanonaphtho[2,3-b]oxirene-2,7-dione **8**

Hydroquinones **4**, **5** were readily oxidized to the corresponding quinones **6**, **7**. Reaction of adducts **2** with hydrogen peroxide in the presence of bases occurs selectively and with the formation of monoepoxides **8**. The structure of synthesized compounds was determined by using IR-, <sup>1</sup>H-, <sup>13</sup>C NMR spectroscopy and X-ray diffraction studies (see figure).

*The authors thank the Ministry of Education and Science of Ukraine and Simons Foundation ("PD-Ukraine-00014574") for financial support.*

1. Moody C.J., Nawrat C.C. Quinones as dienophiles in the Diels–Alder reaction: history and applications in total synthesis. – *Angew. Chem. Int. Ed.* – 2014. – V. 53. No 8. – P. 2056–2077.

2. Nicolaou K.C., Snyder S.A., Montagnon T., Vassilikogiannakis G. The Diels–Alder reaction in total synthesis. – *Angew. Chem. Int. Ed.* – 2002. – V. 41. No 10. – P. 1668–1698.

# PHYSICOCHEMICAL CHARACTERISTICS OF 6,6-DIFLUOROBICYCLO[3.2.0]HEPTANE DERIVATIVES

*Moroz, B.<sup>1,2</sup> Melnykov K.P.<sup>2</sup>, Holovach S.<sup>1,2</sup> Filatov A.A.<sup>1</sup>, Grygorenko O.O.<sup>2,3</sup>*

<sup>1</sup> Institute of Organic Chemistry, NASciences of Ukraine, [probodya50@gmail.com](mailto:probodya50@gmail.com)

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

<sup>3</sup> Taras Shevchenko National University of Kyiv, Ukraine

In recent years, fluorinated derivatives of saturated rings have gained considerable attention, and several drug molecules in this class have been brought to the market over the last decade [1, 2]. Conversely, incorporating a bicyclic ring system to impose conformational restriction is a well-established strategy in medicinal chemistry, offering distinctive chemotypes with enhanced physicochemical and biological characteristics [3].

We developed a new fluorinated saturated bicyclic scaffold, 6,6-difluorobicyclo[3.2.0]heptane, which may be of interest for drug discovery. Its physicochemical properties, including acid-base characteristics and lipophilicity were evaluated and compared with those of non-fluorinated and monocyclic counterparts.

The acid-base titration of the products (**1**, **2**) obtained, as well as their non-fluorinated (**5**, **6**) and monocyclic counterparts (**7-10**) showed that gem-difluorination expectedly decreased the compound's acidity (by 0.3 – 0.5 units). Lipophilicity was also decreased by 0.54 – 0.55 LogP units. Meanwhile, the bicyclic system itself did not have significant impact on either acidity or lipophilicity.

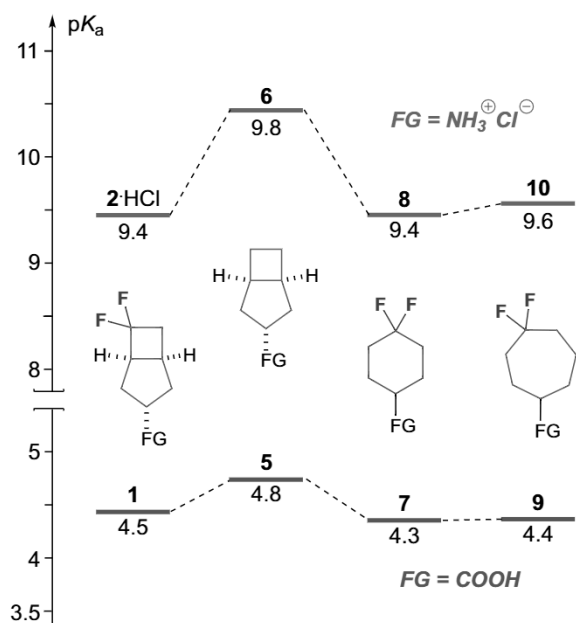


**Fig. 1.** The pKa values for compounds.

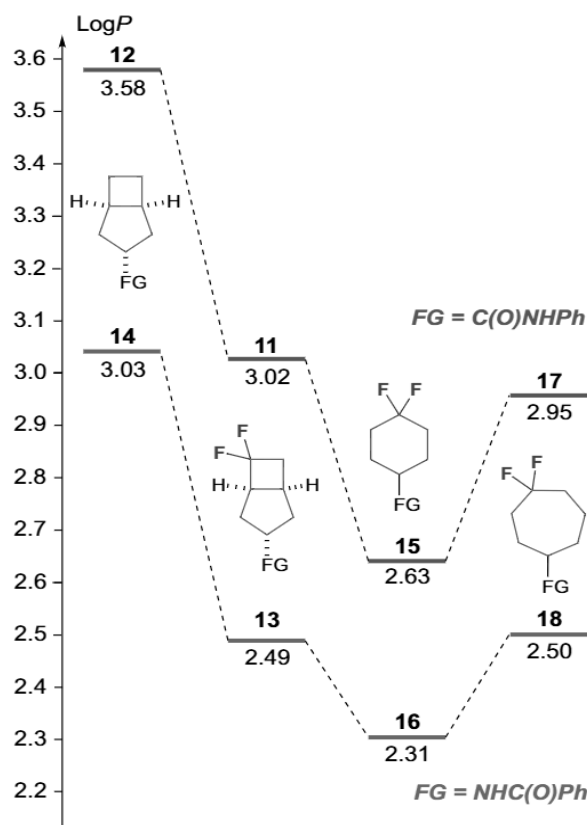


**Fig. 2.** LogP values for compounds.

1. Grygorenko O. O., Melnykov K. P., Holovach, S., Demchuk O. Fluorinated Cycloalkyl Building Blocks for Drug Discovery // *ChemMed-Chem.* – 2022. - 17 (21).

2. Ryabukhin S. V.; Bondarenko, D. V.; Trofymchuk, S. A.; Lega, D. A., Volochnyuk D. M. Aza-Heterocyclic Building Blocks with In-Ring CF<sub>2</sub> Fragment // *Chem. Rec.* – 2023. - 24 (2).

3. Pinheiro de Sena M., Rodrigues P., Couto Maia D. A., Thota R., Fraga S. The Use of Conformational Restriction in Medicinal Chemistry // *Curr. Top. Med. Chem.* – 2019. - 19 (19). - 1712 – 1733.



# SYNTHESIS OF AZO DYES BASED ON DIMEDONE AND COMPARATIVE STUDY OF ITS PHOTOINDUCED ISOMERIZATION

*Oliynyk A.O., Ovdenko V.M.*

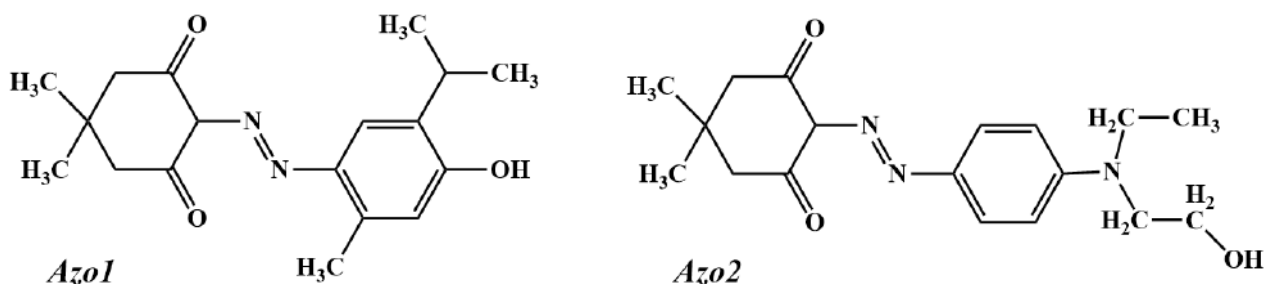
Taras Shevchenko National University of Kyiv, [anna.oliynyk2005@gmail.com](mailto:anna.oliynyk2005@gmail.com)

Azo compounds are organic substances that contain the —N=N— (azo group) bonded to two hydrocarbon (aromatic or aliphatic) radicals. They are widely explored in fields such as textile dyes, advanced materials, components of nonlinear optical (NLO) devices [1], and therapeutic agents. Dimedone is an important compound for the synthesis of biologically active heterocyclic compounds. Azo compounds synthesized based on dimedone are particularly interesting due to their ability to undergo keto-enol tautomerism [2,3]. This property makes them useful in biochemistry; for example, during the transfer of a specific functional group, the compound can exist in a less thermodynamically stable form. Once the group is released, the compound transitions into a more thermodynamically stable state. Additionally, under the influence of light, these compounds undergo reversible photoinduced transformations, making them suitable for applications such as optical sensors.

Therefore, in this work, we synthesized two azo-dimedone derivatives *Azo1* and *Azo2* (as shown in the scheme). Their structures were confirmed by <sup>1</sup>H NMR spectroscopy, and their ability to undergo *trans*→*cis*→*trans* isomerization was studied in ethanol solution under irradiation with the full spectrum of a UV lamp.

In this work, the synthesis for the compounds were investigated, and their photoinduced isomerization properties were studied.

## Scheme



Structures of the synthesized azo-dimedone derivatives *Azo1* and *Azo2*

The *Azo1* exhibited an almost twice as fast photoinduced process with a rate constant of  $14.4 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ , whereas *Azo2* showed a rate constant of  $7.4 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ . The corresponding half-lives were approximately 481 s for *Azo1* and 937 s for *Azo2*. This significant difference in isomerization rates can be attributed to structural variations: *Azo1* features a hydroxyl substituent in the para position, which may enhance intramolecular interactions and facilitate isomerization. In contrast, *Azo2* contains a bulkier substituent with an additional heteroatom, potentially increasing steric hindrance and reducing the efficiency of the *trans*→*cis* transformation.

1. Surendranaik Y, Venkatesh T., Naik E. Synthesis, characterization, solvatochromic, and electrochemical investigation of novel 4-methyl coumarin fused azo dyes as an NLO material and their biological studies. - *Struct Chem.* – 2025. – 36. - 171–190.

2. Cıçen G., Karabacak, Atay Ç., Tilki T., Disazo dyes containing pyrazole and benzothiazole moieties: synthesis, characterization, absorption characteristics and tautomeric structures. *Res Chem Intermed.* – 2017. - 43. - 6803–6816.

3. Kuznik W., Kopylovich M.N., Amanullayeva G.I., Pombeiro A.J.L., Reshak A.H., Mahmudov K.T., Kityk I.V. Role of tautomerism and solvatochromism in UV–VIS spectra of arylhydrazones of  $\beta$ -diketones, *Journal of Molecular Liquids.* – 2012. – 171. - 11–15.

# DIALKYL *N*-ALKOXY-*N*-(*N'*-ARYL(ALKYL)CARBAMOYL)PHOSPHORAMIDATES AND DIALKYL *N*-ALKOXY- *N*-(4-TOLUENESULFONUL)PHOSPORAMIDATES. SYNTHESIS AND STRUCTURE

Shtamburg V.G.<sup>1</sup>, Klots E.A.<sup>1</sup>, Kravchenko S.V.<sup>2</sup>, Anishchenko A.A.<sup>3</sup>, Shishkina S.V.<sup>4</sup>, Mazepa A.V.<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Ukrainian State University of Science and Technologies

<sup>2</sup>Dnipro State Agrarian and Economic University, [svtailor@ukr.net](mailto:svtailor@ukr.net)

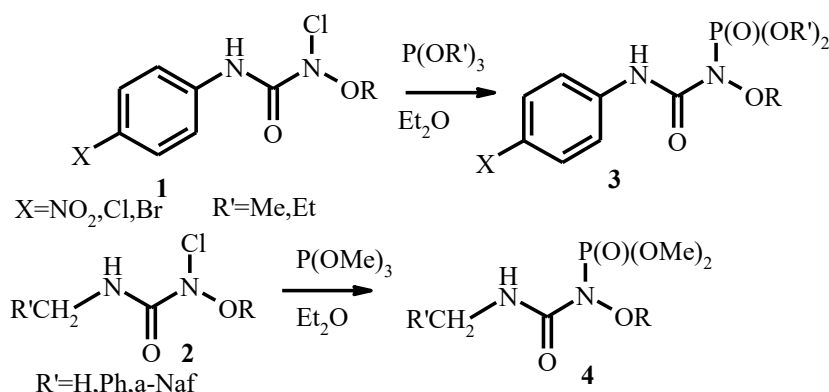
<sup>3</sup>O.Gonchar Dnipro National University,

<sup>4</sup>Institute of Organic Chemistry, NAS of Ukraine

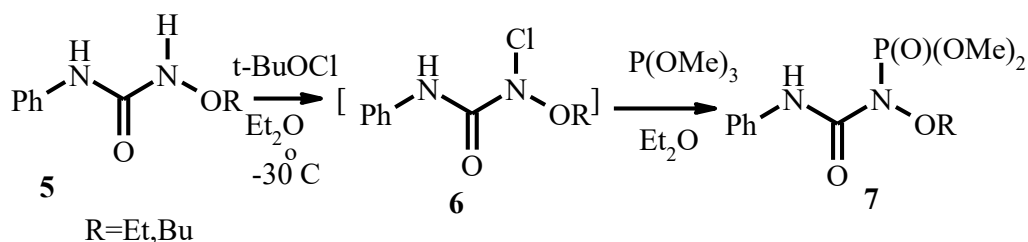
<sup>5</sup>A.V. Bogatsky Physico-Chemical Institute, NAS of Ukraine

Phosphoramidates and their derivatives are widely used in medicine, medicinal chemistry and agriculture. Molecules, containing P–N bond, are found in a large array biologically active natural products. While the synthetic routs to phosphoramidates are not limited now, the creating of new route to obtain could be useful. Urea and sulfonylamides are widely used in medicinal chemistry and drug design too. Thus, the creation of new synthetic route of compounds, which would simultaneously posses structural features of both phosphoramidates and ureas, or phosphoramidates and sulfonylamides it seems relevant.

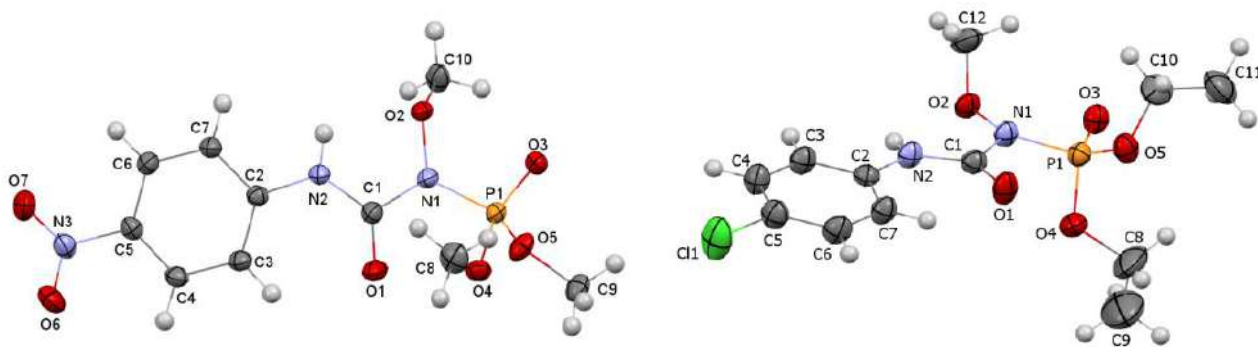
We have found that *N*-alkoxy-*N*-chloro-*N'*-arylureas **1** and *N*-alkoxy-*N*-chloro-*N'*-alkylureas **2** react with trialkyl phosphites in ether at room temperature with forming dialkyl *N*-alkoxy-*N*-(*N'*-arylcarbamoyl)phosphoramidates **3** and dialkyl *N*-alkoxy-*N*-(*N'*-alkylcarbamoyl)phosphoramidates **4**, respectively.



*N*-Alkoxy-*N*-chloro-*N'*-phenylureas cannot exist at room temperature. It was reported that *N*-methoxy-*N*-chloro-*N'*-phenylurea isomerizes into *N*-methoxy-*N'*-(4-chlorophenyl)urea at room temperature [1]. But we have obtained *N*-alkoxy-*N*-chloro-*N'*-phenylureas **6** by *t*-BuOCl chlorination of the *N*-alkoxy-*N'*-phenylureas at  $-30^\circ C$  in ether. The subsequent treatment of *N*-alkoxy-*N*-chloro-*N'*-phenylureas **6** with trimethyl phosphite in these conditions yielded dimethyl *N*-alkoxy-*N*-(*N'*-phenylcarbamoyl)phosphoramidates **7** by one-pot synthesis.

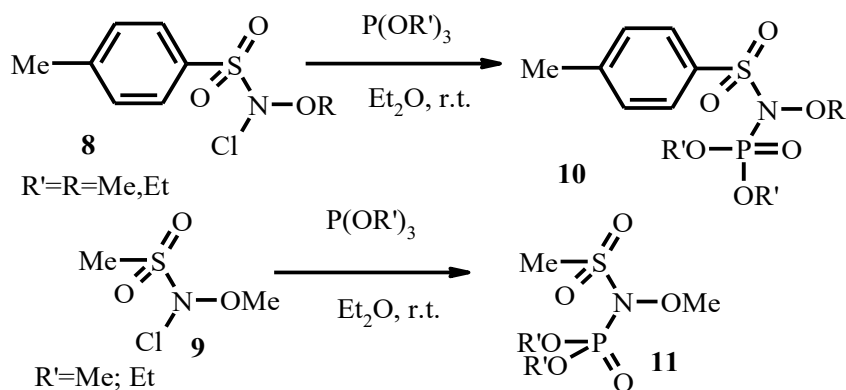


The structure of dialkyl *N*-alkoxy-*N*-(*N'*-arylcarbamoyl)phosphoramidates **3**, and dimethyl *N*-alkoxy-*N*-(*N'*-alkylcarbamoyl)phosphoramidates **4** has been proved by the  $^1H$ ,  $^{13}C$ ,  $^{31}P$  NMR spectra and mass spectra. Also, the structure of some compound **3** has been confirmed by the single crystal X-ray diffraction (XRD) study.

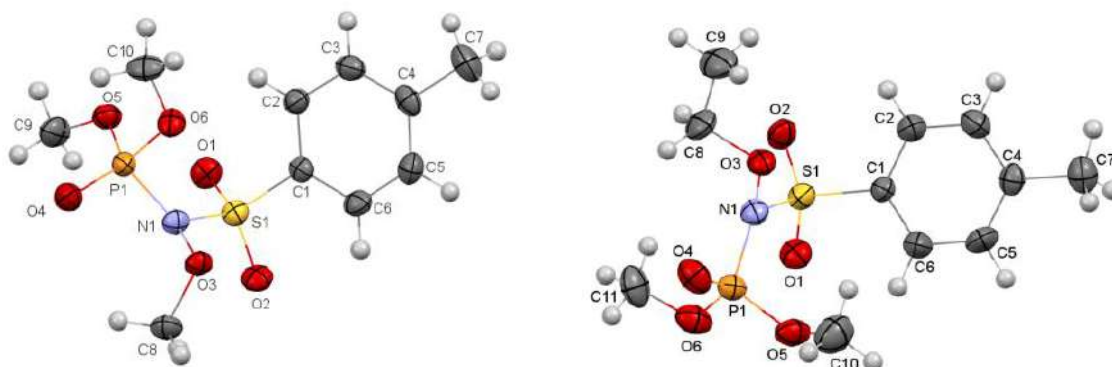


Molecular structure of dimethyl *N*-methoxy-*N*-(*N*'-4-nitrophenylcarbamoyl)phosphoramidate and diethyl *N*-methoxy-*N*-(*N*'-4-chlorophenylcarbamoyl)phosphoramidate

The interaction of *N*-alkoxy-*N*-(chloro)-*R*-sulfonylamides **8,9** with trialkyl phosphites selectively yields dialkyl *N*-alkoxy-*N*-4-toluenesulfonylphosphoramidates and dialkyl *N*-methoxy-*N*-methanesulfonylphosphoramidates **10,11** respectively.



The structure of dialkyl *N*-alkoxy-*N*-*R*-sulfonylphosphoramidates **10,11** has been proved by the  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{31}\text{P}$  NMR spectra and mass spectra. Also, the structure of some compound **10** has been confirmed by the single crystal X-ray diffraction (XRD) study.



Molecular structure of dimethyl *N*-methoxy-*N*-4-toluenesulfonylphosphoramidate and dimethyl *N*-ethoxy-*N*-4-toluenesulfonylphosphoramidate

1. Perronnet J., Demoute J.P. Approach to the 1-methoxy-2-benzimidazolinones. – *Gazzet. Chim. Ital.* – 1982. – 112. – P. 507–511.

## SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF ACRYLIC PRESSURE-SENSITIVE ADHESIVES

Slisenko O.V.

Institute of Macromolecular Chemistry, NAS of Ukraine, [olgaslisenko@ukr.net](mailto:olgaslisenko@ukr.net)

Pressure-sensitive adhesives (PSAs) are soft polymeric materials that show permanent stickiness at room temperature and instantly adhere to surfaces when pressure is applied. The acrylic PSAs are characterized by excellent adhesion, cohesion and water resistance [1]. PSAs have been widely applied in many fields such as pharmaceutical, biomedical, food industry as self-adhesive tapes, labels, protective films etc.

In this work, acrylate-based PSAs were synthesized by UV-polymerisation, the kinetics of photopolymerisation behaviour were studied by FT-IR spectroscopy, as well as T-peel test was performed (ASTM D1876).

The adhesive compositions were formulated by mixing of monomers butyl acrylate (BA), 2-ethylhexyl acrylate (2-EHA), acrylic acid (AA) at different ratio of monomers with crosslinking agent – trimethylolpropane triacrylate (TMPTA), photoinitiator (Darocur 4265). A prepared composition was coated onto polyethylene (PE) film and UV-exposure of adhesive composition was performed. Figure represents the typical FTIR spectra of mixture of acrylate monomers with 0.8 wt.% of TMPTA as a crosslinking agent. Acrylate groups take part in the reaction, hence the complete disappearance of sharp peaks at  $1635\text{ cm}^{-1}$  and  $1622\text{ cm}^{-1}$ ,  $1409\text{ cm}^{-1}$ , and  $811\text{ cm}^{-1}$ , which can be attributed to the strong absorbance of unsaturated bonds between carbon atoms ( $\text{C}=\text{C}$ ), is observed after the synthesis [2].

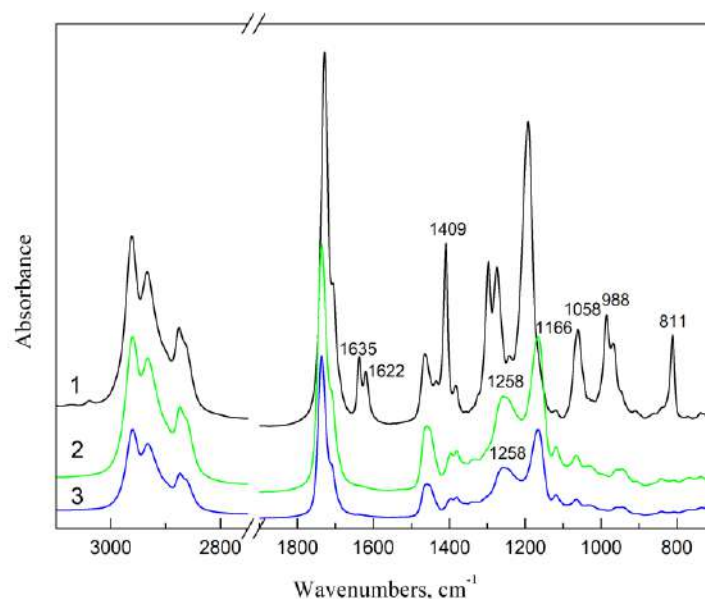


**Fig. 1.** FTIR spectra of the UV-curable mixture of acrylate monomers  
1 – before, 2 – after 2 minutes and 3 – after 3 minutes of UV exposure.

This confirms that the polymerization reaction has taken place and obtaining polymers with complete conversion of acrylate groups. Moreover, after the synthesis, new peaks at  $1258\text{ cm}^{-1}$  and  $1166\text{ cm}^{-1}$  are due to the  $\text{C}-\text{O}$  stretching vibration of the saturated ester group.

The peel separation strength of two flexible materials that have been bonded together, so-called T-peel test was used for synthesised PSA. The measured parameter is varied in the range between  $0.300 - 0.450\text{ kg/cm}$  that is comparable to the industrial samples.

1. Czech Z., Kowalczyk A., Kabatc J., Swiderska J. UV-crosslinkable acrylic pressure-sensitive adhesives for industrial application // *Polym. Bull.* – 2012. – Vol. 69. – P. 71–80.

2. Ossowicz-Rupniewska P. et al. Sustainable UV-crosslinkable acrylic pressure-sensitive adhesives for medical application // *Int. J. Mol. Sci.* – 2021. – Vol. 22. – P. 11840.

## DESIGN AND BIOLOGICAL ACTIVITY OF TRIAZOLE-NAPHTHALIMIDE HYBRID COMPOUNDS

*Slivka M.V.<sup>1</sup>, Korol N.I.<sup>1</sup>, Pallah O.V.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Uzhhorod National University, [nataliya.korol@uzhnu.edu.ua](mailto:nataliya.korol@uzhnu.edu.ua)

Compounds containing a triazole nucleus exhibit a wide structural diversity and possess various valuable properties, making them highly promising for applications across multiple scientific and technological fields. They are widely used in medicine [1], biology [2], agriculture [3], and other industries [4]. Due to their thermal stability, chemical resistance, and diverse reactivity, triazoles have attracted significant research interest. These compounds can exhibit antitumor, anti-inflammatory, antimicrobial, and antioxidant effects. Additionally, they serve as catalysts, corrosion inhibitors, and reagents in the synthesis of new materials.

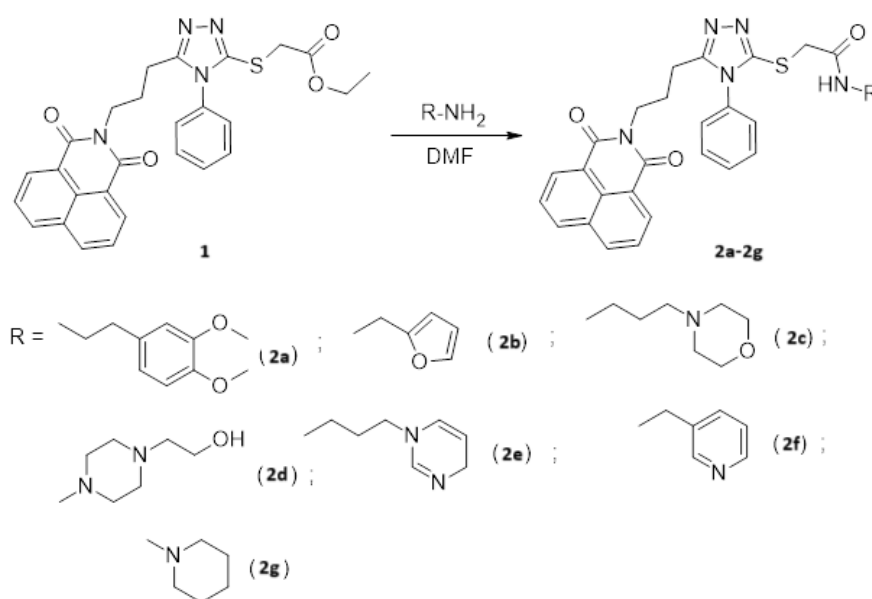
Expanding the chemical diversity of 1,2,4-triazoles by incorporating other heterocyclic moieties is a promising approach for enhancing their biological properties. Specifically, combining triazoles with biologically active fragments, such as benzothiazoles, quinones, pyridines, and naphthalimides, can significantly improve their effectiveness. In this study, 1,8-naphthalimide was selected as a key structural component due to its unique photophysical properties, ability to interact with DNA, and proven antitumor and antimicrobial activities [5].

The integration of triazole and naphthalimide moieties is expected to enhance the biological activity of the resulting compounds. Such hybrid structures may demonstrate higher affinity for biological targets, improved pharmacokinetic characteristics, and reduced toxicity, creating new opportunities for their pharmaceutical applications.

The objective of this study was to develop and synthesize hybrid derivatives of 1,2,4-triazole and 1,8-naphthalimide, analyze their structures, and evaluate their anti-inflammatory activity. The research focused on optimizing synthesis methods, identifying the obtained compounds using spectral analysis, and studying their effects on the levels of the pro-inflammatory cytokine IL-6. The results obtained could serve as a foundation for further investigations into the mechanisms of action and potential pharmacological applications of these compounds.

The target compounds 2a–2g were synthesized via the reaction of ester 1 with the corresponding amines in dimethylformamide (DMF) (Scheme). The structures of the obtained compounds were confirmed using spectral analysis methods.

**Scheme**



To assess anti-inflammatory activity, an ELISA assay was conducted to determine their effect on IL-6 levels compared to a control sample. A decrease in IL-6 levels indicates the anti-inflammatory potential of the tested compounds. The results are summarized in Table 1.

The control sample exhibited a stable IL-6 level (12 pg/mL), serving as a reference for activity assessment. Compounds that reduced IL-6 levels below this threshold were considered active. The most pronounced effect was observed with compound 2c, which reduced IL-6 levels to 7 pg/mL, indicating strong therapeutic potential. This may be attributed to its structural characteristics, such as an optimal balance of hydrophilic and hydrophobic properties or the strategic positioning of functional groups.

Compounds 2f and 2g also demonstrated significant activity, lowering IL-6 levels to 8 pg/mL, while compounds 2a, 2d, and 2e showed moderate activity (9–10 pg/mL). Compound 2b was inactive, as its IL-6 level remained at the control value.

These findings confirm the promising potential of the synthesized hybrid compounds as anti-inflammatory agents. Further research, particularly in vivo studies, may facilitate the development of new effective drugs for treating inflammatory and autoimmune diseases.

**Table**

Anti-inflammatory activity of the synthesized compounds, determined by IL-6 levels (pg/mL).

| Compound | IL-6 Level (pg/mL) | Control (no test compound) (pg/mL) | Activity |
|----------|--------------------|------------------------------------|----------|
| 1        | 8                  | 12                                 | active   |
| 2a       | 10                 | 12                                 | active   |
| 2b       | 11                 | 12                                 | inactive |
| 2c       | 7                  | 12                                 | active   |
| 2d       | 9                  | 12                                 | active   |
| 2e       | 9                  | 12                                 | active   |

This research was conducted with the support of the NFDU project No. 2023.03/0176 "Strategy for Directed Synthesis of Functional Chalcogen Halide Materials for the Needs of Medicine and Energy" (2024–2026).

1. Hakan B., Karaali N., Şahin D., Demirbaş A. Synthesis and Antimicrobial Activities of Some New 1,2,4-Triazole Derivatives // *Molecules*. - 15, no. 4. - 2427–38.
2. Küçüküzümlü, Güniz Ş., Çıkla-Süzcü P. Recent Advances Bioactive 1,2,4-Triazole-3-Thiones // *European Journal of Medicinal Chemistry*. – 2015. – 97. - 830–70.
3. Kaur, Ramandeep, Ranjan Dwivedi, Bhupinder Kumar, and Vinod Kumar. Recent Developments on 1,2,4-Triazole Nucleus in Anticancer Compo. // *Ingenta Connect*. - 2016.
4. Subhas S., Sindhu K. N., Sreeveena K. The Significance of 1, 2, 4 Triazoles in Agriculture Science: A Review // *Research Journal of Pharmacy and Technology*. 2014. - 12, №. 10. - 5091–5071.
5. Arianna R., Sacchetti A., Meneghetti F., Colombo Dugoni G., Mori M., Castellano C. Synthesis and Characterization of New Triazole-Bispidinone Scaffolds and Their Metal Complexes for Catalytic Applications. // *Molecules*. 2023. - 28, №. 17. - 6351–51.



## SYNTHESIS OF 2-TRIFLUOROMETHYLPYRAZOLO[1,5-A]PYRIMIDINE CARBOXYLIC ACID

*Tolkunov A.S., Tolkunov V.S., Smirnova O.V., Tolkunov S.V.*

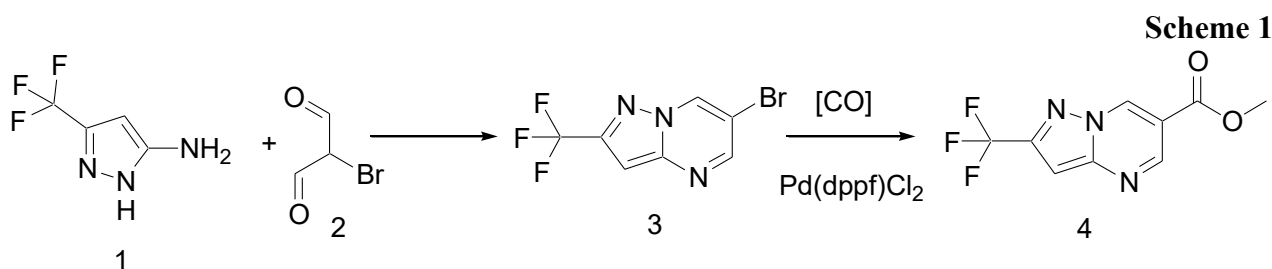
L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic Chemistry and Coal Chemistry, NAS of Ukraine,  
[s\\_tolkunov@yahoo.com](mailto:s_tolkunov@yahoo.com)

Pyrazolo[1,5-a]pyrimidine derivatives are synthetically available compounds that are being extensively studied due to their diverse biological activity [1]. Among them, compounds with antibacterial [2] cytotoxic [3], antifungal [4] and antitumor activity [5] have been found. Anxiolytics and sedatives zaleplon, indiplon, and ocinaplon are drugs containing pyrazolo[1,5-a]pyrimidine ring [1].

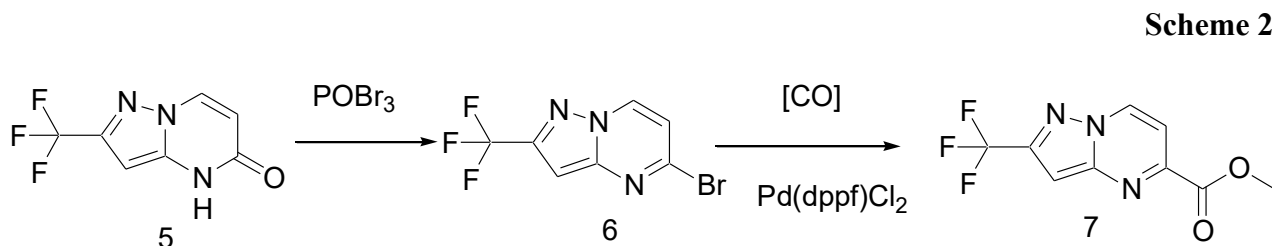
Pyrazolo[1,5-a]pyrimidine skeleton containing functional groups in pyrimidine core such as carboxylic acids is not widely described in the scientific literature. Whereas carboxylic acids and carboxylic acid derivatives have highest priority among carbon-containing functional groups. Numerous studies have shown that the fluoroalkyl groups increase the biological activity of the molecule as well as its metabolic stability, lipophilicity, binding affinity to receptors.

We now report the results of our study on the palladium-catalyzed carbonylation of 6-bromo- and 5-bromo-2 trifluoromethylpyrazolo[1,5-a]-pyrimidines (**3**, **6**) with carbon monoxide in the presence of [1,1'-bis(diphenylphosphino)ferrocene]dichloropalladium (Pd(dppf)Cl<sub>2</sub>).

The synthesis of the starting 6-bromo-2-trifluoromethylpyrazolo[1,5-a]pyrimidines (**3**) was carried out by condensation of 3-trifluoromethyl-5-aminopyrazole (**1**) with bromomalonaldehyde (**2**) (scheme 1).



6-Bromo-2-(trifluoromethyl)pyrazolo[1,5-a]pyrimidine (**6**) was obtained by the action of phosphoryl bromide on 2-(trifluoromethyl)pyrazolo[1,5-a]pyrimidin-5(4H)-one (**5**) (scheme 2).

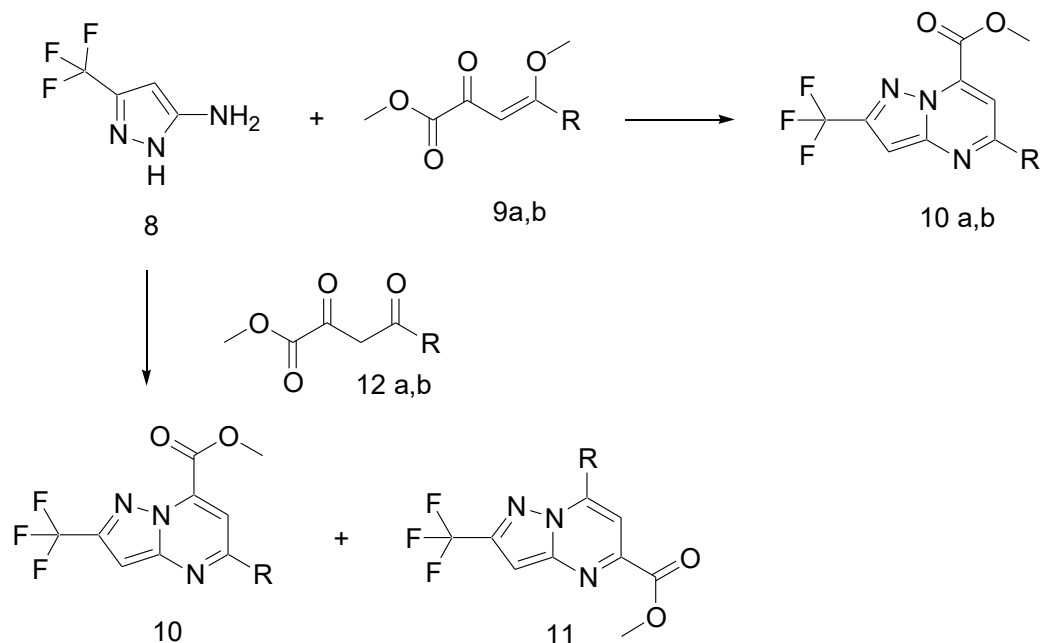


The carbonylation was carried out in methanol at 100°C, CO 50 bar and in the presence of 2-equiv NEt<sub>3</sub>. Methyl 2-(trifluoromethyl)pyrazolo[1,5-a]pyrimidine-6-carboxylate (**4**) and methyl 2-(trifluoromethyl)pyrazolo[1,5-a]pyrimidine-5-carboxylate (**7**) were obtained in yields of 68 % and 70%, respectively.

The methods for the synthesis of methyl 5-R-2-(trifluoromethyl)pyrazolo[1,5-a]pyrimidine-7-carboxylates (**10**) are based on the cyclocondensation of 5-amino-3-trifluoromethylpyrazole (**8**) with methyl 4-cyclopropyl-4-methoxy-2-oxobut-3-enoate (**9a**) and methyl 4-methoxy-2-oxo-4-phenylbut-3-enoate (**9b**). When unsymmetrical 1,3-dicarbonyl compounds (methyl 4-cyclopropyl-2,4-dioxobutanoate and methyl 2,4-dioxo-4-phenylbutanoate) are subjected to the reaction, a

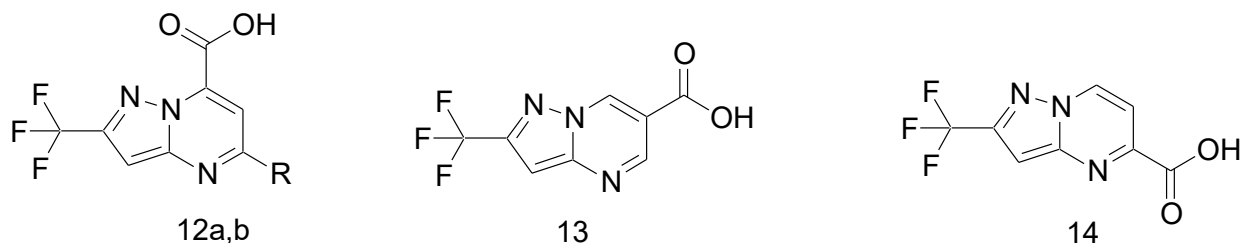
problem of the formation of isomeric compounds arises. In some cases,  $\beta$ -alkoxy derivatives of 1,3-diketones are used for the regioselective introduction of a substituent via the preparation of intermediate enamines (scheme 3).

**Scheme 3**



The corresponding carboxylic acids (**12a,b**, **13**, **14**) were obtained in high yields and purity by alkaline hydrolysis of esters (**4**, **7**, **10a,b**) (Scheme 3). They are of interest for subsequent modification of the synthesized molecules.

**Scheme 4**



$R = \text{cyclopropyl}, \text{Ph}$

1. Cherukupalli S., et.al. An insight on synthetic and medicinal aspects of pyrazolo[1,5-a]pyrimidine scaffold // *Europ. J. Med. Chem.* - 2017. - Vol. 126. - P. 298-352.
2. Hassan A.S., et.al. Synthesis and biological evaluation of pyrazolo[1,5-a]pyrimidine-3-carboxamide as antimicrobial agent // *Med. Chem. Res.* - 2017. - Vol. 26 №11. - P. 2909-2919.
3. EAbdelall.K.A., Philoppes J.N. / Synthesis and cytotoxic activity of new pyrazolo[1,5-a]pyrimidines and determination of pyrimidine regiospecific ring formation with 2D NMR // *Arkivoc* - 2016. №5. - P. 210-224.
4. Zhang J. et.al. Synthesis of pyrazolo[1,5-a]pyrimidine derivatives and their antifungal activities against phytopathogenic fungi in vitro // *Mol. Divers.* - 2016. - Vol.20, №4. - P. 887-896.
5. Mulakayala N. et.al. Novel and Efficient Synthesis of 7-Trifluoromethyl-Substituted Pyrazolo[1,5-a] Pyrimidines with Potent Antitumor Agents // *J. Kor. Chem. Soc.* - 2011. - Vol.55, №4. - P. 719-722.

## MODIFICATION OF FIRE PROTECTION PAINTS WITH NANOGRAPHTES

*Vakhitov R.A.<sup>1</sup>, Sholohon V.I.<sup>2</sup>, Taran N.A.<sup>2</sup>, Kalafat K.V.<sup>2</sup>, Bessarabov V.I.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup> Kyiv National University of Technology and Design,

<sup>2</sup> L.M. Lytvynenko Institute of Physical and Organic Chemistry and Coal Chemistry,  
NAS of Ukraine, [vahitov89@gmail.com](mailto:vahitov89@gmail.com)

The purpose of the study is to determine the effect of additives of expandable graphite (EG) and swollen graphite (SG) on the swelling characteristics and fire protection efficiency of reactive intumescent coatings based on ammonium polyphosphate (APP)/ melamine (MA)/ pentaerythritol (PE), as well as to assess their feasibility in the composition of industrial paints for wood and metal.

The object of the study is intumescent coatings containing graphites (EG, SG) in different concentrations (0-25%) and commercial fire retardant paints Ammokote WW (for wood) and Ammokote MW120 (for metal).

Expandable graphite is used as a foaming agent and smoke retardant in fire protection materials, but its early swelling ( $T < 150\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) can adversely affect the formation of the char layer.

Full or partial replacement of EG with SG in intumescent system does not provide significant improvements in the fire protection properties of the coating.

Ammokote WW coating is used for fire protection of wood and is characterised by early (at  $T < 200\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) and intensive swelling, unlike Ammokote MW120 metal coating, which starts swelling after  $250\text{ }^{\circ}\text{C}$ . However, as shown in Table, expandable graphite and swollen graphite in the amounts used do not have any critical effect on the characteristics of swelling and weight loss.

**Table**

Swelling coefficient  $K$  ( $\text{cm}^3/\text{g}$ ) and mass loss (%) of intumescent compositions at  $400^{\circ}\text{C}$

| Paint    | EG, % | SG, % | $K, \text{cm}^3/\text{g}$ | $\Delta m, \%$ |
|----------|-------|-------|---------------------------|----------------|
| WW       | -     | -     | 50                        | 46,2           |
| WW       | 5     | -     | 51                        | 42,5           |
| WW       | -     | 1     | 53                        | 44,7           |
| MW – 120 | -     | -     | 31                        | 42,9           |
| MW – 120 | 5     | -     | 29                        | 38,7           |
| MW – 120 | -     | 1     | 30                        | 42,5           |

The results of the experiment with the addition of graphites EG, SG or their mixtures in the amount of 0–25% to the Ammokote WW paint showed that possible fluctuations in the values of the swelling intensity or the mass of the char residue in one direction or another have no practical prospects for a significant increase in the fire-retardant properties of the paint.

It has been proven that graphite additives in the composition of the APP/MA/PE intumescent system:

- in an amount of up to 10% contribute to the strengthening of the char layer;
- within 10–20% with a slight increase in the swelling coefficient, they increase the loss of the coating mass by almost 10%;
- over 20% destroy the char layer and enter into chemical antagonism with the intumescent system.

Thus, the results obtained indicate the need for careful selection of the concentration of graphite additives for the optimal combination of fire-retardant properties and mechanical stability of the char layer.

## СИНТЕЗ ІНДОЛ-3-АЦЕТАМІДУ АЛАНІНУ В УМОВАХ ІНВЕРСІЙНОГО ТРАНСФАЗНОГО КАТАЛІЗУ

*Аніщенко В.М., Аніщенко Г.В.*

Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України,  
[anischenko@nas.gov.ua](mailto:anischenko@nas.gov.ua)

Індол-3-оцтова кислота належить до групи фітогормонів, що називаються ауксинами. Вона виявляє високу фізіологічну активність і при низьких концентраціях здатна стимулювати ростові процеси в рослинах. Одними з найпоширеніших похідних фітогормонів є їх амідні з амінокислотами [1]. Подібні похідні отримані для багатьох амінокислот і широко використовуються в науковій практиці для визначення шляхів метаболізму фітогормонів в організмі рослини. Продemonстровано, що похідні фітогормонів з амінокислотами є однією з основних форм їхнього накопичення в тканинах рослини поряд із глікозидами [2]. На практиці такі сполуки отримують використовуючи карбодіімід, а інколи необхідно й використання захищених амінокислот, що потім потребує додаткової стадії зняття захисної групи [3]. Тому розробка методик синтезу подібних сполук, яка б відповідали вимогам «зеленої хімії», є перспективною задачею.

Метод інверсійного трансфазного каталізу був успішно використаний для отримання індол-3-ацетамід аланіну. Аланін був обраний для модельної реакції в наслідок відсутності додаткових функційних груп в бічному ланцюгу. Запропонована схема синтезу складається з двох етапів. На першому етапі синтезували змішаний індол-3-оцтово бензойний ангідрид методом інверсійного трансфазного каталізу в двофазній системі етилацетат-вода. На другому етапі після заміни водної фази здійснювали реакцію між змішаним ангідридом (в етилацетаті) і натрієвою сіллю аланіну (рис. 1). Обидва етапи проводилися при температурі реакційного середовища 5°C і з використанням 4-метилпіридин-1-оксиду в якості каталізатору. Виходи змішаного ангідриду й індол-3-ацетамід аланіну на першому етапі й і другому етапі синтезу складали 92% і 82%, відповідно.

Отримані результати дозволяють зробити припущення, що використання методу інверсійного трансфазного каталізу дозволить синтезувати широкий спектр амідних похідних різних фітогормонів в екологічно дружніх умовах і з високими виходами.

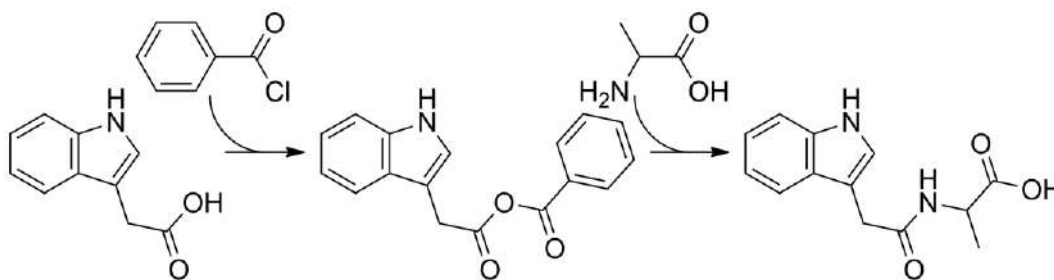


**Рис. 1.** Схема двоетапного синтезу індол-3-ацетаміду аланіну в двофазному середовищі етилацетат-вода.

1. Pěňčík A., Rolčík J., Novák O., Magnus V. Isolation of novel indole-3-acetic acid conjugates by immunoaffinity extraction. - *Talanta*. - 2009. - V.80. I.2. - P. 651-655.
2. Kleczkowski K., Schell J., Bandur R. Phytohormone conjugates: nature and function. - *Critical Reviews in Plant Sciences*. - 1995. - V.14. I.4. - P. 283-298.
3. Revelou P.-K., Constantinou-Kokotou V. Preparation of synthetic auxin-amino acid conjugates. *Synth. Comm.* - 2019. - V.49. I.13. - P. 1708-1712.

## СОРБЦІЙНІ ВЛАСТИВОСТІ КОМПОЗИТНИХ ГІДРОГЕЛІВ НА ОСНОВІ ПОЛІАКРИЛАМІДУ ТА ХІТОЗАНУ

*Бей І.М., Будзінська В.Л., Толстов О.Л.*

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України,

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

Полімерні композитні гідрогелі на основі поліакриламід (ПААм) та хітозану є перспективними матеріалами для вилучення полютантів аніонної природи з водних середовищ, а також для очищення або концентрування біологічно активних сполук, цінних реагентів тощо. Наявність в структурі молекул хітозану вільних аміногруп зумовлює активну роль цього полісахариду у сорбції полютантів або цільових речовин з водних середовищ за рахунок йонних взаємодій. Високі показники водопоглинання поліакриламідної матриці забезпечують швидку дифузію сорбату до активних центрів хітозану, а міцність та еластичність поліакриламідного гелю надає цим композитним матеріалам покращені механічні властивості та попереджає руйнування крихкого хітозанового гелю в процесі експлуатації.

Для синтезу композитних гідрогелів ПААм/хітозан спершу отримували гідрогель на основі зшитого хітозану. Як зшиваючий агент використовували глутаровий альдегід. Отриманий гель подрібнювали на частинки розміром 0,5-3 мм і просочували їх реакційною сумішшю акриламід, зшиваючого агента (N,N-метиленбісакриламід) та ініціатора полімеризації (натрій персульфат) з наступною полімеризацією акриламід і формуванням наповненого ПААм гідрогелю зі структурою подвійних сіток – жорсткої хітозанової, та еластичної поліакриламідної.

Відомо, що хітозан є рН чутливим полімером, здатність якого до розчинення знижується зі зменшенням кислотності середовища. З метою перевірки можливості використання отриманих композитів ПААм/хітозан в середовищах з різним рН було досліджено вплив концентрації йонів гідрогену на сорбційні характеристики синтезованих гідрогелів. Як досліджувані середовища використовували розчин оцтової кислоти (рН = 2,5), дистильовану воду (рН = 6,8) та розчин натрій гідроксиду (рН = 10). Показано, що присутність хітозанового гідрогелю спричинює зниження сорбційної ємності композитних гідрогелів порівняно з ненаповненим поліакриламідом. Водночас було виявлено, що рН чутливість хітозану (зниження водопоглинання зі зростанням показника рН) в композитних гелях нівелюється високою здатністю до водопоглинання ПААм-матриці, яка практично не залежить від реакції середовища.

Здатність синтезованих композитних гелів акумулювати полютанти або цільові речовини було досліджено з використанням модельного барвника аніонної природи метилового оранжевого (МО). Поглинання МО досліджували за допомогою фотометричного аналізу, вимірювання оптичної густини проводили за допомогою спектрофотометра ULAB 102 за 475 нм<sup>-1</sup>. Встановлено, що індивідуальний ПААм практично не поглинає МО – частка поглиненого барвника не перевищує 0,01 мг/г сухого гелю, тоді як присутність хітозану надає отриманим композитним гідрогелям здатність поглинати аніонний барвник з розчину. Максимальна величина поглинання, якої вдалося досягнути за час експерименту, становить 3,44 мг МО/г сухого гелю (за співвідношення ПААм/хітозан = 87,5:12,5 мас.ч.), при цьому з розчину було поглинуто близько 97 % барвника від його початкового вмісту.

## НОВІ АДУКТИ УГІ НА ОСНОВІ 2-АЗИДО-3-АРИЛПРОПАНОВИХ КИСЛОТ ТА 2,2-ДИМЕТОКСИЕТАН-1-АМІНУ

Боднар М.І., Тупичак М.А., Походило Н.Т.

Львівський національний університет імені Івана Франка,

[maksym.bodnar@lnu.edu.ua](mailto:maksym.bodnar@lnu.edu.ua)

Сучасні концепції енергоефективності та зеленої хімії висувають вимоги до хімічних методів, що застосовуються в синтезі біологічно активних сполук. Зокрема, все більшої популярності набувають мультикомпонентні реакції, які характеризуються високим ступенем перетворення та економією атомів. Серед таких реакцій останніми роками зростає інтерес до чотирикомпонентної реакції Угі.

Введення в реакцію Угі біфункціональних прекурсорів дозволяє поєднувати її в тандемі з іншими перетвореннями та забезпечує можливість подальших гетероциклізацій адуктів.  $\alpha$ -Азидокислоти та їх похідні є зручними прекурсорами для синтезу лікоподібних сполук. Азидна група може використовуватися як захищена аміногрупа або як попередник 1,2,3-триазольного циклу. Раніше нами було розроблено практичний метод синтезу 2-азидо-3-арилпропанових кислот, які є ефективними реагентами у реакції Угі [1]. У цьому дослідженні ми прагнули розширити сферу застосування 2-азидо-3-арилпропанових кислот у реакції Угі.

Перспективним є введення як амінокомпоненти 2,2-диметоксиетан-1-аміну, що містить захищену альдегідну групу. 2-Азидо-3-арилпропанові кислоти **1** вводили в чотирикомпонентну реакцію Угі з 2,2-диметоксиетан-1-аміном **2**, альдегідами **3** та ізонітрилами **4**. Реакцію проводили шляхом перемішування еквімолярної суміші реагентів у метанолі при кімнатній температурі протягом 20–60 хв. Продукти виділяли з реакційної суміші шляхом простого фільтрування без необхідності додаткового очищення, що узгоджується з сучасними концепціями зеленої хімії. У результаті було отримано серію нових лінійних аддуктів Угі **5** з високими виходами.

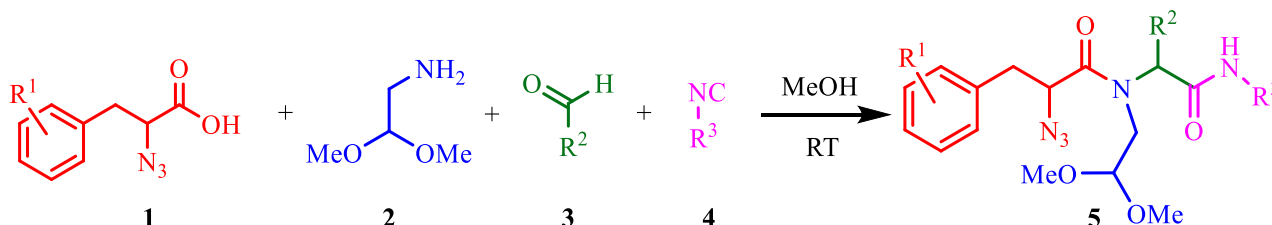


Рис. 1. Синтез аддуктів Угі **5**.

Синтезовані лінійні адукти містять захищені високоактивні аміно- та альдегідні групи, що робить їх зручними прекурсорами для подальших перетворень, зокрема гетероциклізацій.

1. Pokhodylo N., Tupyshak M., Goreshnik E., Obushak M. – *Synthesis*. – 2023. – 55. - 977–988.



## ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНА РИЦИНОВА ОЛІЯ В СИНТЕЗІ ПОЛІУРЕТАНІВ

*Брикова О.М., Ахранович О.Р., Робота Л.П., Савельєв Ю.В.*

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАНУ, [alexandra.brykova@gmail.com](mailto:alexandra.brykova@gmail.com)

Застосування відновлюваних ресурсів є дуже важливим в умовах масштабного забруднення навколишнього середовища. Молекулярний дизайн полімерних матеріалів з залученням відновлюваних ресурсів дозволяє ефективно замінити нафтохімічну сировину, підвищити екологічність та знизити їх ціну [1,2].

Олії з різноманітних олійних культур (соняшникова, рапсова, рицинова) важливі та доступні поновлювані ресурси для масштабного виробництва поліолів, необхідних для виробництва поліуретану [3]. Так як рицинова олія (РО) є нехарчовим споживчим продуктом з ціною нижчою за інші олії, вона є економічно доцільним сировинним ресурсом. РО містить у своїй структурі реакційноздатні гідроксильні групи і може використовуватись як поліол для синтезу поліуретанів (ПУ). Рівномірний розподіл гідроксильних груп в ланцюзі РО дозволяє синтезувати ПУ з рівномірно зшитою структурою, високими механічними характеристиками та термічною стабільністю [4].

Існує безліч стратегій хімічної функціоналізації структури рослинних олій шляхом введення гідроксильних груп і перетворення їх на реакційноздатні поліоли для синтезу ПУ. Поліоли на основі олій з різною структурою та функціями дозволяють синтезувати ПУ з необхідними механічними характеристиками [5]. Так як в складі поліуретанів вміст полільних складників складає близько 50-65%, розробки, направлені на заміну поліолів нафтохімічного походження на поліоли рослинного походження є на часі.

Нами синтезовано діетаноламід рицинолеат (ДЕАР) трансамідуванням рицинової олії діетаноламіном в масі в присутності трет-бутоксиду калію, як каталізатора.

ІЧ-спектри підтвердили реакцію взаємодії діетаноламіну з рициновою олією.

В ІЧ-спектрі ДЕАР наявні характеристичні смуги: інтенсивна смуга при  $1622\text{ см}^{-1}$ , яка може свідчити про наявність Амиду I третинного амиду для якого характерною є смуга валентних коливань в інтервалі частот  $1630\text{--}1670\text{ см}^{-1}$ . Про трансамідування свідчить відсутність в продукті реакції характеристичних смуг естерних фрагментів  $\nu(\text{C=O})$  ацилгліцеридів, які спостерігаються в області  $(1750\text{--}1735)\text{ см}^{-1}$  і проявляються в РО смугою поглинання при  $1745\text{ см}^{-1}$ .

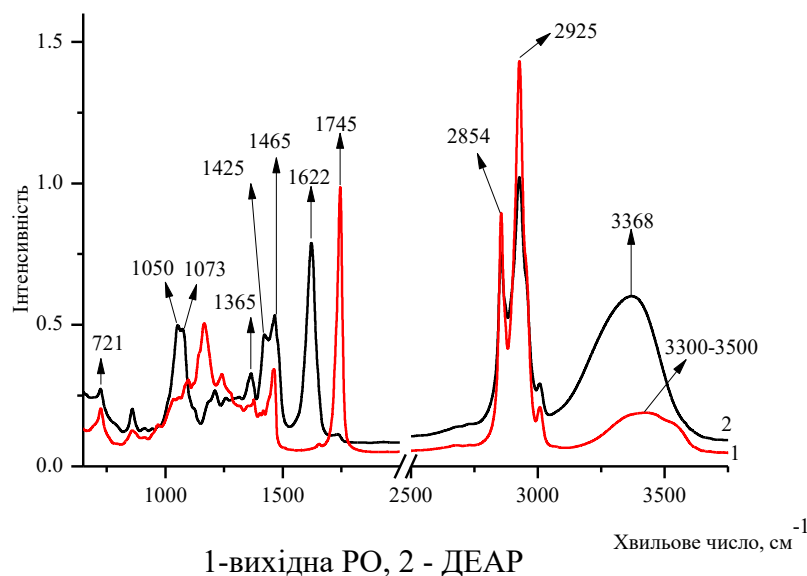


Рис. Фрагмент ІЧ-спектрів досліджуваних сполук.

Смуга при  $1365\text{ см}^{-1}$  та широка смуга середньої інтенсивності з максимумом при  $1062\text{ см}^{-1}$ , може характеризувати деформаційні коливання  $\delta(\text{C-O-H})$  зв'язку як первинних ОН-груп одержаного продукту, так і вторинних ОН-груп рицинолевої кислоти. Наявність асоційованих  $\nu(\text{O-H})$  груп підтверджується широкою інтенсивною смугою в інтервалі частот ( $3500 - 3000$ )  $\text{см}^{-1}$  із максимумом при  $3368\text{ см}^{-1}$ , яка може відповідати внутрішньо та міжмолекулярно асоційованим  $\nu(\text{O-H})$  групам як одержаних діолів моноацилгліцеролу рицинової олії, так і ОН-групам ди(гідроксиетил)амід рицинолеату.

Поліуретани отримано подовженням ДЕАР форполімеру [РО – ТДІ]. Об'єкт порівняння – ПУ, де в якості подовжувача макроланцюга використано діетаноламин (ДЕА).

ДЕАР-вмісний ПУ, що містить 71,4% природно поновлювальної сировини, порівняно з ДЕА-вмісним аналогом має нижчу міцність при розриві в 2,5 рази при незначному збільшенні подовження, що свідчить про пластифікуючий вплив довголанцюгових аліфатичних ( $\text{C}_{18}\text{H}_{34}$ ) фрагментів рицинолевої кислоти, які порушують міжмолекулярну взаємодію полярних фрагментів ПУ шляхом їх екранування. Рівень водопоглинання ДЕАР-вмісного ПУ - 0,35%, його аналога - 0,6%, що є наслідком гідрофобізуючого впливу жирнокислотного фрагмента рицинолевої кислоти. Так як і кислотний, і лужний гідроліз обумовлений дією агресивних чинників на полярні фрагменти макромолекули, якими в складі одержаних ПУ є уретанові та амідні фрагменти, то можлива асоціація третамідного фрагмента з атомами уретанового гідрогену ПУ може обумовлювати підвищення електронної густини на атомі нітрогену уретанового фрагмента ДЕАР-вмісного ПУ порівняно з його ДЕА-вмісним аналогом. Такий вплив може бути причиною зниження стійкості в кислому середовищі та його підвищення в лужному середовищі. Саме така залежність спостерігається щодо ДЕАР-вмісного ПУ, де він має дещо вищу стійкість порівняно з аналогом, а його стійкість в кислому середовищі вища в 1,75 рази вища.

1. Delavarde A., Savin G., Derkenne P., Boursier M., Morales-Cerrada R., Nottelet B., Pinaud J., Caillol S. Sustainable polyurethanes: toward new cutting-edge opportunities. - *Progress in Polymer Science*. - 2024. - V.151.- P.-101805-101857.

2. Brzeska J. A., Piotrowska-Kirschling A. A Brief Introduction to the Polyurethanes According to the Principles of Green Chemistry. – *Processes*. – 2021. – I. 9. – P.1929-1952.

3. Paraskar P.M., Kulkarni R.D. Synthesis of isostearic Acid/Dimer fatty acid-based polyesteramide polyol for the development of green polyurethane coatings. - *Journal of Polymers and the Environment*. - 2020.- Vol.29.- P.54-70.

4. Zhang C., Garrison Th. F., Madbouly S. A., Kessler M. R. Recent advances in vegetable oil-based polymers and their composites. - *Progress in Polymer Science*. - 2017. - № 71.- P. 91-143.

5. Ghasemlou M., Daver F. , Ivanova E., Adhikari B. Polyurethanes from seed oil-based polyols: A review of synthesis, mechanical and thermal properties. - *Industrial Crops and Products*. - 2019. – I. 142. - P. 111841-111862.

# ФУНКЦІОНАЛІЗАЦІЯ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБОК ШЛЯХОМ ПРИЩЕПЛЕННЯ ПОЛІМЕРНИХ ЦІТОК ДЛЯ СТВОРЕННЯ ГІБРИДНИХ МАТЕРІАЛІВ ІЗ «РОЗУМНИМИ» ВЛАСТИВОСТЯМИ

*Бугайчук Н.Ю.<sup>1</sup>, Чеботар А.С.<sup>1</sup>, Стецишин Ю.Б.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Національний університет «Львівська політехніка», Україна,  
[nataliia.buhaichuk.kht.2022@lpnu.ua](mailto:nataliia.buhaichuk.kht.2022@lpnu.ua)

Інтенсивний розвиток нанотехнологій сприяє розширенню спектра матеріалів із заданими властивостями. Гібридні наноматеріали поєднують характеристики різних за походженням матеріалів, наприклад, вуглецевих нанотрубок і полімерів, тоді як розумні матеріали здатні змінювати свої властивості у відповідь на зовнішні стимули (температуру, рН, електричне поле, світло тощо). Такі матеріали знаходять застосування в електроніці, медицині, енергетиці та екології.

У роботі здійснено функціоналізацію вуглецевих нанотрубок (ВНТ), що містять аміногрупи на поверхні, з метою отримання наноматеріалів із регульованими характеристиками. Функціоналізацію проводили у два етапи. На першому етапі до аміногруп ВНТ приєднано мультифункціональний ініціатор — олігопероксид із залишковими хлорангідридними групами. На другому етапі шляхом прищеплення полімерів до центрів ініціації на поверхні ВНТ сформовано полімерні щітки різної хімічної природи: (1) кополімеру акрилової кислоти з невеликим вмістом флуоресцеїн акрилату, (2) полі-N-ізопропілакриламід.

Функціоналізація ВНТ кополімером акрилової кислоти з невеликим вмістом флуоресцеїн-акрилату та полі-N-ізопропілакриламідом надає їм додаткових властивостей, зокрема водорозчинності, термо- та рН-чутливості, біосумісності, а також можливості флуоресцентного маркування.

Хімічний склад і морфологію одержаних матеріалів досліджено методами Фур'є-спектроскопії інфрачервоного випромінювання, рентгенівської дифракції, термогравіметричного аналізу та скануючої електронної мікроскопії. Вплив зовнішніх факторів оцінювали методом динамічного світлорозсіювання, варіюючи температуру в діапазоні 25–40 °С та рН середовища в межах 3–9. Встановлено, що функціоналізовані ВНТ демонструють зворотні зміни гідродинамічних розмірів, обумовлені контрольованими температурою та рН конформаційними перебудовами полімерних ланцюгів. Це, у свою чергу, призводить до утворення та руйнування агрегатів ВНТ, що може бути використано для розробки адаптивних наноматеріалів із керованими властивостями. Особливо перспективним напрямком виявилось поєднання двох різних типів функціоналізованих ВНТ. Було встановлено, що такі системи утворюють агрегати, розміри яких суттєво відрізняються від окремих функціоналізованих ВНТ. Це свідчить про взаємодію між карбоксильними групами прищепленого кополімеру акрилової кислоти з флуоресцеїн-акрилатом та амідними групами макромолекул полі-N-ізопропілакриламід. Отримані результати вказують на можливість створення стабільних наноструктур із контрольованими міжмолекулярними взаємодіями.

Отримані матеріали можуть бути перспективними для застосування в біомедичних технологіях, зокрема як біосенсори, системи контрольованої доставки лікарських засобів, а також у водоочищенні. Водночас, зважаючи на потенційні токсичні ефекти ВНТ, важливим залишається питання їхньої біобезпеки.



було встановлено, що іонна провідність полімерних іонних рідин та іонних рідин іоненового типу на основі морфоліну прямо пропорційно зростає зі зменшенням температури плавлення (склування), що підтверджено кореляційними залежностями між цими параметрами для кожної іонної рідини. Завдяки встановленим кореляційним залежностям стає можливим більш ефективно корегування пари катіон–аніон іонної рідини для забезпечення їх високого рівня іонної провідності при збереженні властивостей до дуже низьких температур.

Узагальнення результатів дослідження температури плавлення та іонної провідності іонних рідин іоненового типу дозволяє констатувати наявність цікавої закономірності у ряді іонних рідин іоненового типу з однаковим радикалом при катіонному центрі, що є залишком вихідних третинного діаміну, яка пов'язана зі зростанням іонної провідності іонних рідин зі зменшенням їх температури плавлення. Так, зниження температури плавлення іонних рідин іоненового типу C-1-21÷C-1-24 від  $-95^{\circ}\text{C}$  до  $-132^{\circ}\text{C}$  приводить до зростання питомої провідності від  $0,35 \cdot 10^{-3} \text{ См} \cdot \text{см}^{-1}$  до  $0,24 \cdot 10^{-1} \text{ См} \cdot \text{см}^{-1}$  іонних рідин іоненового типу. Враховуючи багатокomпонентність системи, встановлення кореляційних залежностей між властивостями іонних рідин іоненового типу проводили при виключенні з розгляду впливу ковалентного радіуса аніона. Вперше встановлено кореляційні залежності між температурою плавлення та іонною провідністю іонних рідин іоненового типу:

$$\begin{aligned} \text{ІРІТ C-1-21} \div \text{C-1-24} & (\sigma = -0,046 \cdot 10^{-2} T_{\text{пл}} - 4,7, r = -0,663); \\ \text{ІРІТ C-2-21} \div \text{C-2-24} & (\sigma = -0,024 \cdot 10^{-1} T_{\text{пл}} - 2,5, r = -0,990); \\ \text{ІРІТ C-3-21} \div \text{C-3-24} & (\sigma = -0,018 \cdot 10^{-1} T_{\text{пл}} - 1,9, r = -0,940); \\ \text{ІРІТ C-4-21} \div \text{C-4-24} & (\sigma = -0,030 \cdot 10^{-1} T_{\text{пл}} - 3,3, r = -0,989); \\ \text{ІРІТ C-20-1} \div \text{C-20-4} & (\sigma = -0,011 \cdot 10^{-1} T_{\text{пл}} - 1,1, r = -0,749). \end{aligned}$$

На підставі попередніх досліджень кореляційними рівняннями доведено залежності іонної провідності іонних рідин іоненового типу від їх радикала при катіонному центрі, що є залишком вихідних третинних діамінів. Так, відповідні кореляційні рівняння мають вигляд:

$$\begin{aligned} \text{ІРІТ C-1-22} \div \text{C-4-22, C-20-1}^* & (\sigma = -0,048 \cdot 10^{-2} T_{\text{пл}} - 4,5, r = -0,974); \\ \text{ІРІТ C-1-23} \div \text{C-4-23, C-20-3}^* & (\sigma = -0,066 \cdot 10^{-1} T_{\text{пл}} - 7,7, r = -0,984); \\ \text{ІРІТ C-1-24} \div \text{C-4-24, C-20-2}^* & (\sigma = -0,135 \cdot 10^{-1} T_{\text{пл}} - 16,9, r = -0,943); \\ \text{ІРІТ C-1-21} \div \text{C-4-21, C-20-4}^* & (\sigma = -0,087 \cdot 10^{-1} T_{\text{пл}} - 11,2, r = -0,999). \end{aligned}$$

Знайдені залежності й підтвердження їх кореляційним рівняннями надзвичайно важливі для подальшого синтезу полімерних іонних рідин та іонних рідин іоненового типу, що пов'язано з визначальними параметрами іонних рідин – температурою плавлення та іонною провідністю.

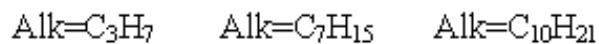
Враховуючи все вищесказане, є підстави стверджувати, що введення алільних і  $\beta$ -гідроксиетильних груп до четвертинного атома Нітрогену, наявність дибензилового фрагмента при катіонному центрі та радикалів алкілароматичної будови дозволить отримати полімерних іонних рідин іоненового типу з високим рівнем іонної провідності при низькій температурі склування.

Експериментальними дослідженнями встановлено, що зі збільшенням температури іонна провідність іонних рідин іоненового типу зростає, тобто за рахунок зниження в'язкості іонних рідин і зменшення сольватованості іонів відбувається збільшення швидкості руху цих іонів. Однак на підтвердження цієї гіпотези у даній роботі не наведено фізико-хімічних рохрахунків, що може бути основою подальших досліджень. Таким чином, узагальнення встановлених результатів попередніх і даних досліджень може бути сформульовано у вигляді наступного тезису: «Іонна провідність іонних рідин іоненового типу збільшується зі зменшенням температури плавлення та зростанням температури».

Вортман М.Я.<sup>1</sup>, Коптева Ж.П.<sup>2</sup>, Коптева Г.С.<sup>2</sup>, Лемешко В.М.<sup>1</sup>, Шевченко В.В.<sup>1</sup>

<sup>2</sup>Інститут мікробіології та вірусології ім.Д.К.Заболотного НАН України

Структуру комплексу гуанідинвісного олігомеру зі сріблом можна представити таким чином :



UV-Vis absorption spectrum of the polymer film. The x-axis is Wavelength nm. (190,00) from 200 to 700. The y-axis is unlabeled but ranges from 0 to 5. The curve shows a sharp peak around 210 nm and a broad absorption band peaking around 430 nm.

261



Як видно з рис.1 максимум поглинання комплексу 430 нм, що відповідає смузі поглинання срібла.

В таблиці представлені дані антибактеріальної активності комплексів зі сріблом на основі алкілзамісних олігомерів.

**Таблиця**

Зони пригнічення росту вуглеводеньокиснювальних бактерій  
під дією гуанідинвмісних олігомерів.

| Штами бактерій                 | Водні розчини 0,5 %               |                                    |                                     |
|--------------------------------|-----------------------------------|------------------------------------|-------------------------------------|
|                                | Комплекси зі сріблом              |                                    |                                     |
|                                | Алкілзамісні аліфатичні олігомери |                                    |                                     |
|                                | Alk=C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> | Alk=C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> | Alk=C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> |
| <i>P.pseudoalcaligenes</i> 109 | 18±0,17                           | 15±0,12                            | 20±0,22                             |
| <i>R.erythropolis</i> 102      | 24±0,23                           | 18±0,17                            | 20±0,21                             |
| <i>B.subtilis</i> 138          | 17±0,16                           | 14±0,12                            | 19±0,2                              |
| <i>P. aeruginosa</i> 27        | 25±0,26                           | 0                                  | 0                                   |
| <i>P. mendocina</i> 29         | 18±0,17                           | 0                                  | 0                                   |
| <i>St. maltophilia</i> 31      | 14±0,13                           | 20±0,21                            | 19±0,18                             |
| <i>P.pseudoalcaligenes</i> 8   | 23±0,18                           | 26±0,27                            | 29±0,3                              |
| <i>Pseudomonas. sp.</i> 100    | 17±0,16                           | 24±0,25                            | 19±0,2                              |
| <i>P. mendocina</i> 101        | 18±0,17                           | 22±0,21                            | 16±0,15                             |
| <i>Pseudomonas sp.</i> T/2     | 16±0,15                           | 20±0,21                            | 20±0,21                             |

Як видно з даних таблиці, комплекси аліфатичних алкілзамісних гуанідинівмісних олігомерів з нітратом срібла проявляють антибактеріальну дію щодо досліджених бактерій, діаметри зон затримки росту становлять 14-29 мм. На рис 2 представлені зони пригнічення росту бактерій за дією комплексів алкілзамісних гуанідинвмісних олігомерів з нітратом срібла.



**Рис.2.** Зони пригнічення росту *P.aeruginosa* 27 комплексами гуанідинвмісних аліфатичних аліолігомерів з нітратом сріблом  
1- Alk=C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>, 2- Alk=C<sub>10</sub>H<sub>21</sub>, 3- C<sub>7</sub>H<sub>15</sub> , 4- C<sub>7</sub>H<sub>15</sub>.

Комплекси аліфатичних алкілзамісних гуанідинівмісних олігомерів з Alk=C<sub>7</sub>H<sub>15</sub> та C<sub>10</sub>H<sub>21</sub> проявляють найбільшу активність, але для бактерій *P. mendocina* 29 та *P. aeruginosa* 27 найбільша активність спостерігалась дії олігомеру з Alk=C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>, тоді як інші олігомери не проявляли антибактеріальну дію.

Таким чином, олігоетергуанідинієві комплекси зі сріблом на основі алкілзамісних олігомерів проявляли високу антибактеріальну активність по відношенню до досліджених вуглеводеньокиснювальних бактерій, яка залежала від довжини алкільного радикалу олігомерів.

## РІДИННОФАЗНЕ ОКИСНЕННЯ АЛКІЛАРЕНІВ ОЗОНОМ

Галстян А.Г., Сидорук С.В., Волинець А.О.

Національний університет біоресурсів і природокористування України,

[aggaalst@nubip.edu.ua](mailto:aggaalst@nubip.edu.ua)

Необхідність рішення ряду екологічних проблем, розробка маловідходних технологічних процесів ведуть до безперервного підвищення інтересу до хімії озону. Особливу увагу викликає пошук шляхів створення високо селективних процесів озонування. В роботах [1-3] було висловлено припущення про те, що каталіз озонолітичних реакцій є областю, прикордонну між двома важливими типами хімічних перетворень: реакціями, що йдуть за участю іонів, і вільнорадикальними процесами. Було сформульовано основні принципи теорії селективного окиснення ароматичних вуглеводнів [3]. Зазначено, що селективність окиснення залежить, насамперед, від співвідношення швидкостей взаємодії озону з відновленою формою металу та ароматичним сполуками, а також від величини окиснювально-відновного потенціалу металу. Однак системних досліджень щодо каталітичного окиснення ароматичних сполук озonom у різних розчинниках, про вплив природи металу та окисного середовища в літературі відсутні.

Тому в роботі проведено системне дослідження реакції похідних бензену з озonom у рідкій фазі, з метою використання отриманих даних у подальших дослідженнях каталітичного окиснення аренів до відповідних ароматичних продуктів.

Нами встановлено, що у водному розчині швидкість окиснення ряду ароматичних сполук на 3 порядки вища, ніж у тетраклорметані. Знайдено, що добавка деяких органічних сполук у сотні разів знижує швидкість окиснення аренів у воді. Інгібуюча активність органічних сполук вимірюється симбатно з підвищенням швидкості реакції цих сполук з радикалом  $\text{HO}^\bullet$ . Формальдегід та ізопропиловий спирт цьому правилу не підкоряються. У порядку підвищення інгібуючої активності досліджувані сполуки утворюють наступний ряд:

| $\text{CH}_3\text{COCH}_3$ | $< (\text{CH}_3)_3\text{CONH}$ | $< \text{CH}_3\text{OH}$ | $< \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ | $< n\text{-C}_4\text{H}_9\text{OH}$ | $< \text{C}_5\text{H}_{11}\text{OH}$ |
|----------------------------|--------------------------------|--------------------------|-----------------------------------|-------------------------------------|--------------------------------------|
| $0,6 \cdot 10^8$           | $2,0 \cdot 10^8$               | $5,6 \cdot 10^8$         | $8,9 \cdot 10^8$                  | $22,0 \cdot 10^8$                   | $41,0 \cdot 10^8$                    |

(представлені відомі з літератури [4] значення констант швидкостей  $k/(mоль \cdot c)$ ) реакції цих сполук з радикалом  $\text{HO}^\bullet$  при 20 °C).

При окиснення бензену, бензенсульфонату натрію, бензойної кислоти та інших ароматичних сполук відбувається процес гідроксильовання. Утворені феноли є нестійкими проміжними продуктами, концентрація яких досягає кінетично рівноважного значення. Дослідження реакції озону з алкіларенами (толуен, 3-ксилен, кумен та 4-нітротолуен) показало, що вони реагують з озonom у водному середовищі з меншою швидкістю ніж бензен.

Дослідження процесу окиснення фенолів озonom викликає особливий інтерес, так як при озонуванні багатьох заміщених бензенів відбувається гідроксильовання. Озонограми процесу показують, що фенол реагує з озonom швидше ніж олефіни. На 1 моль фенолу поглинається приблизно 4,2 моль озону. Продукти озонолізу фенолу містять аліфатичні альдегіди і мурашину кислоту, кількість якої порівняна з кількістю прореагованого фенолу. Вже при концентрації фенолу  $2,0 \cdot 10^{-7}$  моль/л процес озонолізу перебігає у перехідній дифузійно-кінетичній області, при його концентрації  $4,0 \cdot 10^{-4}$  моль/л – у плівковому режимі окиснення. Зниження рН розчину зменшує швидкість озонолізу фенолу. Заміна атома гідрогену в  $-\text{OH}$  групі фенолу на  $-\text{CH}_3$ -групу приводить до помітного зниження швидкості озонування. Введення в молекулу фенолу другої  $\text{HO}$ -групи приводить до підвищення швидкості, а  $-\text{COOH}$ -групи – практично не впливає на швидкість озонолізу. У всіх випадках озонування фенолів насичені органічні сполуки інгібуючої дії не проявляли.

Проведені нами дослідження реакції окиснення бензену та його заміщених дозволяють відмітити ряд неописаних раніше факторів і закономірностей. Окиснення ароматичних сполук озonom у водних розчинах в присутності молекулярного кисню інгібують деякі

заміщені алкани, що є підтвердженням ланцюгового механізму реакції за участі  $\text{HO}^\bullet$  радикалів на стадії продовження ланцюгу. Заміщені бензену в залежності від швидкості і механізму окиснення можна розділити на три групи. Окиснення сполук першої групи, таких як нітробензен, хлорбензен, бензенсульфонат натрію, бензойна кислота, бензальдегід, бензиловий спирт, відбувається за цепним механізмом, що підтверджується приведеним вище кінетичним тестом. У початковий період окиснення одним з основних продуктів є фенол, константа швидкості реакції коливається у межах  $(1-60) \cdot 10^2 \text{ л/(моль} \cdot \text{с)}$ , в присутності інгібіторів вона зменшується у сотні разів і не перевищує  $0,5 \text{ л/(моль} \cdot \text{с)}$ .

Друга група включає алкілбензени, які інгібують окиснення озonom сполук першої групи. До другої групи слід віднести толуен, кумен, ксилени. Третя група складається з заміщених бензену, окиснення яких перебігає з високою швидкістю -  $10^3 - 10^5 \text{ л/(моль} \cdot \text{с)}$  і не інгібуються вище переліченими інгібіторами. До сполук третьої групи відносяться феноли та оксибензойні кислоти.

Окиснення ароматичних сполук озonom у водних середовищах представляє собою складний процес, який включає ряд молекулярних та радикальних реакцій. На основі літературних [1,2] та отриманих експериментальних даних запропоновано схему ланцюгового механізму озонолізу ароматичних сполук, яка пояснює особливості цього процесу:

|                      |                                                                                                                                                   |     |
|----------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| ініціювання ланцюга  | $\text{O}_3 + \text{HA} \rightarrow \text{O}_2 + \text{HO}^\bullet + \text{A}$                                                                    | (0) |
| розвиток ланцюга     | $\text{HO}^\bullet + \text{C}_6\text{H}_6 \rightarrow \text{C}_6\text{H}_5\text{OH}^\bullet$ (I)                                                  | (1) |
|                      | $\text{I} + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_6\text{H}_5\text{OH} + \text{HO}_2^\bullet$                                                           | (2) |
| розгалуження ланцюга | $\text{C}_6\text{H}_5\text{OH} + \text{O}_3 \rightarrow \text{C}_6\text{H}_5\text{O}^\bullet + \text{O}_2 + \text{HO}^\bullet$                    | (3) |
|                      | $\text{C}_6\text{H}_5\text{OH} + \text{O}_3 \rightarrow \text{R}'\text{H} \xrightarrow{\text{O}_3} \text{RH}$                                     | (4) |
| обрив ланцюга        | $\text{HO}^\bullet + \text{C}_6\text{H}_5\text{OH} \rightarrow \text{C}_6\text{H}_5\text{O}^\bullet + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{II}_1$ | (5) |
|                      | $\text{HO}^\bullet + \text{RH} \rightarrow \text{R}^\bullet \xrightarrow{\text{O}_2} \text{RO}_2^\bullet \rightarrow \text{II}_2$                 | (6) |

де  $\text{HA}$  – молекули, що здатні генерувати радикали в реакції з озonom (наприклад, вода, пероксид водню, органічні сполуки тощо);  $\text{RH}$  – насичені органічні сполуки;  $\text{R}'\text{H}$  – ненасичені сполуки;  $\text{II}_1$  та  $\text{II}_2$  – молекулярні продукти.

Ланцюговий механізм процесу обумовлений проходженням швидких реакцій утворення і перетворення гідроксициклогексаєнільних радикалів (1,2), властивості яких детально описані в літературі [5]. Продуктом окиснення цих радикалів є фенол (2), озонування якого приводить до утворення радикалів  $\text{HO}^\bullet$  (3) і низькомолекулярних сполук: гліоксалу, гліоксалиєвої та мурашиної кислот (4), які швидко окиснюються озonom. Фенол бере участь в реакціях розгалуження та інгібіювання ланцюгового процесу (5).

Розробленні уявлення щодо ланцюгового механізму озонолізу ароматичних сполук дозволяє пояснити високу швидкість реакції у водних середовищах, кінетику гідроксилування, шляхи одержання основних продуктів, вплив структури субстрату, можливість інгібіювання процесу, вплив структури інгібітора на його інгібуючу здатність тощо.

1. Pan, H.; Li, S.; Shu, M.; Cui, Q.; Zhao, Z. p-Xylene catalytic oxidation to terephthalic acid by ozone. - *Science Asia*. - 2018, V. 44, P. 212–217.
2. Pryor W.A. Norio O., Church D.F. Formation of a charge transfer complex, its thermal and the mechanism of decomposition of the hydrotrioxide. - *J.Am.Chem.Soc.* – 1982.- V.104. № 12. – P. 5813-5814.
3. Галстян Г.А., Тюпало Н.Ф., Галстян А.Г. Рідкофазне каталітичне окиснення ароматичних сполук озonom. – Луганськ: СХУ ім. В. Даля, 2009. – 415 с.
4. Галстян Г. А., Тюпало М. Ф., Розумовський С. Д. Озон та його реакції з ароматичними сполуками в рідкій фазі. - Луганськ: ВУНУ, 2004. - 272 с.
5. Bailey P.S. Ozonation in organic chemistry. Nonolefinic Compounds. N-Y, L. *Academic Press*, 2, 1982. – 497 p.

## ВИКОРИСТАННЯ БЕНЗЕНУ ЯК РОЗЧИННИКА ДЛЯ СИНТЕЗУ (1-ПЕНТИЛ)ТРИФЕНІЛФОСФОНІЙ БРОМІДУ

Горобей К.М., Листван В.В.

Житомирський державний університет ім. І.Франка, [grkosta30@gmail.com](mailto:grkosta30@gmail.com)

На сьогоднішній день існують багато способів синтезу фосфонієвих солей: синтез  $\pi$ -кон'югованих фосфонієвих солей при опроміненні видимим світлом з використанням кисню як окислювача [1]; взаємодія фосфінів з галогенами [2]; з оксидів фосфіну та реактиву Грін'єра [3]. Проте, найпоширеніший та простий метод синтезу – взаємодія фосфінів з органічними галогенопохідними. [4]

Для синтезу було використано такі маси та об'єми речовин:

- 1) 0,028 моль 1-бромопентан,  $m = 7,3$  г;
- 2) 0,028 моль трифенілфосфіну,  $m = 4,23$  г,  $V = 3,47$  мл;
- 3) 0,128 моль бензену,  $m = 10$  г,  $V = 11,4$  мл.

Для синтезу ми зібрали установку, що складається з: зворотнього холодильника, колби-реактора та піскової бані. Далі трифенілфосфоній додали в колбу на 100 мл та розчинили його в бензені. Після цього додали 1-бромопентан, встановили зворотній холодильник та кип'ятили протягом 6 годин ( $T = 80^\circ\text{C}$ ).

Після завершення реакції продукт почав осаджуватись у вигляді білих грудок. В цілях економії розчинник був відігнаний. Вихід необхідного продукту становив 7,8 г (67%).

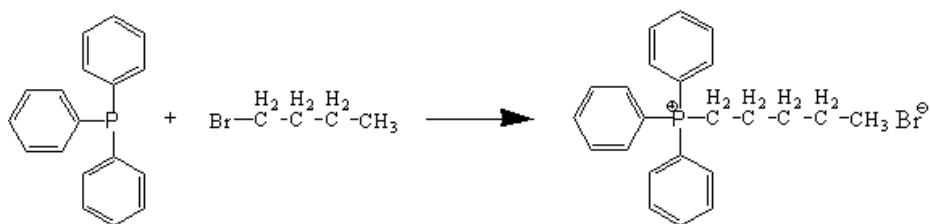


Рис. 1. Рівняння реакції утворення (1-пентил)трифенілфосфоній броміду.

Для ідентифікації речовини були використані такі методи:

1) Визначення бромід-аніона: невелику кількість солі ми розчинили у воді та додали розчин аргентум (I) нітрату. Утворився світло-жовтий осад аргентум (I) броміду;

2) Проба Бейльштейна: на розжарену мідну дротинку нанесли невелику кількість речовини та внесли у полум'я пальника. Полум'я набуло слабого зеленого кольору. Паралельно були проведені холості проби з 1-бромопентаном та трифенілфосфіном. У першому випадку забарвлення було інтенсивно зеленим, а в другому – забарвлення не спостерігалось;

3) Визначення температури плавлення: в джерелі [5] вказано, що температура плавлення (1-пентил)трифенілфосфоній броміду становить  $164 - 166^\circ\text{C}$ . Нами було встановлено, що температура плавлення перебуває у вказаних межах.

Отже, можна зробити висновок, що бензен, як низькокиплячий розчинник, підходить для синтезу солей фосфонію. Також його перевагою є його доступність та поширеність в лабораторіях.

1. Wu M. et al. A green approach for the synthesis of  $\pi$  conjugated phosphonium salts under visible-light irradiation using air as oxidant. – 2024.

2. Godfrey S.M. et al. Structural dependence of the reagent  $\text{Ph}_3\text{PCl}_2$  on the nature of the solvent, both in the solid state and in solution; X-ray crystal structure of trigonal bipyramidal  $\text{Ph}_3\text{PCl}_2$ , the first structurally characterised five-coordinate  $\text{R}_3\text{PCl}_2$  compound.

3. Vetter A. C. et al. Long sought synthesis of quaternary phosphonium salts from phosphine oxides: inverse reactivity approach.

4. УДК 547.588.1+547.241. В.М. Листван, В.В. Листван, А.В. Малішевська, С.Є. Дейнека. Фосфонієві солі як потенційні антимікробні засоби.

5. (1-pentyl)triphenylphosphonium bromide, 98%, Thermo Scientific Chemicals.

## ТЕРМОСТІЙКІ ПІНИ НА ОСНОВІ ПОЛІЦІАНУРАТИВ

*Гусакова К.Г.<sup>1</sup>, Старостенко О.М.<sup>1</sup>, Шульженко Д.М.<sup>1</sup>, Файнлейб О.М.<sup>1</sup>, Гранде Д.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України, [polymernano@ukr.net](mailto:polymernano@ukr.net)

<sup>2</sup> Université de Strasbourg, CNRS, Institut Charles Sadron, France

Розвиток сучасної техніки неможливо уявити без полімерних композиційних матеріалів (ПКМ). Зокрема, розробники авіаційної і космічної техніки давно і широко використовують ПКМ і висувають високі вимоги до їх властивостей. Особливу увагу приділяють термостійким полімерним матеріалам, які поєднують високу міцність на розтягнення та при стиску, низьку щільність, хорошу стійкість до ушкоджень, низьку теплопровідність, низьку діелектричну константу і застосовуються в інженерних конструкціях морських та аерокосмічних програм. До таких матеріалів відносяться полімерні піни.

У даній роботі, розроблено спосіб синтезу термостійких пін на основі поліціануратів різної хімічної будови та досліджено хімічну і фазову структуру, морфологію та фізико-хімічні властивості отриманих матеріалів. Для синтезу зразків пористих поліціануратних (ПЦ) пін як ціанатний мономер використовували 2,2-біс-4-ціанатофенілпропан (диціановий естер бісфенолу А, ДЦБА), 1,1'-біс-4-ціанатофенілетан (диціановий естер бісфенолу Е, ДЦБЕ) або оліго-3-метилен-1,5-феніленціанат (торговельні марки РТ-15 і РТ-30) виробництва Lonza (Швейцарія) (Рис. 1 а-в). Як спінювач було використано азодикарбонамід під торгівельною маркою SBZ-1 (РЕАТЕКС, Україна) хімічної формули, наведеної на рис. 1г, а як поверхнево-активні речовину – поліметилсилоксан (ПМС) (Wacker Chemie AG, Німеччина) хімічної формули, наведеної на рис. 1д. Додатково як каталізатор реакції поліциклотримеризації ціанатів було використано ефективну каталітичну суміш 4 мас.% нонілфенолу (виробництва Sigma-Aldrich) та 0,032 мас.% ацетилацетонату цинка (виробництва Sigma-Aldrich) у перерахунку на кількість ціанатного мономера, що використовувався.

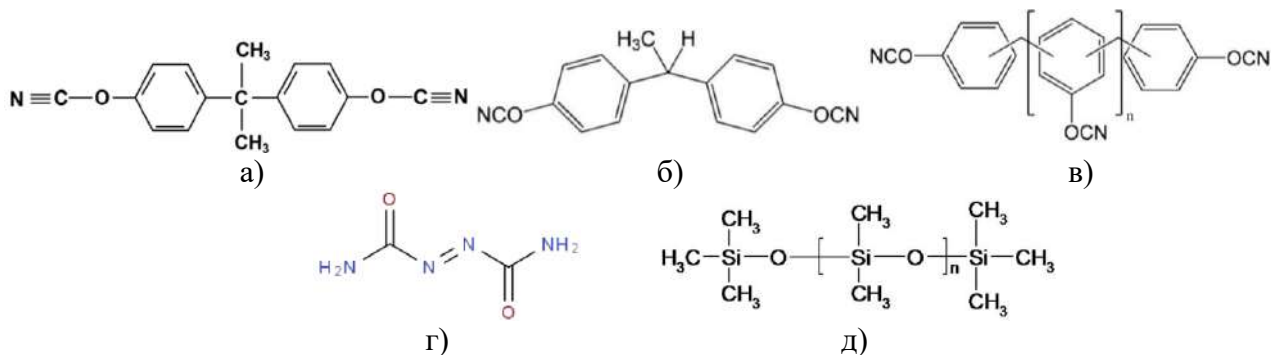


**Рис. 1.** Хімічні формули (а) ДЦБА, (б) ДЦБЕ, (в) РТ-15 чи РТ-30, (г) азодикарбонамиду і (д) поліметилсилоксану.

Синтез зразків проводили наступним чином. Спочатку проводилася олігомеризація шляхом змішування ціанатного мономера (ДЦБА, ДЦБЕ, РТ-15 або РТ-30) з каталітичною сумішшю за температур 105–150 °С протягом (15–95) хв за допомогою магнітної мішалки зі швидкістю  $v \sim (600\text{--}1300)$  об/хв. Далі реакційну суміш охолоджували і за температури 125 °С додавали 2,5 мас.% (в розрахунку на ціанатний мономер) ПМС та продовжували перемішування протягом 15 хв зі  $v \sim 1500$  об/хв. Потім реакційну суміш охолоджували і за  $T \sim 105$  °С вводили спінювач SBZ-1 у кількості 1 мас.% і проводили гомогенізацію отриманої суміші протягом 15 хв зі  $v \sim (1300\text{--}1500)$  об/хв. Тверднення проводили за наступним температурно-часовим ступеневим режимом: 100 °С – 15 хв; 120 °С – 15 хв; 140 °С – 15 хв; 160 °С – 15 хв; 180 °С – 30 хв; 200 °С – 30 хв; 220 °С – 30 хв; 250 °С – 120 хв. Таким чином отримано наступну серію зразків поліціануратних пін: ПЦ(А), ПЦ(Е), ПЦ(РТ15) і ПЦ(РТ30), синтезованих, відповідно, з мономерів ДЦБА, ДЦБЕ, РТ-15 і РТ-30.



Оцінку пористої структури проводили з використанням рентгенівської томографії за допомогою рентгенівського мікротомографа EasyTom 150/160 компанії RX Solutions. Мікрофотографії синтезованих ПЦ пін наведено на рис. 2, а обрахований середній розмір пор подано на рис.3.

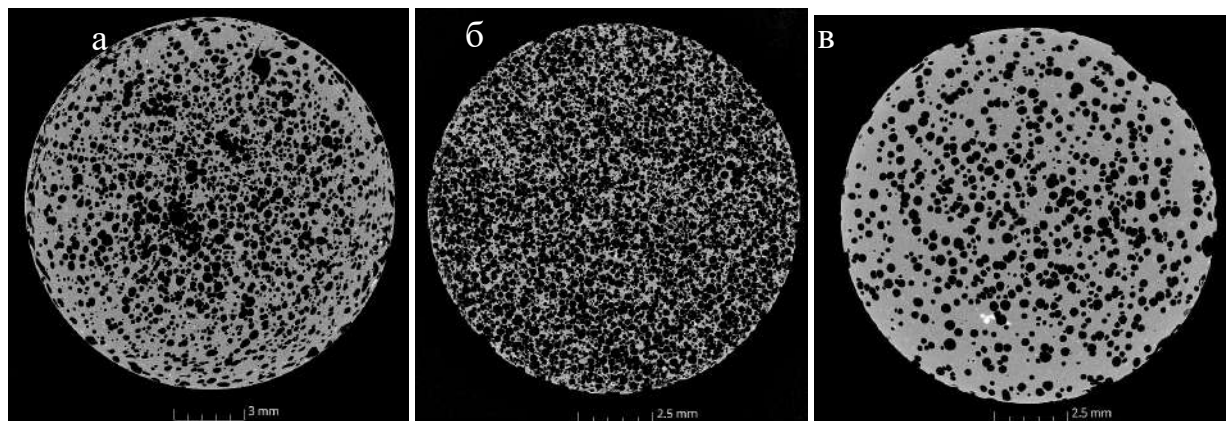


**Рис. 2.** Мікрофотографії, одержані за допомогою рентгенівської томографії, термостійких пін на основі поліціануратів з (а) ДЦБА, (б) ДЦБЕ, і (в) РТ-15.

Однією з найважливіших характеристик полімерних пін на основі термостійких полімерів для високотехнологічних галузей є їхня легкість. Це особливо важливо для авіаційної та космічної техніки, де зниження ваги прямо впливає на зменшення витрат енергії та підвищення ефективності. Тому в даній роботі було проведено вимірювання густини та розраховано пористість синтезованих зразків пін, одержані результати подано на рис. 3.

Насипну густину  $\rho_{\text{пін}}$  визначали гравіметричним методом (методом прямого вимірювання густини) за формулою  $\rho_{\text{пін}} = m/V$ , де  $m$  і  $V$ , відповідно, маса і об'єм зразків пін. Для розрахунку пористості  $P$  матеріалу за густиною було використано формулу  $P = (1 - \rho_{\text{пін}}/\rho_{\text{моноліт}}) \times 100$ , де  $\rho_{\text{пін}}$  – густина піни, а  $\rho_{\text{моноліт}}$  – густина монолітного (непористого) матеріалу.

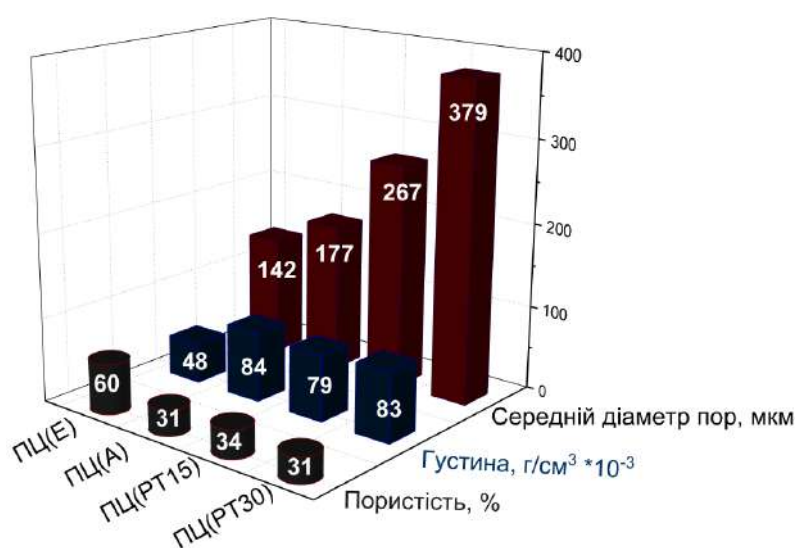


**Рис. 3.** Пористість, густина і середній діаметр пор синтезованих термостійких пін на основі поліціануратів з ДЦБА, ДЦБЕ, РТ-15 і РТ-30 (вказано на графіку).



Із наведених даних видно, що в результаті синтезу усіх досліджуваних зразків формується достатньо однорідна розвинена пориста структура з великою кількістю пор. Середній діаметр пор синтезованих пінь зростає від 142 мкм для ПЦ(Е) до 177 мкм для ПЦ(А), далі до 267 мкм для ПЦ(РТ15) і становить 379 мкм для ПЦ(РТ30). Очевидно, що в'язкість вихідного олігомеру має вирішальне значення для процесу спінювання, а кінетика тверднення може різко змінити процес гелеутворення, що й відбивається на формуванні різної кількості і різного розміру пор у кінцевому матеріалі. Із рис. 3 видно, що густина усіх пінь варіюється в межах 0,48-0,84 г/см<sup>3</sup>, що є значно нижче у порівнянні з монолітними зразками ціанатів, густина яких становить 1,2-1,25 г/см<sup>3</sup>.

Для оцінки теплоізоляційних властивостей методом перехідного плоского джерела було визначено теплопровідність (k), дифузійність і питому теплоємність одержаних зразків пінь (Рис. 4). Як відомо, за наявності пористої структури теплопровідність має зменшуватися, оскільки повітря, що знаходиться всередині пор створює ізоляційний бар'єр. Встановлено, що величина k знижується з 0,251 Вт/мК для непористої матриці до 0,08-0,16 Вт/мК для пористих зразків пінь у залежності від вихідного складу композиції та загальної пористості досліджуваних зразків, яка становить 31-60 %.

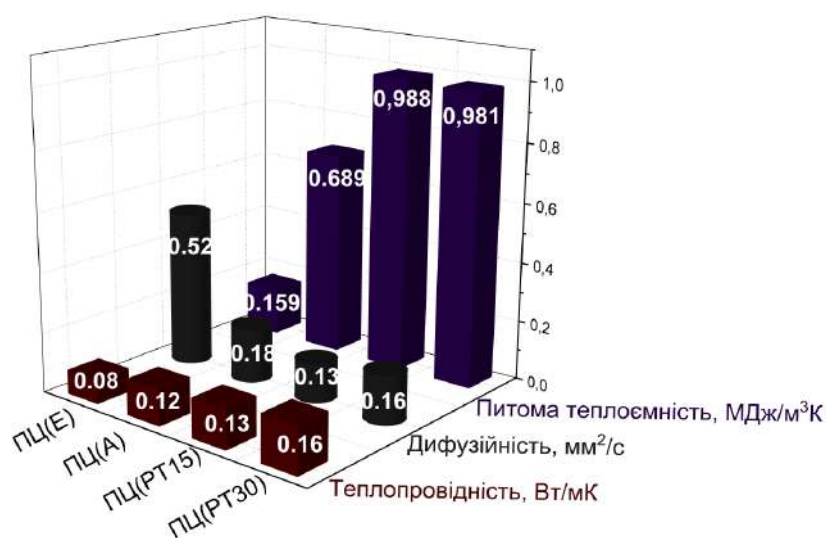


**Рис. 4.** Теплопровідність, дифузійність і питома теплоємність пор синтезованих термостійких пінь на основі поліціануратів з ДЦБА, ДЦБЕ, РТ-15 і РТ-30 (вказано на графіку).

Таким чином, розроблено спосіб синтезу та синтезовано і досліджено серію зразків пінь на основі термостійких ПЦ з використанням різних типів ціанатних мономерів. Знайдено, що варіюючи в'язкість вихідної реакційної суміші можна отримати полімерні піни з середнім розміром діаметра пор від ~142 мкм до ~379 мкм. Встановлено, що одержані зразки ПЦ пінь можуть використовуватися як ефективні теплоізоляційні піноматеріали зі значеннями теплопровідності до 0,16 Вт/мК.

**Подяка.** Автори вдячні за часткову фінансову підтримку даної роботи НАН України і CNRS в рамках спільного українсько-французького міжнародного дослідницького проєкту «ПОЛІТЕРМАТ». Щира подяка від Д.М. Шульженко за часткову фінансову підтримку цієї роботи в рамках стипендії «НАДІЯ» (2024) від Посольства Франції в Україні.

# ВПЛИВ ПРИРОДИ КИСЛОТИ НА КАТАЛІТИЧНУ АКТИВНІСТЬ КЛІНОПТИЛОЛІТУ В РЕАКЦІЇ ГЛІЦЕРИНУ З ОЦТОВОЮ КИСЛОТОЮ

*Давтян А.С., Левченко О.О., Камалов Г.Л.*

Фізико-хімічний інститут ім. О.В. Богатського НАН України, [araksya2103@gmail.com](mailto:araksya2103@gmail.com)

Зіставлені каталітичні властивості природного кліноптилоліту (CLI, Сокирницьке родовище, Закарпатська обл.) модифікованого сірчаною (H-CLI(1)) та нітратною (H-CLI(2)) кислотами в реакції гліцерину (GL) з оцтовою кислотою (AA).

Модифікацію проводили протягом 3 год, концентрація сірчаної кислоти складала 0,5 моль/л, а нітратної – 3 моль/л.

Кліноптилоліт належить до одного з найбільш поширених природних цеолітичних мінералів, унікальною перевагою якого є його фізичні, хімічні, адсорбційні та каталітичні властивості. Первинною будівельною одиницею цеолітового каркасу є тетраedr, центр якого зайнятий атомом кремнію або алюмінію, а на вершинах розташовані чотири атоми кисню.

Для збільшення сорбційної здатності, селективності та зміни поверхневих властивостей, цеоліти піддають модифікації з використанням фізичних або хімічних методів. Модифікація CLI кислотами дає змогу регулювати його гідрофобні/гідрофільні властивості. Унаслідок кислотної обробки відбувається видалення алюмінію із кристалічного каркаса, що призводить до збільшення питомої площі поверхні зразків, зменшення ширини пор, зменшення адсорбції водяної пари та підсилює гідрофобні властивості CLI.

Як видно з табл. 1, в обох випадках із збільшенням температури реакції конверсія GL ( $Z_{GL}$ ), його початкова швидкість витрати ( $W_{GL}^0$ ) та початкові швидкості накопичення продуктів реакції збільшуються. При 75°C величина  $Z_{GL}$  у випадку зразка модифікованого нітратною кислотою на 14% вище, але при 110°C ці величини порівнянні.

Незалежно від температури реакції, домінуючим продуктом є моноацетин (MA). Однак із зменшенням температури його селективність (S) зростає на 36% при модифікації нітратною кислотою та на 28% при модифікації сірчаною. А селективність по діацетину (DA) зменшується майже на 30% в обох випадках. При 75°C триацетин (TA) не утворюється, а при 110°C утворюється із селективністю в межах 1-6%.

**Таблиця**

Вплив природи кислоти на каталітичну активність кліноптилоліту

(GL:AA = 1:9, 5 %мас., 4 год)

| H-CLI(1) |              |                                                     |                                                     |                                                     |                                                     |              |              |              |
|----------|--------------|-----------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|--------------|--------------|--------------|
| T, °C    | $Z_{GL}, \%$ | $W_{GL}^0 \cdot 10^4, \text{моль/л} \cdot \text{с}$ | $W_{MA}^0 \cdot 10^4, \text{моль/л} \cdot \text{с}$ | $W_{DA}^0 \cdot 10^4, \text{моль/л} \cdot \text{с}$ | $W_{TA}^0 \cdot 10^4, \text{моль/л} \cdot \text{с}$ | $S_{MA}, \%$ | $S_{DA}, \%$ | $S_{TA}, \%$ |
| 75       | 52           | 0,63                                                | 0,40                                                | 0,03                                                | 0                                                   | 92           | 8            | 0            |
| 110      | 89           | 2,18                                                | 2,13                                                | 0,58                                                | 0,10                                                | 56           | 37           | 6            |
| H-CLI(2) |              |                                                     |                                                     |                                                     |                                                     |              |              |              |
| T, °C    | $Z_{GL}, \%$ | $W_{GL}^0 \cdot 10^4, \text{моль/л} \cdot \text{с}$ | $W_{MA}^0 \cdot 10^4, \text{моль/л} \cdot \text{с}$ | $W_{DA}^0 \cdot 10^4, \text{моль/л} \cdot \text{с}$ | $W_{TA}^0 \cdot 10^4, \text{моль/л} \cdot \text{с}$ | $S_{MA}, \%$ | $S_{DA}, \%$ | $S_{TA}, \%$ |
| 75       | 38           | 0,48                                                | 0,30                                                | 0,02                                                | 0                                                   | 97           | 3            | 0            |
| 110      | 83           | 2,02                                                | 1,57                                                | 0,30                                                | 0,05                                                | 69           | 30           | 1            |

Таким чином, слід зазначити, що незважаючи на природу кислоти та його концентрації для модифікації природного CLI, в процесі реакції GL з AA не спостерігаються значні зміни величин початкової швидкості витрати GL, його конверсії та величин швидкості накопичення продуктів реакції.

## MALDI-TOF МАС-СПЕКТРОМЕТРИЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ОСНОВ ШИФФА ГОСИПОЛУ

*Дикун О.М.<sup>1</sup>, Аніщенко В.М.<sup>1</sup>, Кузема П.О.<sup>2</sup>, Редько А.М.<sup>1</sup>, Рибаченко В.І.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАН України,  
[amdykun@gmail.com](mailto:amdykun@gmail.com)

<sup>2</sup>Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Основи Шиффа госиполу – це сполуки на основі поліфенолу рослинного походження, госиполу. На сьогоднішній день відомо, що основи Шиффа госиполу безпечніші для клітин і мають значно менше негативних біологічних проявів ніж вихідний госипол. Серед них знайдено сполуки, що *in vitro* пригнічують розмноження вірусів, ракових клітин, є активними як антиоксиданти, інсектициди та ін. [1, 2]. Це обумовлює інтерес до синтезу, ідентифікації і дослідження фізико-хімічних властивостей сполук цього класу.

Для дослідження основ Шиффа госиполу застосовується багато різних спектроскопічних і квантово-хімічних методів [3]. Однак в першу чергу після синтезу нового імінопохідного необхідно провести ідентифікацію і підтвердити структуру одержаної сполуки.

Мас-спектрометрія використовується як потужний аналітичний інструмент у багатьох галузях науки, що обумовлено суттєвими перевагами у вибірковості і чутливості порівняно зі спектроскопічними методами. Серед широкого різноманіття видів мас-спектрометрії вигідно вирізняється матрично-активована лазерно десорбційна/іонізаційна часопротітна мас-спектрометрія (MALDI-TOF MS), вперше представлена у 1987 році Карасом і Гілленкампом [4]. Цей метод забезпечує м'яку іонізацію зразка і має такі переваги як: швидкість аналізу, висока чутливість, легкість пробопідготовки і малий об'єм зразка, висока толерантність до солей та інших забруднювачів, висока пропускна здатність.

У даній роботі проведено ідентифікацію і аналіз вперше синтезованих основ Шиффа госиполу з 3,4-дигідроксibenзиламіном і 3-йодбензиламіном. За допомогою методу безматричної лазерно десорбційної/іонізаційної часопротітної мас-спектрометрії (LDI-TOF MS) в режимі реєстрації позитивно заряджених іонів. Визначено ключові фрагментні іони, що дозволяють ідентифікувати досліджувані сполуки за відсутності піку молекулярного іону у мас-спектрі (рис. 1).

У мас-спектрах в режимі реєстрації позитивно заряджених іонів усіх досліджуваних сполук чітко спостерігаються піки при  $m/z$  483 і  $m/z$  498-500. Пік при  $m/z$  483 відповідає протонованому ангідрогосиполу і є характеристичним піком для госиполу і його імінопохідних, що спостерігається в мас-спектрах з використанням різних способів іонізації – електронної (EI), електроспрей-іонізації (ESI), бомбардування швидкими атомами (FAB), польової десорбції і хімічної іонізації (як газ-реагент використовували аміак). Для піків в діапазоні  $m/z$  496-500 нами запропоновано декілька варіантів інтерпретації, але всі ці варіанти вказують на повний або частковий відрив імінних фрагментів від молекул імінопохідних госиполу, що є важливою структурною інформацією для ідентифікації одержаних сполук. Також у спектрах досліджуваних сполук реєструються піки іонів імінних фрагментів, що виникають внаслідок розриву азометинового зв'язку (C-N).

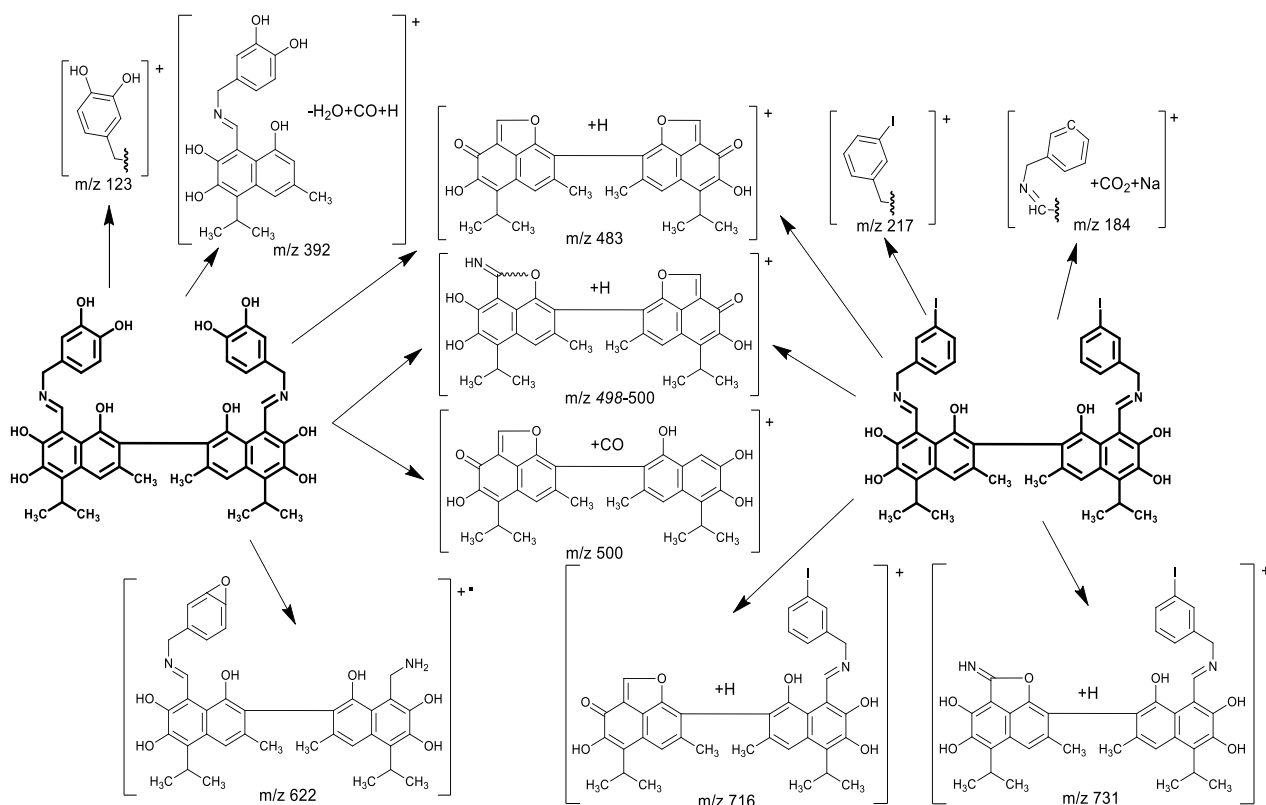


**Рис. 1.** Можлива фрагментація досліджуваних основ Шиффа госсиполу згідно з даними LDI-TOF мас-спектрів в режимі позитивно заряджених іонів.

Таким чином, за допомогою методу MALDI-TOF MS, нами підтверджено будову нових основ Шиффа госсиполу. Встановлені структурно значущі фрагментні іони у мас-спектрах в режимі реєстрації позитивно заряджених іонів, що дозволяє проводити ідентифікацію без наявності піку молекулярного іону.

1. Kenar, J. A. Reaction Chemistry of Gossypol and Its Derivatives. *J. Am. Oil Chem.' Soc.* - 2006. – 83. - 269–302.
2. Liu, Y.; Wang L.; Zhao, L.; Zhang, Y. Structure, properties of gossypol and its derivatives – from physiological activities to drug discovery and drug design. *Nat. Prod. Rep.* – 2022. – 39. - 1282-1304.
3. Dykun, A. M.; Anishchenko, V. N.; Redko, A. N.; Rybachenko, V. I.; Chotiy, K. Y. Spectroscopic and quantumchemical study of gossypol imine derivatives. *J. Mol. Struct.* – 2019. - 1179. - 289–296.
4. Yang, Y.; Gao, D.; Qian, R.; Jiang Y. Polydopamine-Modified TS-1 Zeolite Framework Nanoparticles as a Matrix for the Analysis of Small Molecules by MALDI-TOF MS. *ACS Omega* 2020. – 5. - 19952–19959.

## АМІДУВАННЯ 2-ЕТИЛГЕКСАНОВОЇ КИСЛОТИ МОНОЕТАНОЛАМІНОМ У ПРИСУТНОСТІ ГОМОГЕННИХ КАТАЛІЗАТОРІВ

*Захарко Н.О., Мельник С.Р.*

Національний університет «Львівська політехніка», [nazar.o.zakharko@lpnu.ua](mailto:nazar.o.zakharko@lpnu.ua)

Алкоаноламіді є неіоногенними поверхнево-активними речовинами, компонентами миючих і косметичних засобів, фармацевтичних препаратів тощо. Основним методом їх одержання є взаємодія карбонових кислот та їхніх естерів з аміноспиртами [1, 2]. Застосування каталізатора скорочує тривалість відповідних реакцій [3]. З врахуванням різноманітності реагентів, насамперед карбонових кислот та їхніх похідних, та широкого спектру можливих каталізаторів дослідження закономірностей реакції амідування є актуальним і перспективним.

Метою дослідження було визначити вплив гомогенних кислотного і основного каталізаторів на перебіг амідування 2-етилгексанової кислоти (ЕГК) моноетаноламіном (ЕА).

Як каталізатори застосовували *n*-толуенсульфонову кислоту (*n*ТСК) і гідроксид калію. Концентрація каталізатора становила  $5,5 \cdot 10^{-3}$  моль/дм<sup>3</sup>. Закономірності взаємодії між 2-етилгексановою кислотою і моноетаноламіном досліджено за температури 155 °С, мольного співвідношення ЕА : ЕГК – 1 : (1,05–1,12). У продуктах реакції кондуктометрично визначали кислотне (КЧ) і амінне число (АЧ) та хроматографічно вміст утвореної води.

Амідування 2-етилгексанової кислоти закономірно розпочинається з утворення етаноламонієвої солі та виділенням значної кількості теплоти, відтак відбувається розклад солі з утворенням в основному цільового продукту 2-(*N*-гідроксіетил)-2-етилгексаноатаміду, про що свідчить зменшення початкового АЧ реакційної суміші – зі 167 до 142 мг НСІ/г за відсутності каталізатора та зі 162 і 163 до 123 і 138 мг НСІ/г в присутності *n*ТСК і КОН, відповідно.

Згідно дуже низьких значень КЧ реакційної суміші (25,7, 37,5 і 38,3 мг КОН/г за відсутності каталізатора і за умови каталізу *n*ТСК і КОН) за 80 хв перетворення основна частина реагентів залишається зв'язаною у вигляді солі протягом усього часу їх перетворення.

Встановлено, що в присутності каталізаторів кількість виділеної під час реакції води перевищує кількість прореагованого алканоламіну на 22,7 і 33,9 % за умови каталізу *n*ТСК і КОН реакції між 2-етилгексановою кислотою та моноетаноламіном, відповідно. Очевидно, що *n*-толуенсульфорова кислота і гідроксид калію поряд із реакцією амідування сприяють перебігу реакції естерифікації кислоти моноетаноламіном.

Загалом встановлено, що за 80 хв реакції конверсія ЕГК в присутності гомогенних кислотного (30 %) і основного (22 %) каталізаторів є вищою за конверсію цієї кислоти в некаталітичній реакції (15 %).

Отримані результати вказують на ефективність застосування гомогенних каталізаторів, насамперед *n*-толуенсульфорової кислоти, в реакціях між 2-етилгексановою кислотою та моноетаноламіном.

1. Dinesh K. Amjad A. Direct synthesis of fatty acid alkanolamides and fatty acid alkyl esters from high free fatty acid containing triglycerides as lubricity improvers using heterogeneous catalyst // *Fuel*. – 2015. – Vol. 159. – P. 845-853.

2. Wang X., Wang T., Wang X. An Improved Method for Synthesis of N-stearoyl and N-palmitoylethanolamine // *J. Am. Oil. Chem. Soc.* – 2012. – Vol. 89. – P. 1305-1313.

3. Päävi M., Anastasia T., Inkar D. Thermal and Catalytic Amidation of Stearic Acid with Ethanolamine for Production of Pharmaceuticals and Surfactants // *Topics in Catalysis*. – 2016. – Vol. 59. – Iss. 13–14. – P. 1151–1164.

## ВИКОРИСТАННЯ БІОРОЗКЛАДНИХ ПОЛІМЕРІВ В СУЧАСНОМУ СВІТІ

*Зимнік Д.В., Віленський В.О.*

Житомирський державний університет імені Івана Франка,

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

Інтенсивне виробництво та використання полімерних матеріалів призводить до забруднення ґрунтів, водойм та атмосфери, спричинюючи серйозну загрозу для екосистем та здоров'я людини.

У цьому контексті виникає потреба у створенні нових матеріалів, які були б екологічно чистими та ефективними. Останнім часом, біорозкладні полімери (біополімери) привернули велику увагу завдяки своїм властивостям, що робить їх перспективними матеріалами для вирішення проблем забруднення навколишнього середовища та високоефективними в багатьох сферах застосування.

Відомо, що біорозкладні полімери мають безліч переваг, з якими не можуть зрівнятися традиційні матеріали. Їх здатність до розкладання відповідає вимогам зеленої хімії та захисту навколишнього середовища, а шкода для організму людини вже є менш серйозною у порівнянні із звичайними матеріалами [3]. Тим не менш, у біорозкладних полімерів все ще є великий простір для розвитку та вдосконалення, щоб надалі вони могли краще застосовуватись у повсякденному житті та виробництві.

За сучасною класифікацією існує чотири основні методи виробництва біорозкладних полімерів. Серед них хімічні методи синтезу, методи бактеріального синтезу, виробництво біорозкладних полімерів з відновлюваних джерел та сумішей біополімерів. Методи хімічного синтезу передбачають обробку кислотами та лугами агро та харчових відходів для вилучення лігніну та целюлозних матеріалів. Процеси переробки утворюють функціональні групи ( $C=O$ ,  $C-O-C$  та ін.), які впливають на механічні властивості біополімеру. Крім того, у результаті хімічного процесу утворюються похідні фурану, карбонові кислоти та феноли, які пригнічують ферментативну активність речовин. Біорозкладні полімери можуть утворюватися й іншим шляхом, у результаті активності мікроорганізмів, таких як грамнегативні та грампозитивні бактерії, у присутності матеріалів багатих на карбон (наприклад, агровідходи). Бактеріальне виробництво полімерів залежить від значення рН, доступності до необхідних поживних речовин, складу і типу культури та середовища. Шляхом переробки полісахаридів, крохмалю, хітозану, целюлози, протеїну і колагену можна отримати біополімери, які також будуть розкладатися. Цей метод передбачає використання відновлювальних джерел для виробництва біорозкладних матеріалів, а також має потенціал для скорочення кількості відходів та зниження темпів глобального потепління [2]. Ще одним методом виробництва біорозкладних полімерів є отримання їх із сумішей біополімерів, таких як крохмальні, поліестерні та полігідроксиалканоатні суміші. Загалом, ці суміші також можна отримати п'ятьма методами виробництва: змішування в розплаві, змішування в розчині, змішування латексу, часткова блок-кополімеризація та синтез полімерної сітки, що проникає між собою. Але такий метод вимагає великих витрат енергії та зазвичай не може хімічно модифікувати компоненти [4].

Медицина, сільське господарство та виготовлення пакувальних матеріалів – це три основні сектори, де активно впроваджуються біорозкладні матеріали. Завдяки нетоксичності, біосумісності, біоактивності та специфічним механічним властивостям у медичній сфері біополімери використовуються в якості імплантів, протезів та хірургічних швів, а також для доставки ліків в організмі до хворого органу, контролюючи швидкість їх вивільнення. Завдяки своїм протизапальним та антибактеріальним властивостям біополімери використовуються в пародонтальній регенерації [1].

У сільськогосподарській галузі біорозкладні матеріали застосовують у рамках підтримки принципів органічного землеробства з метою збереження земельних ресурсів та покращення врожайності та якості сільськогосподарських культур. Наприклад, при мульчуванні та низькотунельному вирощуванні використовуються спеціальні плівки, які



служать для пригнічення росту бур'янів, утримання вологи у ґрунті та підвищення врожайності. Для цього біорозкладні мульчувальні плівки заорюють у ґрунт наприкінці їхнього життєвого циклу, при цьому зменшуючи втрати на робочу силу та скорочуючи кількість відходів. У морському сільському господарстві біополімери використовують для виготовлення мотузок і рибальських сіток [7].

Найбільше використання біорозкладних полімерів у пакувальній галузі, оскільки вона є одним з найбільш значущих джерел пластикових відходів. Володіючи повітропроникністю та термічною стабільністю такі матеріали можуть розкладатися у природному середовищі на нетоксичні і нешкідливі хімічні речовини [6].

Відомі приклади використання біополімерів і в автомобільній галузі, спрямовані на виготовлення легших автомобілів за рахунок використання біопластику та біокомпозитів. Завдяки низькій горючості та іншим властивостям біорозкладні матеріали використовуються в електроніці, а також для виготовлення різноманітних конструкцій. Крім того, були виготовлені з біополімерів гребінці, ручки та килими для комп'ютерної миші [5].

1. Alaswad, S.O.; Mahmoud, A.S.; Arunachalam, P. Recent Advances in Biodegradable Polymers and Their Biological Applications: A Brief Review. – *Polymers*. - 2022. - 14. - 4924.
2. Fredi G., Dorigato A. Compatibilization of biopolymer blends: A review. - *Advanced Industrial and Engineering Polymer Research*. – 2024. – V. 7, Is. 4. - 373-404.
3. Jha S.; Akula B., Enyima H. Novak M., Amin V., Liang, H. Biodegradable Biobased Polymers: A Review of the State of the Art, Challenges, and Future Directions. *Polymers* 2024. – 16. - 2262.
4. Maraveas, C. Production of Sustainable and Biodegradable Polymers from Agricultural Waste. *Polymers* 2020, 12, 1127.
5. Patwary, M. S., Surid, S., & Gafur, M. Properties and Applications of Biodegradable Polymers. *Journal of Research Updates in Polymer Science*. – 2020. - 9. - 32–41.
6. Sun, Y. Progress in the Synthesis and Application of Biodegradable Polymers. *Transactions on Materials Biotechnology and Life Sciences*. - 2024. – 4. - 6-12.
7. Vroman, I.; Tighzert, L. Biodegradable Polymers. *Materials*. – 2009. – 2. - 307-344.

## СТВОРЕННЯ МОДИФІКОВАНИХ ЕПОКСИУРЕТАНОВИХ КОМПОЗИЦІЙ ЯК СПОЛУЧНИХ ДЛЯ РІЗНОРІДНИХ МАТЕРІАЛІВ

*Зінченко О.В., Єжова В.Д., Толстов О.Л.*

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України, [a.tolstov@ukr.net](mailto:a.tolstov@ukr.net)

Епоксидні олігомери та полімери на їх основі набули широкого застосування у всіх сферах нашого життя через унікальний комплекс експлуатаційних властивостей – твердості, адгезії, високої міцності, зносостійкості, ударної тривкості, стійкості до агресивних факторів довкілля [1]. Таке поєднання характеристик в матеріалі сприяє його застосуванню при розробці та виготовленні конструкційних композитних матеріалів, адгезивів, сполучних та покриттів. Унікальність цього класу полімерних матеріалів підтверджена їх сумісністю з іншими типами полімерів, що надає широкі можливості впливу на окремі цільові показники функціональних матеріалів не погіршуючи інші.

Метою роботи було покращення експлуатаційних характеристик епоксидних сполучних шляхом введення олігоетерних фрагментів в жорстку епоксидну матрицю під час її структурування для покращення її в'язко-пружних властивостей та здатності розсіювати надлишкову механічну енергію при надлишкових навантаженнях.

Для вирішення цього завдання в епоксидний олігомер на основі бісфенолу А водили поліфункціональні поліетери, які за рахунок взаємодії з епоксидними групами мали здатність вбудовуватись в жорстку епоксидну матрицю під час її формування.

Результати введення дифункціонального олігоетеру з молекулярною масою 1000 в епоксидний полімер наведено на рис. 1. Встановлено, що введення олігоестерних фрагментів в епоксидну матрицю викликає поступове зменшення адгезійної міцності до поверхні алюмінієвих сплавів. Разом з цим ці зміни супроводжуються покращенням еластичності та стійкості таких матеріалів до ударних навантажень, що в деяких випадках є суттєвою перевагою на фоні погіршення адгезійних характеристик матеріалу.

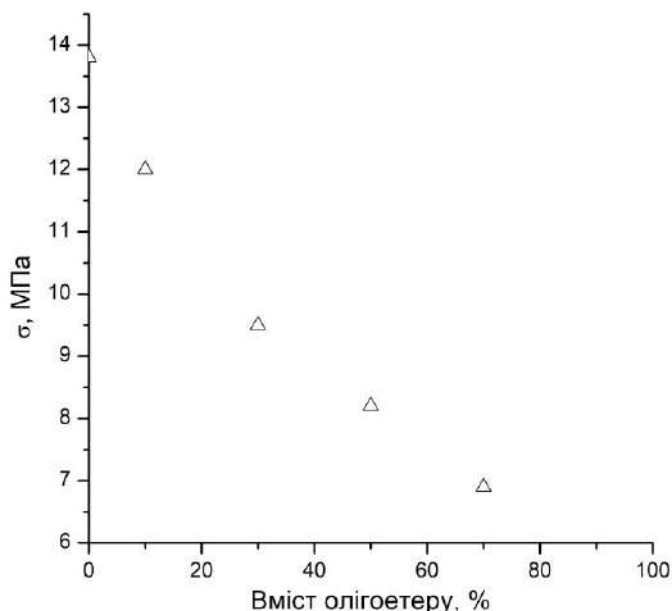


**Рис. 1.** Залежність адгезійної міцності модифікованого сполучного від його складу.

Слід зазначити, що такі зміни в міцнісних характеристиках не є критичними та можуть бути відкореговані введенням спеціальних добавок та наповнювачів.

Отже в результаті проведеної роботи було запропоновано спосіб регулювання комплексу експлуатаційних властивостей жорстких епоксидних матриць шляхом введення еластифікуючих добавок, які, незважаючи на погіршення міцнісних та адгезійних характеристик матеріалу, забезпечити покращену дисипацію енергії в об'ємі матеріалу під час ударних навантажень. Додаткове модифікування таких матеріалів армувальними добавками та промоторами адгезії дозволяють створити перспективні матеріали багатоцільового призначення з необхідним комплексом експлуатаційних характеристики.

1. Handbook of Epoxy/Fiber Composites (Ed. by S.M. Rangappa, J. Parameswaranpillai, S. Siengchin, S. Thomas). – Amsterdam.: Springer Nature, 2022. – 783 с.

## СИНТЕЗ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ІЗОЦІАНАТНОГО СПОЛУЧНОГО, МОДИФІКОВАНОГО ЕПОКСИДНИМИ ОЛІГОМЕРАМИ

Зінченко О.В., Толстов О.Л.

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України, [a.tolstov@ukr.net](mailto:a.tolstov@ukr.net)

Поліфункціональні ізоціанатні полімери на основі олігоетерів та олігоестерів мають широке практичне застосування як адгезиви, захисні покриття, ущільнювачі та герметизуючі матеріали тощо. Вони мають високу еластичність, покращену адгезію до низки матеріалів з полярною поверхнею, покращену стійкість до агресивних середовищ, в тому числі лугів та кислот, пального, мастил та інші корисні характеристики. Разом з цим в окремих випадках таким матеріалам не вистачає жорсткості та адгезії до низькореакційних поверхонь, що іноді обмежує сфери їх застосування.

Метою даної роботи було модифікування поліізоціанатних сполучних епоксидними олігомерами певної будови для збільшення жорсткості цих матеріалів та покращення адгезії до тканинних матеріалів на основі низькореакційних полімерів.

В рамках виконання завдань за цією роботою було синтезовано олігомерні ізоціанати різної будови на основі ди- та трифункціональних олігомерів з контрольованим надлишком ізоціанатного компоненту (в залежності від мети, надлишкову кількість ізоціанатної складової змінювали в межах 3-10 %). В синтезовані поліізоціанати вводили розраховану кількість епоксидного олігомеру та каталізатору твердіння для забезпечення контрольованої швидкості процесу поліприєднання складових під час формування матриці змішаного типу. В залежності від природи каталізатору та його кількості температуру твердіння змінювали в межах 20-80 °С. Отверднені матеріали випробовували на хімічну стійкість, адгезійну міцність до різномірних матеріалів.

За результатами досліджень встановлено, що введення епоксидного модифікатору покращує адгезійну міцність ізоціанатних сполучних до алюмінію на 15-25 %, до поліамідів на 10-18 %, до поверхонь, ламінованих ЕВА-полімерами на 5-7 %. Даний ефект модифікування зумовлений як високою реакційною здатністю епоксидних груп до зазначених функціональних поверхонь, так і покращеною змочувальною (просочувальною) дією на матеріали з різною морфологією поверхні. Зовнішній вигляд клейового з'єднання типу поліамід/ламінована тканина наведено на рис. 1.



**Рис. 1.** Зовнішній вигляд клейового з'єднання типу поліамід/ламінована тканина.

Хімічна стійкість ізоціанатних сполучних, модифікованих епоксидами, покращується на 15-30 %, порівняно з немодифікованими сполучними.

Розроблені модифіковані ізоціанатні сполучні мають покращені експлуатаційні властивості та перспективу застосування як герметизуючі матеріали, ущільнювачі, еластичні адгезиви та сполучні при з'єднанні високопористих матеріалів та поверхонь.

# КІНЕТИЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ СИСТЕМИ «БЕНЗОЙНА КИСЛОТА–ЕПІХЛОРГІДРИН–Me<sub>4</sub>NOOSPh»: ВПЛИВ СПІВВІДНОШЕННЯ КОМПОНЕНТІВ

Казаков О.А.<sup>1</sup>, Швед О.М.<sup>2</sup>, Бахалова Є.А.<sup>3</sup>, Діденко Н.О.<sup>4</sup>, Розанцев Г.М.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Донецький національний університет імені Василя Стуса, Україна, [kazakov.o@donnu.edu.ua](mailto:kazakov.o@donnu.edu.ua)

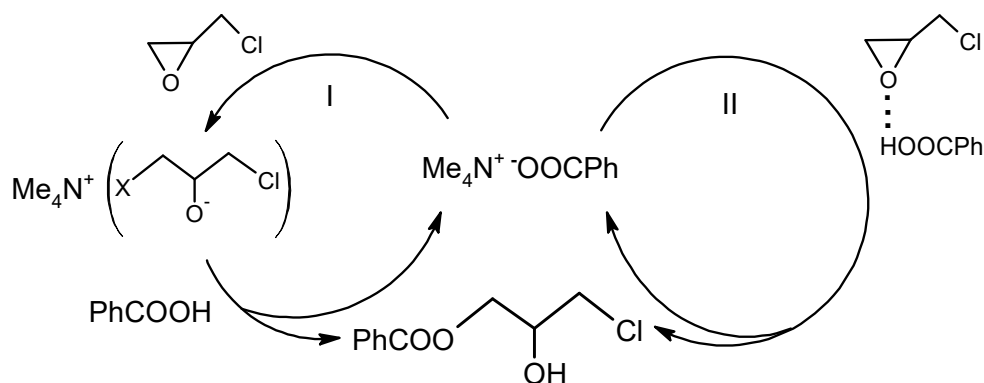
<sup>2</sup>Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М.Литвиненка НАН України

<sup>3</sup>Приватне акціонерне товариство «Інфузія», Україна

<sup>4</sup>Вінницький медичний університет імені М.І. Пирогова

Взаємодія епіхлоргідрину з карбоновими кислотами призводить до утворення багатофункціональних сполук, що є перспективними синтонами в синтезі лікарських препаратів, біологічно активних речовин, епоксидів із заданими властивостями. Традиційно каталізаторами даного процесу є третинні аміни та галогеніди тетраалкіламонію, які згідно механізму переносу аніона нуклеофільного реагенту іонною парою утворюють *in situ* у реакційній системі карбоксилати тетраалкіламонію, що є істинними каталізаторами розкриття оксиранового циклу. Використання карбоксилатів тетраалкіламонію як вихідних каталізаторів дає змогу безпосередньо оцінити їх вплив на кінетичні закономірності реакції.

Метою роботи є вивчення кінетичних закономірностей реакції епіхлоргідрину (ЕХГ) з бензойною кислотою при каталізі тетраметиламоній бензоатом при варіюванні концентрації останнього. Згідно механізму переносу аніона нуклеофільного реагенту іонною парою утворення продукту реакції і регенерація каталізатора в системі відбувається за схемою:



Кінетику реакції досліджували при варіюванні співвідношення компонентів у реакційній суміші у значному надлишку ЕХГ (40-кратний по відношенню до бензойної кислоти), що дає змогу уникнути утворенню бічних продуктів і асоціатів. Співвідношення концентрації кислоти до каталізатору варіювалась від 300 до 600. Дослідження проведено при 60°C. Контроль за швидкістю реакції здійснювали за зміною концентрації бензойної кислоти потенціометричним кислотно-основним титруванням. Залежність в координатах поточної концентрації бензойної кислоти від часу при певній концентрації каталізатора має прямолінійний характер, що вказує на нульовий порядок реакції за бензойною кислотою, тобто реагент витрачається у швидкій стадії складного процесу. Згідно встановленого порядку реакції за реагентом було обчислено спостережувані константи швидкості, кореляція яких з відповідними концентраціями каталізатору дозволила: встановити перший порядок реакції за каталізатором, обчислити константи швидкості каталітичного і некаталітичного потоків реакції. Встановлено, що швидкість каталітичної стадії реакції на 4 порядки більша, ніж некаталітичної, тож закономірності процесу визначаються переважно каталітичною стадією. Порівняння обчисленої каталітичної константи швидкості показує, що каталіз бензоатом тетраметиламонію здійснюється трохи швидше, ніж при каталізі галогенідами тетраалкіламонію. Це відповідає гіпотезі механізму каталізу даної реакції, як механізму переносу аніона нуклеофільного реагенту іонною парою.

## ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ПЕРЕТВОРЕННЯ КОМПОНЕНТІВ ДЕРЕВИНИ У ПРОЦЕСІ ВИРОБНИЦТВА ПАЛИВНИХ ПЕЛЕТ

*Куленко О.А., Криворучко А.В.*

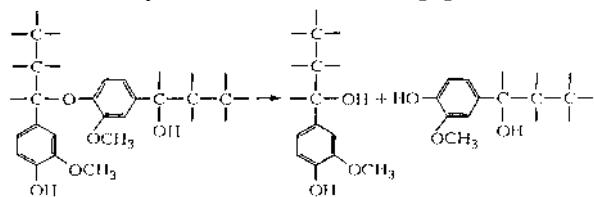
Полтавський національний педагогічний університет імені В. Г. Короленка,  
[chemikulenko@gmail.com](mailto:chemikulenko@gmail.com)

Щодо вивчення фізико-хімічних перетворень основних компонентів деревини у виробництві паливних пелет у науковій літературі однозначної думки немає. Це пов'язано з складністю протікають реакцій та їх залежністю від умов дослідження. Загальне судження ґрунтується на даних щодо хімічного складу деревного волокна та його зміни на технологічних стадіях виробництва. Якщо вихід того чи іншого компонента змінюється, це вказує на участь компонента в процесі утворення паливних пелет, проте не розкриває його роль. У більшості випадків це навіть не може бути вказівкою на те, чи позначиться така зміна на міцності пелет позитивно, або призведе до її зниження. Отже, потрібно встановити взаємозв'язок фізико-хімічних перетворень із механізмом міжволоконної взаємодії [1-3]. Вивчення характеру хімічних перетворень ускладнене втратами основних речовин, розчинних у гарячій воді, а також посиленням гідролітичних реакцій у процесі термічного пресування.

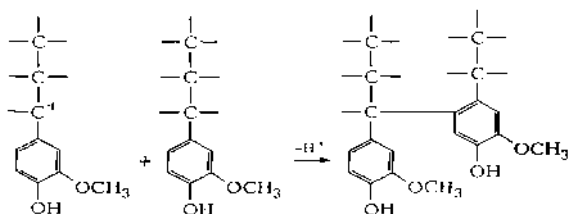
У процесі виробництва паливних пелет елементарні фібрили целюлози виступають армуючим компонентом, лігнін та нецелюлозні полісахариди утворюють аморфну матрицю. Лігнін-геміцелюлозна матриця утворюється накладенням трьох сітчастих структур: сітчасті структури самого лігніну; сітка, утворена ковалентними зв'язками лігніну з геміцелюлозами; сітка, утворена водневими зв'язками та силами між ними [2]. У серединній сітці лігнін пов'язаний з поліуронідами, а у вторинній стінці він утворює лігнін-ксианові (у деревині листяних порід) та лігнін-мананові або лігнін-ксианові (у хвойних) комплекси. Основні типи зв'язків: складноефірний зв'язок у  $\delta$ -положенні, простий ефірний зв'язок (бензилефірний зв'язок) і фенілглікозидний зв'язок. При підвищеній температурі складноефірні та прості ефірні зв'язки в лігновуглеводному комплексі гідролізуються. Вивільняються спиртова група у  $\delta$ -положенні, утворюються фенольний гідроксил і карбоксильна група, як найважливіші компоненти міжволоконної взаємодії.

Целюлоза повинна виконувати функцію армуючого компонента, тому її деструкція на всіх стадіях виготовлення пелет не повинна бути першочерговою, і наближатися до критичного ступеня полімеризації. Уникнути деструкції целюлози не можна. Зниження ступеня полімеризації целюлози при пресуванні викликане як дією теплового чинника, так і тиском пресування. Цей тиск у місцях перехрещування волокон через малу площу контакту значно вищий за номінальний. Щодо вибірковості розвитку деструкції у надмолекулярній структурі целюлози за роз'ясненням слід звернутися до моделі другого рівня.

Ця модель пояснює поведінку аморфної та кристалічної фаз у силовому полі, що викликає на початку механічного навантаження руйнування макромолекул у ділянках аморфної фази. В аморфно-кристалічних полімерах (зокрема, в целюлозі) на напругу, що розтягує хімічні зв'язки, відгукуються аморфні ділянки, деформуючись приблизно на 20%. Кристалічні ділянки деформуються слабо (на порядок нижче), виступаючи як однорідний елемент, в якому забезпечено та зберігається далекий порядок [1]. Що стосується лігніну, то він схильний до деструкції, яка відбувається за схемою [3]:



Нові вільні фенольні гідроксильні групи активують спиртові групи в  $\delta$ -положенні, здатні вступати в реакцію зшивання ланцюгів (у хімії деревини їх називають реакціями конденсації лігніну) за схемою [3]:



При конденсації збільшується молекулярна маса лігніну, знижується реакційна здатність та зменшується розчинність. Процеси деструкції й зшивання лігніну конкурують між собою. Розвиток реакцій конденсації лігніну при гарячому пресуванні найбільш інтенсивно проходить на стадії сушіння. Лігнін або принаймні його фракції знаходяться в розм'якшеному стані. На межі контакту волокон відбувається проникнення структур лігніну одна в одну завдяки сегментальній рухливості. Хімічні перетворення лігніну не обмежуються представленими схемами, але саме реакції зшивання ланцюгів з утворенням вуглець-вуглецевих зв'язків значною мірою фіксують міжволоконну взаємодію, роблять внесок в утворення міцних пелет. Міжмолекулярні взаємодії та водневі зв'язки функціональних груп лігніну з поліозами доповнюють міжволоконну взаємодію [1, 2].

Перетворення лігніну при гарячому пресуванні не обмежуються реакціями на поверхні волокон. Процес захоплює клітинні стінки деревини. Розм'якшення лігніну у вторинній стінці призводить до неафінного переміщення макромолекул, зміни положення елементарних целюлозних фібрил, а більш напружених ділянках і до зміни орієнтації кристалітів. У вторинній клітинній стінці, як і при міжволоконному контакті, протікають конкурентні реакції термодеструкції та конденсації. Конденсація набуває розвитку на стадії сушіння, а на заключній стадії пресування відзначають переважання деструкції законденсованого лігніну з появою нових фенольних гідроксильних груп і аліфатичних гідроксильних груп при зниженні первинних гідроксилів. Дослідники відзначають зниження молекулярної маси препаратів лігніну на завершальній стадії гарячого пресування.

Вуглеводна частина на початку гарячого пресування також піддається термодеструкції, причому захоплюються як легкогідролізовані, так і полісахариди, що важко гідролізуються. Потім відбуваються окисні реакції та піролітична деструкція. карбоксильні групи, що утворюються з первинних спиртових груп цукрів, взаємодіють з гідроксильними групами інших молекул із встановленням складноефірного зв'язку, що бере участь у міжволоконній взаємодії. Протікають реакції низькотемпературного піролізу. Продукти деструкції геміцелюлоз зазнають змін з утворенням гуміподібних речовин.

Додатково з основними компонентами клітинної стінки у механізмі утворення пелет беруть участь екстрактивні речовини. Різноманітність їхньої хімічної природи під час ціленапрявленого включення у процес міжволоконної взаємодії забезпечить можливість підвищити якість паливних пелет. Таким чином, основні компоненти деревини беруть участь в утворенні пелетів, виконуючи при цьому індивідуальні функції. Якщо целюлоза є армуючим компонентом, то її деполімеризація та деструкція повинні бути обмежені призначенням параметрів отримання пелет, а лігнін і геміцелюлози формувати полімерну матрицю. У лігніні найактивнішими є низькомолекулярні фракції. Підданий процесу конденсації лігнін характеризується низькою реакційною здатністю. Нецелюлозні полісахариди та продукти їх термообробки також здійснюють свій внесок у розвиток міжмолекулярної взаємодії.

1. Курка Р.Р. Особливості технології формування паливних гранул з подрібненої деревини листяних порід. *Науковий вісник НЛТУ України*. 2011. Львів : НЛТУ України. С. 132–136.

2. Співак О.Ю., Дахновська О.В., Фінік І.В. Експериментальні дослідження низькотемпературного сушіння відходів деревини. *Сучасні технології, матеріали і конструкції в будівництві*. 2016. № 1. 60-64.

3. Клименко В. В. Технологічні основи виготовлення біопалива з рослинних відходів та їх композитів : монографія. Кропивницький : ПП «Ексклюзив-Систем», 2017. 162 с.



## ОЦІНКА ЕНЕРГІЇ ШИРИНИ ЗАБОРОНЕНОЇ ЗОНИ ТРИБРОМІДУ 2-(БРОМОМЕТИЛ)-5-ОКСО-2,3-ДИГІДРО-5Н-ТІАЗОЛО[2,3-*b*]ХІНАЗОЛІН-10-ІЮ

Кут Д.Ж., Кут М.М., Погодін А.І., Онисько М.Ю.

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», [mykola.kut@uzhnu.edu.ua](mailto:mykola.kut@uzhnu.edu.ua)

Багато сполук із конденсованою гетероциклічною структурою використовуються як вихідні цикли органічних нелінійно-оптичних матеріалів. Особливе місце серед таких сполук займають хіназолін та його похідні. Важливим представником хіназолінів є хіназолінон, який містить внутрішньомолекулярну конюговану систему для переносу електронів та має жорстку компланарну структуру, що свідчить про хорошу здатність приймати електрони. Ці особливості структури хіназолінону можуть, з теоретичної точки зору, впливати на зменшення енергетичної щільності (енергії ширини забороненої зони)  $E_g$  та сприяти процесу внутрішньомолекулярного перенесення заряду. Метою даної роботи є проведення оцінки енергії ширини забороненої зони  $E_g$  на прикладі триброміду 2-(бромометил)-5-оксо-2,3-дигідро-5Н-тіазоло[2,3-*b*]хіназолін-10-ію в ацетонітрилі.

Для виконання мети наведеної роботи в першу чергу виміряно спектр поглинання триброміду в ацетонітрилі за кімнатної температури (Рис. 1). З отриманих даних спектру поглинання досліджуваної солі розраховано коефіцієнт поглинання  $\alpha$  (Рівняння 1):

$$\alpha = 2.203 A/d \quad (1)$$

де,  $d$ -товщина кювети (1 см),  $A$ - оптичне поглинання

Визначення енергії ширини забороненої зони проводили згідно методу Тауца (рівняння 2):

$$(\alpha h\nu)^n = A(h\nu - E_g) \quad (2)$$

де,  $\alpha$ -коефіцієнт поглинання,  $h\nu$  – енергія фотона,  $A$ - коефіцієнт пропорційності,  $E_g$ - енергія ширини забороненої зони,  $n$ - степінь який залежить від оптичного переходу (2, 2/3 - прямий дозволений та заборонений відповідно; 1/2, 1/3 - непрямий дозволений та заборонений відповідно).

Відомо, що для сполук подібної будови характерний прямий дозволений оптичний перехід ( $n=2$ ). На основі обчислень рівняння 2 ми побудували відповідну залежність (Рис. 2).

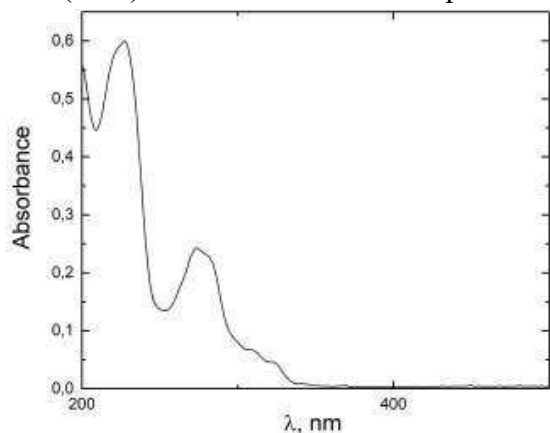


**Рис.1.** Спектр поглинання триброміду 2-(бромометил)-5-оксо-2,3- дигідро-5Н-тіазоло[2,3-*b*]хіназолін-10-ію

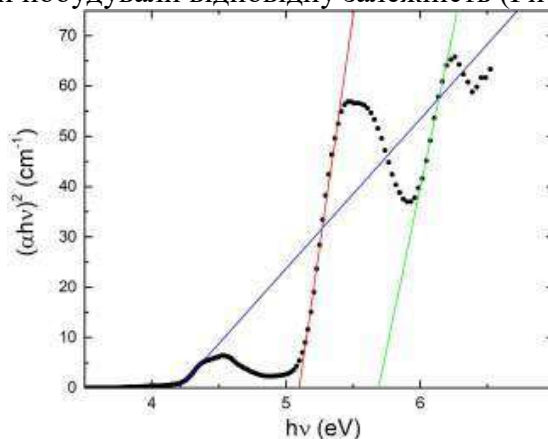


**Рис. 2.** Графічна залежність Тауца для прямого оптичного переходу триброміду 2- (бромометил)-5-оксо-2,3-дигідро-5Н-тіазоло[2,3-*b*]хіназолін-10-ію

Таким чином, шляхом лінеаризації найбільш низько енергетичної ділянки рисунку 2 оцінено значення енергії ширини забороненої зони триброміду 2-(бромометил)-5-оксо-2,3-дигідро-5Н-тіазоло[2,3-*b*]хіназолін-10-ію в ацетонітрилі, яке становить 4.21 eV.

# СИНТЕЗ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ БІОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ АМІНОАЛКІЛЗАМІЩЕНИХ 1,4-БЕНЗОДІАЗЕПІН-2-ОНІВ

*Літвінова В.Е., Шевченко О.В.*

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, [viktoriialitvinova@ukr.net](mailto:viktoriialitvinova@ukr.net)

В останні роки тривожні розлади стали одними з найбільш розповсюджених психічних порушень, що погіршують якість життя мільйонів людей. Лікарські препарати на основі похідних 1,4-бензодіазепінів широко використовуються як анксиолітичні, снодійні, антидепресантні та протисудомні засоби. Наразі, на ринку України представлені такі препарати як Гідазепам ІС, Клоназепам ІС, Левана ІС, Сибазон ІС, але пошук новітніх оригінальних молекул активно триває [1–3]. В той же час залишається велика кількість малодосліджених похідних 1,4-бензодіазепінів, зокрема сполук з аміноалкільними замісниками, що можуть володіти анксиолітичними властивостями.

Метою даної роботи є синтез низки 1-діалкіламіноетил-7-бром-5-феніл-1,3-дигідро-2Н-1,4-бензодіазепін-2-онів та дослідження їх нейротропної активності. Синтез шести нових продуктів здійснювали за схемою, наведеною на рис.1:

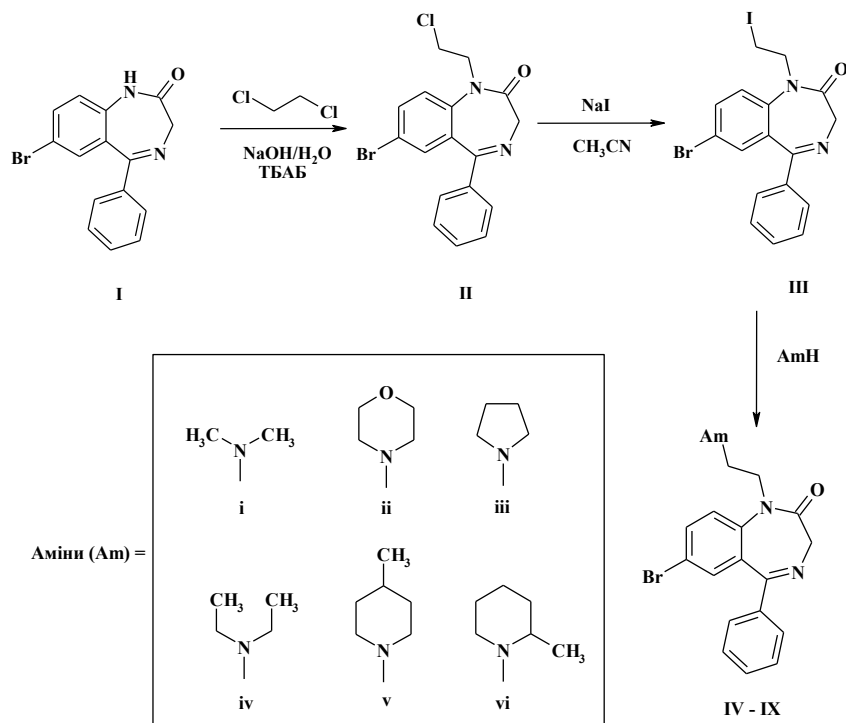


**Рис.1.** Схема синтезу 1-аміноалкільзаміщених 1,4-бензодіазепін-2-онів.

Вихідна сполука – 7-бром-5-феніл-1,3-дигідро-2Н-1,4-бензодіазепін-2-он (I), була отримана способом, який наведено в роботі [4]. Цільові сполуки (IV–IX) синтезували наступним шляхом: алкілуванням (I) 1,2-дихлоретаном в присутності 50% р-ну NaOH і тетрабутиламонію броміду (ТБАБ) отримували відповідну 1-хлоретил похідну (II). Взаємодією (II) з NaI у безводному CH<sub>3</sub>CN отримували 1-йодетил похідну (III), яку в подальшому піддавали нуклеофільному заміщенню йод-іону відповідними аміногрупами (i–vi) у тому самому розчиннику.

Будова отриманих сполук підтверджена спектроскопічними методами (<sup>1</sup>H ЯМР та ІЧ), а також мас-спектрометрією.

Дослідженнями анксиолітичної активності *in vivo* було встановлено, що отримані сполуки виявляють дозозалежний анксиолітичний ефект, виразність якого залежить від будови замісників у 1 положенні. Разом з тим, деякі сполуки виявили також значну седативну дію.

1. Lattmann E, Lattmann P, Boonprakob Y, Airarat W, Singh H, Offel M, Sattayasai J. In vivo evaluation of substituted 3-amino-1,4-benzodiazepines as anti-depressant, anxiolytic and anti-nociceptive agents. *Arzneimittelforschung*. – 2009. – Vol. 59, № 2. – P. 61-71.
2. Spencer J, Rathnam RP, Chowdhry BZ. 1,4-Benzodiazepin-2-ones in medicinal chemistry. *Future Med. Chem.* – 2010. – Vol. 2, № 9. – P. 1441-1447.
3. Magli E., Fattorusso C. et al. New Insights into the Structure–Activity Relationship and Neuroprotective Profile of Benzodiazepinone Derivatives of Neurounina-1 as Modulators of the Na<sup>+</sup>/Ca<sup>2+</sup> Exchanger Isoforms. *J. Med. Chem.* – 2021. – Vol. 64, № 24. – P. 17901 – 17919.
4. Bell S., Sulkowski N., Gochman C. et al. 1,3-Dihydro-2H-1,4-benzodiazepine-2-ones and their 4-Oxides. *J. Org. Chem.* - 1962. - V.27. – P. 562-566.

## СИНТЕЗ ТА ОЦІНКА АНТИОКСИДАНТНОЇ АКТИВНОСТІ 3-АРИЛ-5,6,7,8-ТЕТРАГІДРОТІАЗОЛО[3,2-*a*][1,3]ДІАЗЕПІНІВ

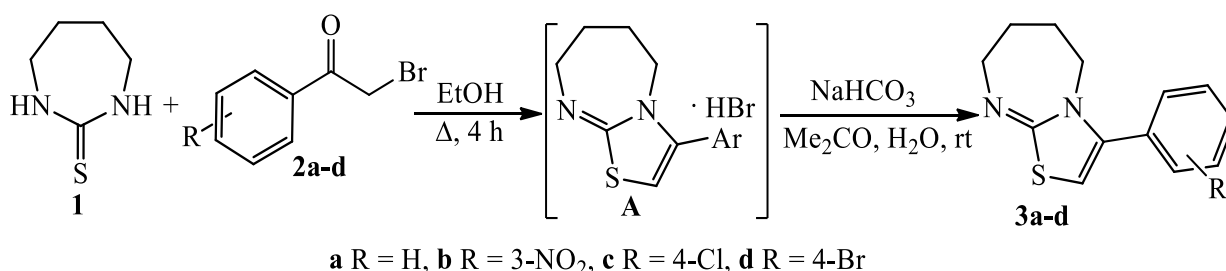
Лукашевич Б., Примачук О., Шандрюк Р., Кадикало Е., Салієва Л., Сливка Н.

Волинський національний університет імені Лесі Українки, [saliieva.lesia@vnu.edu.ua](mailto:saliieva.lesia@vnu.edu.ua)

В хімічному просторі конденсованих азотовмісних сполук важливе місце займають похідні привілейованої в медичній хімії тіазоло[3,2-*a*][1,3]діазепінової системи, які характеризуються потужним спектром біологічної дії [1, 2]. Зокрема, тіазолодіазепінове ядро є ключовим фрагментом структури снодійного засобу короткої дії **НІЕ-124** [3], протисудомних агентів [4] та інгібіторів агрегації тромбоцитів [5].

Важливою проблемою сучасної медицини є пошук та розробка потужних антиоксидантів, як ключового захисного фактора проти впливу вільних радикалів на організм [6]. Впродовж останніх років значного поширення як потенційні антиоксиданти набули представники синтетичних гетероциклічних сполук, зокрема функціоналізовані та конденсовані похідні тіазолу [7, 8], які характеризуються відносно вираженою активністю та стабільністю [9, 10]. В свою чергу, аналіз літературних джерел засвідчив, що біциклічна частково гідрована система тіазоло[3,2-*a*][1,3]діазепіну є менш вивченою, ніж їх бензанельовані аналоги. З урахуванням вищезазначеного, видавалось обґрунтованим здійснити синтез 5,6,7,8-тетрагідротіазоло[3,2-*a*][1,3]діазепінів та дослідити їх антиоксидантну дію.

Для реалізації поставленого завдання як модельну сполуку було використано синтетично доступний 1,3-діазепан-2-тіон **1**, який був опробований у реакції циклоконденсації із  $\alpha$ -бромоацетофенонами **2a-d**. Експериментально встановлено, що 4-год кип'ятіння реагентів у етанолі супроводжується аелюванням тіазольного циклу та утворенням проміжних продуктів солеподібної будови **A**. Їх подальша нейтралізація натрій гідрогенкарбонатом у водно-ацетоновому розчині має наслідком утворення відповідних 3-арил-5,6,7,8-тетрагідротіазоло[3,2-*a*][1,3]діазепінів **3**.



Склад та будова синтезованих похідних **3-6** надійно доведені комплексним фізико-хімічним аналізом із використанням методів ЯМР  $^1\text{H}$ -,  $^{13}\text{C}$ - спектроскопії та хроматомас-спектрометрії, а також елементного аналізу.

Оцінку активності поглинання радикалів DPPH 5,6,7,8-тетрагідротіазоло[3,2-*a*][1,3]діазепінами **3** здійснювали за концентрації 5 мМ (метанольний розчин, вимірювання після 60 хв.), що дозволяє швидко знаходити потенційні сполуки-хіти з економією часу та кількостей речовин. Як стандартну сполуку використовували аскорбінову кислоту.

Експериментально встановлено, що 3-арил-5,6,7,8-тетрагідротіазоло[3,2-*a*][1,3]діазепіни **3** характеризуються багатообіцяючою антиоксидантною дією з рівнем поглинання радикалів DPPH 90.6-97.6%. Найвищий показник інгібування радикалів продемонстрував 3-(4-бромфеніл)-5,6,7,8-тетрагідротіазоло[3,2-*a*][1,3]діазепін **3d** (*I* = 97.6%), а найнижчий результат – 3-(3-нітрофеніл)-5,6,7,8-тетрагідротіазоло[3,2-*a*][1,3]діазепін **3b** (*I* = 90.6%).

1. Malki Y., Martinez J., Masurier N. 1,3-Diazepine: A privileged scaffold in medicinal chemistry. *Med. Res. Rev.* - 2021. - V.41. I.4. - P.2247-2315.

2. El-Subbagh H. I. Novel GABA<sub>A</sub> Agonist Entities: Pharmacological Investigation and Molecular Modeling Study of Thiazolo- and Thiadiazolo[3,2-*a*][1,3]diazepine Analogs. *Mini Rev. Med. Chem.* - 2021. - V.21. I.9. - P.1048-1057.

3. Kadi A. A., El-Kashef H. A., Abdel-Aziz A. A., Hassan G. S., Tettey J., Grant M. H., Lehmann J., El-Subbagh H. I. Synthesis, ultra-short acting hypnotic activity, and metabolic profile of ethyl 8-oxo-5,6,7,8-tetrahydro-thiazolo[3,2-*a*][1,3]diazepin-3-carboxylate (HIE-124). *Arch. Pharm.* - 2008. V.341. I.2. P.81-89.

4. El-Subbagh H. I., Hassan G. S., El-Azab A. S., Abdel-Aziz A. A., Kadi A. A., Al-Obaid A. M., Al-Shabanah, O. A., Sayed-Ahmed, M. M. Synthesis and anticonvulsant activity of some new thiazolo[3,2-*a*][1,3]diazepine, benzo[*d*]thiazolo[5,2-*a*][12,6]diazepine and benzo[*d*]oxazolo[5,2-*a*][12,6]diazepine analogues. *Eur. J. Med. Chem.* 2011. - V.46. I.11. - P.5567-5572.

5. Elslager E. F., McLean J. R., Perricone S. C., Potoczak D., Veloso H., Worth D. F., Wheelock R. H. Inhibitors of platelet aggregation. 1. 5,10-Dihydro-3-(phenyl, thienyl, and furyl)thiazolo[3,2-*b*][2,4]benzodiazepines and related compounds. *J. Med. Chem.* - 1971. - V.14. I.5. - P.397-401.

6. Battin E. E., Brumaghim J. L. Antioxidant activity of sulfur and selenium: a review of reactive oxygen species scavenging, glutathione peroxidase, and metal-binding antioxidant mechanisms. *Cell Biochem. Biophys.* - 2009. - V.55. I.1. - P.1-23.

7. Djukic M., Fesatidou M., Xenikakis, I., Geronikaki, A., Angelova, V. T., Savic, V., Pasic, M., Krilovic, B., Djukic, D., Gobeljic, B., Pavlica, M., Djuric, A., Stanojevic, I., Vojvodic, D., Saso, L. *In vitro* antioxidant activity of thiazolidinone derivatives of 1,3-thiazole and 1,3,4-thiadiazole. *Chem. Biol. Interact.* - 2018. - V.286. - P.119-131.

8. Chaban T., Ogurtsov V., Mahlovanyy A., Sukhodolska N., Chaban I., Harkov S., Matychuk V. Antioxidant properties of some novel derivatives thiazolo[4,5-*b*] pyridine. *Pharmacia.* - 2019. - V.66. I.4. - P.171-180.

9. Pokorny J. Are natural antioxidants better – and safer – than synthetic antioxidants? *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* - 2007. - V.109. I.6. - P.629-642.

10. Stoia M., Oancea S. Low-Molecular-Weight Synthetic Antioxidants: Classification, Pharmacological Profile, Effectiveness and Trends. *Antioxidants (Basel, Switzerland).* - 2022. - V.11. I.4. - P.638.

## СИНТЕЗ 7-ЗАМІЩЕНИХ ПОХІДНИХ 2-АЗАБІЦИКЛО[4.2.0]ОКТАНУ

Лук'яненко С.Ю.<sup>1</sup>, Носик Д.А.<sup>1,2,3</sup>, Гранат Д.С.<sup>1,2</sup>, Козицький А.В.<sup>1,2</sup>,

Юрченко О.О.<sup>1,3</sup>, Григоренко О.О.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Enamine Ltd., Україна, [daniil.nosik2287@gmail.com](mailto:daniil.nosik2287@gmail.com)

<sup>2</sup> Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Україна

<sup>3</sup> Інститут органічної хімії НАН України, Україна

Біциклічні сполуки викликають великий інтерес у медичній хімії завдяки їхньому потенціалу як біологічно активних молекул – цей інтерес не обійшли й 7-заміщені похідні 2-азабіцикло[4.2.0]октану, оскільки вони відповідають принципу лідер - подібності: гідрофільні, з молекулярною масою  $M \leq 200$ ,  $sp^3$ -збагачені,  $clogP < 2$ ,  $HDon \leq 2$ ,  $HAcc \leq 4$ . Внаслідок виконання цих умов модифіковані відповідними будівельними блоками природні сполуки потенційно мають значно кращі фармакокінетичні властивості у порівнянні з немодифікованими аналогами.

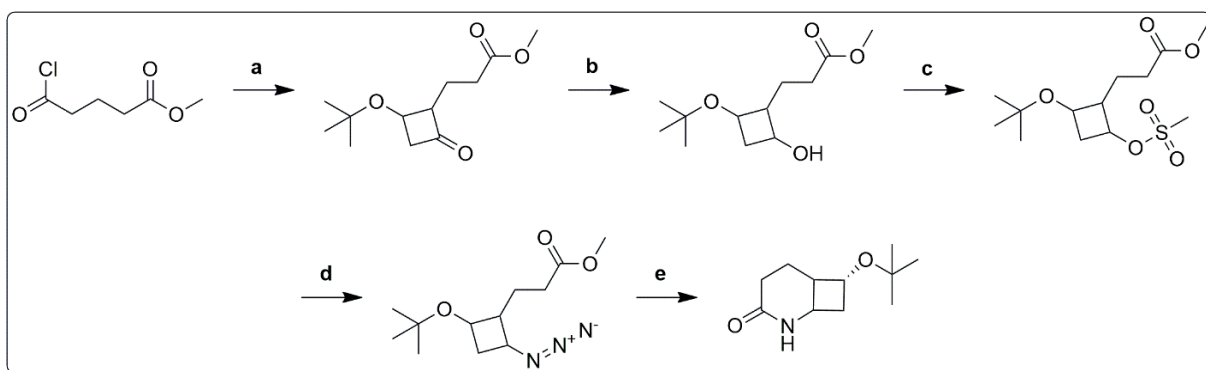
Синтез розпочали з комерційно доступного метилу 5-хлор-4-оксопентаноату. Ключовими реакціями були:

1) [2+2]-циклоприєднання утвореного в процесі взаємодії метилу 5-хлор-4-оксопентаноату з трет-бутилвініловим естером в присутності триетиламіну.

2) Відновлення азиду з одночасною циклізацією з утворенням 7-(трет-бутоксид)-2-азабіцикло[4.2.0]октан-3-ону.

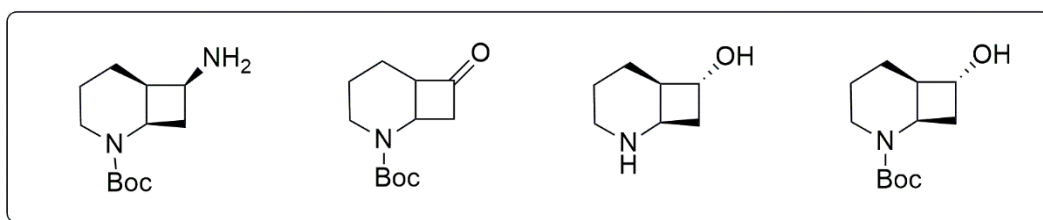
Розроблений метод є надійним і придатним для масштабування. Було отримано декілька похідних (Табл.). Оптимізація реакційних параметрів дозволила отримати продукти з середніми виходами (до 60%) та високою чистотою, що робить цей підхід доволі ефективним для практичного застосування. Подальші дослідження будуть спрямовані на покращення діастереоселективності та виходів реакцій, та подальший синтез нових похідних. Використання цих похідних у фармацевтичній хімії та матеріалознавстві відкриває нові можливості для розробки лікарських засобів та функціональних матеріалів.

Схема



Синтез ключової сполуки 7-(трет-бутоксид)-2-азабіцикло[4.2.0]октан-3-он ((a) 2 екв. триетиламіну, 1 екв. трет-бутилвінілового етеру, толуол, 110°C, 2 год; (b) 1.05 екв. боргідриду натрію, тетрагідрофуран, 0°C, 1 год; (c) 1.2 екв. триетиламіну, 1.1 екв. мезилхлориду, дихлорметан, 0°C, 12 год; (d) 3 екв. азиду натрію, диметилформамід, 100°C, 24 год; (e) 0.05 екв. Pd/C, H<sub>2</sub>, rt, 72 год).

Таблиця



Отримані з 7-(трет-бутоксид)-2-азабіцикло[4.2.0]октан-3-ону 7-заміщені похідні 2-азабіцикло[4.2.0]октану.



## ТРАНСЕСТЕРИФІКАЦІЯ ТРИГЛІЦЕРИДІВ СПИРТАМИ C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> НА ЦЕОЛІТАХ

*Маласняк Р.М., Мельник Ю.Р.*

Національний університет «Львівська політехніка», [yurii.r.melnyk@lpnu.ua](mailto:yurii.r.melnyk@lpnu.ua)

Використання гетерогенних каталізаторів трансестерифікації тригліцеридів аліфатичними спиртами на сьогодні є важливим напрямком досліджень [1]. Порівняно із гомогенними гетерогенні каталізatori менш чутливі до присутності у складі сировини води та вільних жирних кислот, забезпечують можливість легкого виділення із продуктів реакції та повторного використання, проте, як правило, для них характерна нижча активність, що вимагає застосування більшого надлишку спирту [2]. Як гетерогенні каталізatori використовують іонообмінні смоли [3, 4], оксиди та карбонати лужноземельних металів [5] тощо.

Метою досліджень було вивчення трансестерифікації тригліцеридів спиртами C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> у присутності цеолітів NaX, NaY та CaA.

Трансестерифікацію тригліцеридів досліджено при вмісті каталізатора 0,25 мас. %, мольному співвідношенні тригліцериди : спирт 1 : 4,7 та температурі 333 К (метанол) і 348 К (етанол і пропан-1-ол). Досліджено вплив цеоліту на конверсію та початкову швидкість трансестерифікації тригліцеридів. Встановлено, що при трансестерифікації тригліцеридів у присутності метанолу конверсія тригліцеридів за перші 60 хв. реакції досягає 86–96 %, тоді як при трансестерифікації етанолом чи пропан-1-олом – 29–63%. Збільшення тривалості реакції до 150 хв. дає змогу підвищити конверсію тригліцеридів на 8–11% при трансестерифікації етанолом та пропан-1-олом. Встановлено, що конверсія тригліцеридів за 150 хв. при каталізі цеолітами NaX та NaY є значно вищою, ніж при застосуванні як каталізатора цеоліту CaA. Показано, що на конверсію тригліцеридів істотно впливає вид іону лужного чи лужноземельного металу, що входить до складу цеоліту, і значно менше будова його кристалічної ґратки. Встановлено, що початкова швидкість реакції трансестерифікації тригліцеридів метанолом є в 1,7–4,3 рази вищою, ніж при трансестерифікації етанолом чи пропан-1-олом, а початкова швидкість трансестерифікації тригліцеридів при каталізі цеолітами NaX та NaY є в 1,6–3,1 рази вищою, ніж при каталізі цеолітом CaA. За результатами досліджень показано, що існує задовільна кореляція між початковою швидкістю трансестерифікації та конверсією тригліцеридів.

Отримані результати свідчать про можливість використання цеолітів як каталізаторів трансестерифікації тригліцеридів спиртами C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub>.

1. Haigh K., Sumaiya Z. A., Basudeb S., Vladislavljević G. Pretreatment of Used Cooking Oil for the Preparation of Biodiesel Using Heterogeneous Catalysis // *Progress in Colloid and Polymer Science*. – 2012. – №139. – С. 19–22.

2. Annam R. A., Aravindh K. J. Comparison of Homogeneous Base Catalysts and Heterogeneous Base Catalysts for Biodiesel Transesterification of Waste Cooking Oil // *International Journal of ChemTech Research*. – 2015. – Vol. 8 (2). – P. 651–654.

3. Shibasaki-Kitakawa N., Honda H., Kuribayashi H., Toda T., Fukumura T., Yonemoto T. Biodiesel production using anionic ion-exchange resin as heterogeneous catalyst // *Bioresource Technology*. – 2007. – Vol. 98(2), – 416–421.

4. Melnyk Yu., Melnyk S., Palyukh Z., Dzinyak B. Research into transesterification of triglycerides by aliphatic alcohols C<sub>2</sub>–C<sub>4</sub> in the presence of ionites. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*. – 2018. – №1/6(94). – P.10–16.

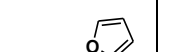
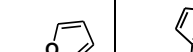
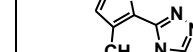
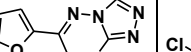
5. Rao Y., Zubaidha P., Reddy J., Kondhare D., Sushma D. Crystalline Manganese Carbonate a Green Catalyst for Biodiesel Production // *Green and Sustainable Chemistry*. – Vol. 2. – No. 1. – 2012. – pp. 14–20.

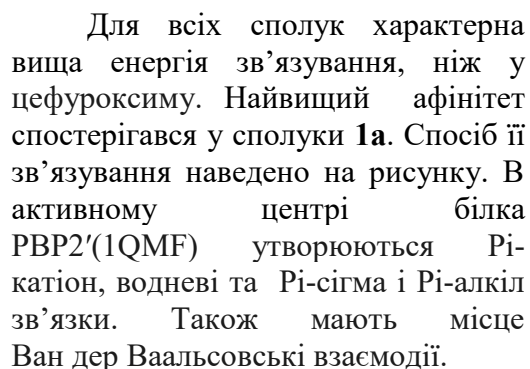


*Мурко І.І.*

*irynaoliinyk@gmail.com*

Chemical structures of compounds 1a,b and 2a,b are shown. Compound 1a,b is a thiazotriazole derivative with a furan ring and a phenyl group substituted with R. Compound 2a,b is a thiazotriazole derivative with a furan ring, an ethyl ester group, and a phenyl group substituted with F.

|                                                                                                      |                                                                                                      |                                                                                                       |                                                                                                        |                                                                                                              |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  <p><b>1a</b></p> |  <p><b>1b</b></p> |  <p><b>2a</b></p> |  <p><b>2b</b></p> |  <p><b>Цефуроксим</b></p> |
| <b>-9.9 ккал/моль</b>                                                                                | <b>-9.5 ккал/моль</b>                                                                                | <b>-7.4 ккал/моль</b>                                                                                 | <b>-9.2 ккал/моль</b>                                                                                  | <b>-7.0 ккал/моль</b>                                                                                        |



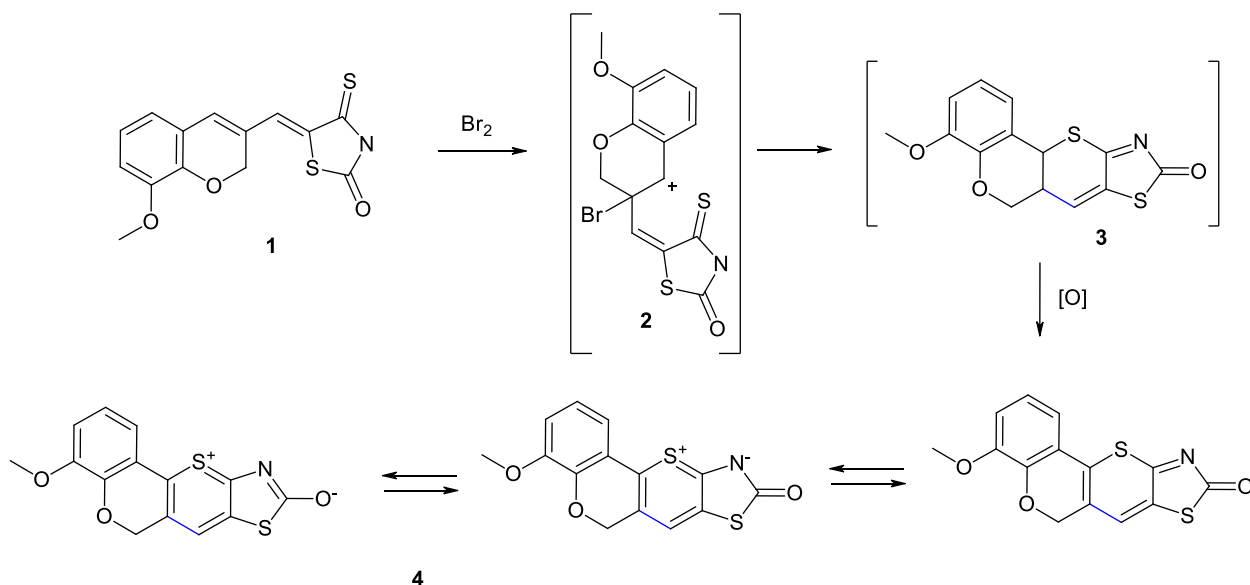
# НОВА ДОМІНО РЕАКЦІЯ ЕЛЕКТРОФІЛЬНОГО БРОМУВАННЯ-ОКИСНЕННЯ

Нефедов Є.А.<sup>1</sup>, Хропот О.С.<sup>2</sup>, Бригас А.О.<sup>1</sup>, Матійчук В.С.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Львівський національний університет ім. І. Франка, [evgen.nefedov@lnu.edu.ua](mailto:evgen.nefedov@lnu.edu.ua)

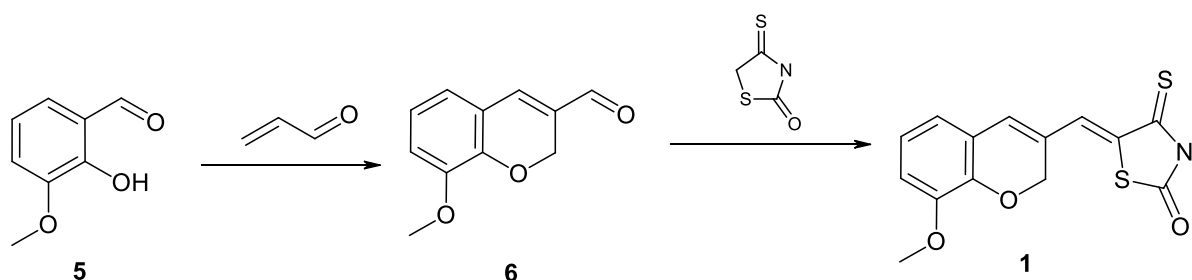
<sup>2</sup>Львівський національний медичний університет ім. Д. Галицького,

Розроблено нову доміно реакцію електрофільного бромовання-окиснення. Встановлено що при бромованні 5-(8-метокси-2*H*-хромен-3-ілметилден)-4-тіоксо-тіазолідин-2-ону **1** в оцтовій кислоті при 60 °С відбувається електрофільна циклізація з утворенням інтермедіату **3** який спонтанно зазнавав окиснення киснем повітря з утворенням цвітер-йонної поліконденсованої сполуки **4**:



Будову сполуки **4** доведено за допомогою 1*H* ЯМР-спектроскопії, а склад – елементним аналізом. Зокрема сигнал протону в положенні 7 та метиленової групи в шостому положенні 4-метокси-6*H*,9*H*-хромено[3',4':5,6]тіопірано[2,3-*d*][1,3]тіазол-9-онової полігетероциклічної системи резонують у вигляді синглетів. при 8.1 та 5.2 м.ч.

Вихідну сполуку **1** синтезували за нижченаведеною схемою. Необхідний для цього 8-метокси-2*H*-хромен-3-карбальдегід **6** отримували взаємодією 3-метоксисаліцилового альдегіду **5** з акролеїном в умовах реакції Байліса-Хільмана.



Слід зазначити що доміно Реакції в останні роки привертають значну увагу дослідників. Це ефективна синтетична методологія для побудови структурно складних молекул з простих вихідних реагентів, яка має ряд невід'ємних переваг перед багатостадійними синтезами: швидкість утворення зв'язків, енергоресурсна ефективність, економія атомів, екологічність, Доміно реакції можуть бути використані у високопродуктивному синтезі що орієнтований різноманіття (diversity-oriented high-throughput synthesis), комбінаторній хімії а також на різних етапах багатостадійних перетворень.

## ВПЛИВ ЛИМОННОЇ КИСЛОТИ І МАГНІТНОГО ПОЛЯ НА РЕОЛОГІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ГЕЛІВ АГАР-АГАРУ

*Потанчук І.М., Дубровіна Л.В., Макаров А.С.*

Інститут колоїдної хімії та хімії води ім. А.В. Думанського НАН України,  
[iryna.kruchko03@gmail.com](mailto:iryna.kruchko03@gmail.com)

Незважаючи на те, що в даний час активно розвиваються дослідження зі створення композиційних полімерних гідрогелів на основі зшитих полімерів, не втратили свого значення полімерні гелі, які одержують з гідроколоїдів. У цих гелях гелеутворення відбувається завдяки міжмолекулярним взаємодіям (водневий зв'язок, донорно-акцепторні, іонні, гідрофобні та інші взаємодії функціональних груп). Гідрофільні гелі з гідроколоїдів знаходять широке застосування у різних галузях, наприклад, у фармацевтичній промисловості для м'яких лікарських форм. У харчовій промисловості полісахариди гідроколоїдів завдяки своїй здатності зв'язувати воду виконують функцію вологоутримуючих агентів, перешкоджають розвитку небажаних мікроорганізмів, що збільшує термін придатності харчових продуктів та ін.[1, 2].

Гідроколоїди – велика група харчових інгредієнтів. До них відносяться речовини трьох функціональних класів – загущувачі, гелеутворювачі та стабілізатори, в окремих випадках вони виконують суміжну функцію емульгаторів. Однак, на відміну від більшості інших груп харчових добавок роль гідроколоїдів у харчових системах не зводиться лише до виконання технологічних функцій. Багато гідроколоїдів є фізіологічно функціональними (корисними для здоров'я) інгредієнтами, які можуть знижувати рівень холестерину в крові, сприяють нормальному функціонуванню кишківнику, виявляють пробіотичний ефект та інші позитивні для здоров'я людини властивості. Крім того, завдяки гідроколоїдам, стало можливим створення низькокалорійних продуктів, що зберігають органолептичні характеристики традиційних аналогів. За хімічною природою гідроколоїди представлені двома видами біополімерів – полісахаридами та білками [3, 4].

Агар-агар (E406) являється класичним представником класу згущувачів, стабілізаторів і гелеутворюючих речовин. Його одержують з червоних морських водоростей (*Gracilaria*, *Gelidium*, *Ahnfeltia*), що ростуть у Білому морі, Тихому і Атлантичному океанах. В залежності від виду водоростей склад виділених полісахаридів може змінюватися. Назва цього полімеру має малоазійське походження і означає “желюющий продукт харчування з водоростей”. Агар-агар є складною сумішшю полісахаридів, які мають однакову структуру основного ланцюга, але розрізняються кількістю функціональних груп. Агаробіоза є основною структурною одиницею всіх агарових полісахаридів. Агар-агар за складом можна розділити на дві складові – 50-80 мас% агароза (нейтральний лінійний полісахарид) і агаропектин. Желюючі властивості виявляє лише агароза, агаропектин не здатний до утворення гелю [2, 5, 6]. Основна фракція агарози – лінійний полісахарид, побудований із почергових залишків  $\beta$ -D-галактопіранози і 3,6-ангідро- $\alpha$ -L-галактопіранози, які з'єднані почергово  $\beta$ -(1,4)- і  $\alpha$ -(1,3)-зв'язками. Агаропектин розгалужений, має меншу молекулярну масу, містить від 3 до 10 % сульфатних груп, які знаходяться у суміші полісахаридів складної будови, що містить глюкуронову кислоту і естернозв'язану сірчану кислоту [2, 5, 6].

Агар-агар має унікальні властивості, пов'язані з гелеутворенням – високу гелеутворювальну здатність при низьких концентраціях, широкий діапазон рН (від 5 до 8, а в деяких випадках і вище). Він відмінно витримує термічну обробку навіть вище 100 °С, що забезпечує хорошу стерилізацію, дає гелі без смаку та аромату, має термооборотність, прозорий і т.п. Гель з агар-агар застигає при температурі 38 °С і знову стає рідким при 85 °С. Він залишається твердим навіть у спекотні дні і не тане в роті, його треба розжовувати. Для зменшення негативних властивостей гідрогелів з агар-агару використовують модифікування – розробляють композиційні гідрогелі [2, 6, 7]. З гігієнічної точки зору агар-агар є нешкідливим і в усіх країнах допускається його використання в харчових цілях. Концентрація його не лімітована і зумовлена рецептурами і стандартами на харчові

продукти. Об'єднаний комітет експертів ФАО/ВОЗ з харчових добавок вважає допустимою добову дозу (ДДД) агар-агару для людини 50 мг/кг маси тіла, тобто значно вище дози, яка може поступити в організм з харчовими продуктами.

Лимонна кислота (E330) – найбільш м'яка в порівнянні з іншими харчовими кислотами. Вона має приємний кислий смак, завдяки чому знаходить широке застосування в харчовій промисловості. Найбільшою мірою лимонна кислота використовується в кондитерській промисловості, у виробництві безалкогольних напоїв, а також у виробництві деяких видів рибних консервів. Максимально допустимий рівень вмісту лимонної кислоти в деяких харчових продуктах складає: у какао, шоколаді – 0,5 %, у соках фруктових – 3 г/л, у джемах і мармеладі стільки, скільки вимагається за технологією [2, 6, 7].

Раніше ми досліджували вплив Na-солі карбоксиметилцелюлози та присутності магнітного поля при одержанні гелів агар-агару на їх реологічні властивості [8].

Метою даної роботи було вивчення впливу лимонної кислоти і магнітного поля на реологічні властивості гелів агар-агару.

У роботі використовували агар-агар (марка 1200, Китай). Композиційні гідрогелі отримували додаванням сухого агар-агару з концентрацією 1,0 мас.% до водного розчину лимонної кислоти з концентрацією 0,3 мас.% у дистильованій воді. Для порівняння реологічних властивостей використовували гідрогель з концентрацією 0,7 мас.% агар-агару. Суміші для отримання гідрогелів нагрівали до кипіння на електроплитці (нагрівання за звичайних умов) або на магнітній мішалці ММ-5 (нагрівання в присутності магнітного поля, що створюється вбудованим в магнітну мішалку феритовим постійним магнітом з магнітним потоком не менше 0.02 МВб). Отримані розчини охолоджували до кімнатної температури в циліндрі приладу Rheotest RV2.

Реологічні властивості гідрогелів вивчали за допомогою ротаційного віскозиметра Rheotest RV2 з вимірювальною системою S/S1 і S/S3 коаксіальних гладких циліндрів із співвідношенням радіусів циліндрів рівним 1,02 та 1,24 в діапазоні швидкостей зсуву  $\dot{\gamma}=1.5\text{--}1312\text{ c}^{-1}$  і  $\dot{\gamma}=0,333\text{--}14,8\text{ c}^{-1}$ , відповідно.

На рис. 1 наведено реологічні властивості гелів, які одержано із нагрітих за звичайних умов розчинів. Видно, що у гідрогелю з концентрацією агар-агару 1.0 мас.% в'язкість вище, ніж у 0.7 %-вого. Зі зростанням напруги зсуву в'язкість падає дуже швидко. Композиційний гель з концентрацією агар-агару 1,0 мас.% з лимонною кислотою займає проміжне положення.

На всіх кривих при зростанні напруги зсуву (вище 10 та 20 Па для гелю з концентрацією 0.7 та 1.0 мас.% і 18 Па для композиційного гелю, відповідно) є розрив суцільності, який виключає поширення зсуву у об'єм структури гідрогелю. Результати вимірювань при цьому по суті описують процеси тертя між шарами, які обмежені зоною розриву, та можливого часткового руйнування структури в областях, що безпосередньо примикають до поверхонь розриву [9]. Наявність розриву суцільності вказує на жорсткість гідрогелю. Сила взаємодії між макромолекулами гідрогелю вища у більш концентрованому гідрогелі агар-агару навіть якщо у ньому присутня лимонна кислота (рис.1б).

Гелі агар-агару являють собою пористу сітку, у формуванні якої беруть участь тільки нейтральні макромолекули агарози і яка складається з пучків агарозних спіралей. Молекули агаропектинів (фракція кислих полісахаридів агар-агару) вбудовані в пори і діють як пасивні молекули, що зменшують їх розмір [10]. Криві течії (рис. 1б) показують силу взаємодії між компонентами гідрогелів. Як видно з даних при невеликих швидкостях зсуву на кривих течії гідрогелів є максимуми. Це вказує на нерівноважний стан системи та наявність у структурі гідрогелю неруйнівних у деякому інтервалі швидкостей зсуву агрегатів великого розміру, які при подальшому підвищенні швидкості зсуву все ж таки руйнуються [9].

Введення лимонної кислоти знижує в'язкість гелів агар-агару з концентрацією 1 мас.%, внаслідок кислого гідролізу при формуванні гелів, але в'язкість гелю залишається більшою, ніж в'язкість гелю з концентрацією 0,7 мас.% (рис. 1а). Така ж залежність спостерігається і

при вивченні впливу напруги зсуву на структуру гелів при збільшенні швидкості зсуву (рис. 1) [11, 12].

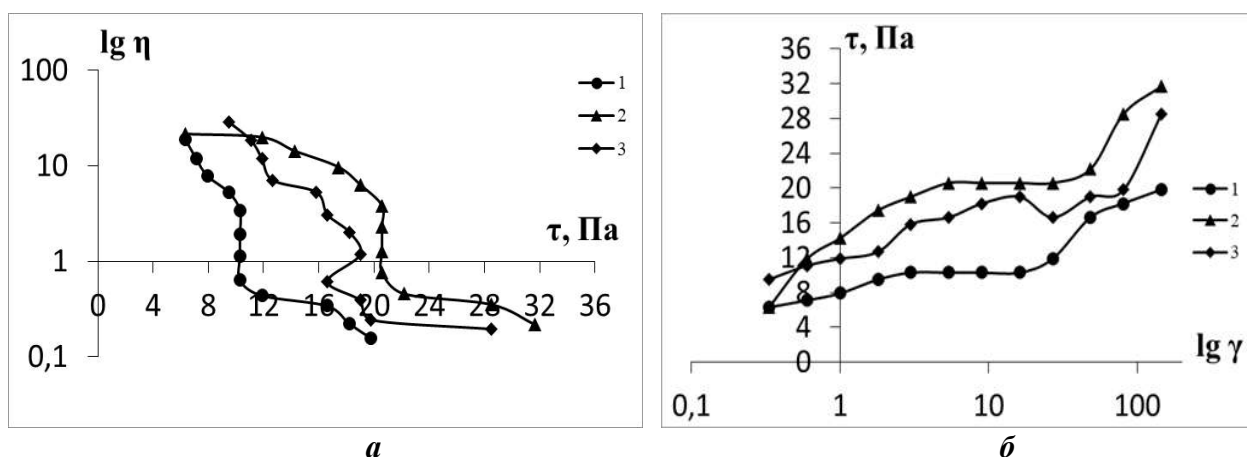


**Рис. 1.** Залежність ефективної в'язкості від напруги зсуву (а) і криві течії гелів агар-агару з концентрацією 0,7 (1) та 1,0 мас. % (2) і композиційного гелю в агар-агару з концентрацією 1,0 мас. % + лимонна кислота з концентрацією 0,3 мас. % (3). Гелі одержано із нагрітих за звичайних умов розчинів.

На структуру розчинів полімерів крім хімічної будови, концентрації та температури сильно впливає зовнішнє магнітне поле [13]. У нашій роботі під час приготування другого варіанта гідрогелів була використана магнітна мішалка. Вихідні компоненти суміші для гідрогелів при цьому піддавалися не тільки нагріванню, але і впливу постійного магнітного поля. Ступінь впливу магнітного поля була максимальною на реологічні властивості гідрогелів, що містять 1 мас. % агар-агару. В'язкість гідрогелів, приготованих з використанням магнітного поля, і взаємодія між їх компонентами вище за аналогічні характеристики для гелів, приготовлених без нього (рис. 2). Залежність напруги зсуву від швидкості зсуву показує, що структура гідрогелів під впливом магнітного поля в присутності лимонної кислоти стає більш однорідною, ніж при формуванні гелів при звичайних умовах. Взаємодія між макромолекулами в цьому гелі також слабша у всьому інтервалі швидкостей зсуву, криві течії розташовані набагато нижче (рис. 2б).

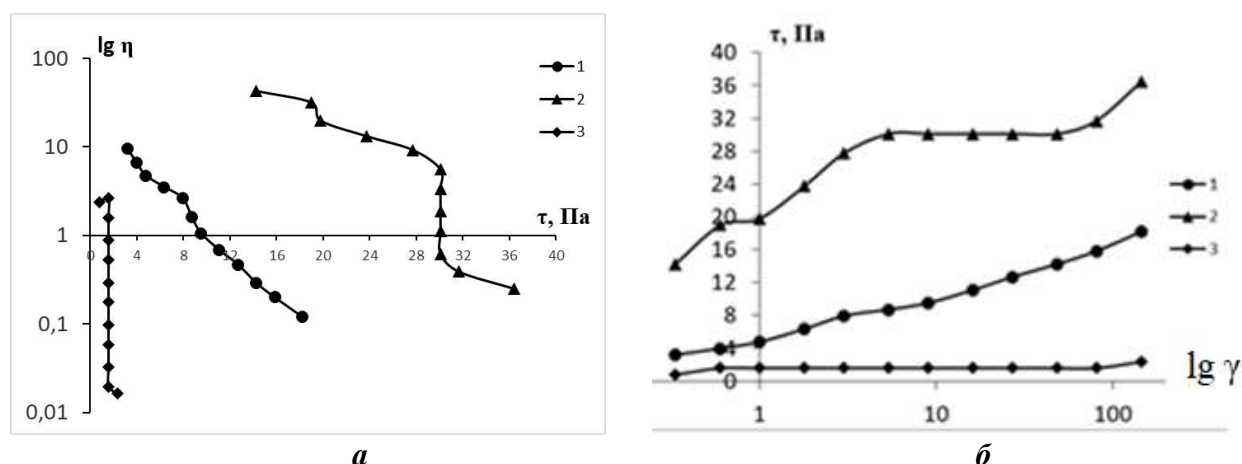


**Рис. 2.** Залежність ефективної в'язкості від напруги зсуву (а) і криві течії гелів агар-агару з концентрацією 0,7 (1) та 1,0 мас. % (2) і композиційного гелю в агар-агару з концентрацією 1,0 мас. % + лимонна кислота з концентрацією 0,3 мас. % (3). Гелі одержано із нагрітих у постійному магнітному полі розчинів.

У таблиці наведено значення межі текучості для гелів з агар-агаром, які одержано як за звичайних умов, так і в присутності магнітного поля. Значення величини межі текучості у зразків, які формувались у присутності магнітного поля значно менші, ніж при його відсутності. Особливо це стосується геля з лимонної кислотою – зменшення від 12,0 до 1,6 Па. Тобто у присутності лимонної кислоти гелі стають менш міцними, а їх структура спрощується – лимонна кислота руйнує систему зав'язків як між мікронеоднорідностями (асоціатами) у структурі гідрогелю, так і між окремими макромолекулами.

**Таблиця**

Значення межі текучості гідрогелів, отриманих з нагрітих при звичайних умовах та в постійному магнітному полі розчинів

| Концентрація агар-агару та лимонної кислоти в гідрогелі, мас% | Межа текучості гідрогелів, отриманих з нагрітих за звичайних умов розчинів $\tau$ , Па | Межа текучості гідрогелів, отриманих з нагрітих у постійному магнітному полі розчинів $\tau$ , Па |
|---------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 0.7 агар-агару                                                | 7,9                                                                                    | 4,8                                                                                               |
| 1.0 агар-агару                                                | 14,3                                                                                   | 11,9                                                                                              |
| 1.0 агар-агару + 0.3 лимонної кислоти                         | 12,0                                                                                   | 1,6                                                                                               |

Таким чином, введення лимонної кислоти суттєво змінює реологічні властивості гідрогелів агар-агару. Використання постійного магнітного поля при формуванні гідрогелів призводить до утворення більш рівномірної структури гідрогелів, тобто його вплив на властивості гідрогелів досить великий.

1. Armisen R., Galatas F. Production and Utilization of Products from Commercial Seaweeds // *FAO Fish. Tech. Pap.* - 1987. - V. 288. - P. 1 – 57.
2. Lahaye M., Rochas C. Chemical structure and physico-chemical properties of agar // *Hydrobiologia.* - 1991. - V. 221, N. 1. - P. 137 – 148.
3. Martínez-Sanz M., Ström A., Lopez-Sanchez P., Knutsen S. H., Balance S., Zobel H. K., Sokolova A., Gilbert E. P., López-Rubio A. Advanced structural characterization of agar-based hydrogels: Rheological and small angle scattering studies // *Carbohydr. Polym.* - 2020. - 115655.
4. Лебедєва К.О., Черкашина Г.М., Савченко Д.О., Лебедєв В.В. Вивчення особливостей гелеутворення та реологічних властивостей гідрогелів на основі агар-агару // *Інтегровані технології та енергозбереження.* - 2022. - №3. – С. 42 - 51.
5. Chirapart A., Ohno M., Ukeda H., Sawamura M., Kusunos H. Effects of partial acid hydrolysis on physical and chemical properties of agar from a newly reported Japanese agarophyte (*Gracilariopsis lemaneiformis*) // *J. Appl. Phycology.* – 1997. - V. 9. – P. 73 – 76.



## ОСОБЛИВОСТІ СИНТЕЗУ ІННОВАЦІЙНИХ ПОЛІМЕРНИХ ІОННИХ РІДИН

*Потанчук М.О., Свердліковська О.С.*

Навчально-науковий інститут “Український державний хіміко-технологічний університет”  
Українського державного хіміко-технологічного університету, [o.sverdlikovska@gmail.com](mailto:o.sverdlikovska@gmail.com)

У роботі досліджено вплив концентрації вихідних мономерів, температури і часу проведення реакції взаємодії третинних діамінів і дигалогенідів на молекулярну масу синтезованих полімерних іонних рідин іоненового типу.

Із залежності приведеної в'язкості полімерних іонних рідин іоненового типу від температури реакції третинних діамінів з дигалогенідами встановлено, що максимальна в'язкість полімерних іонних рідин іоненового типу досягається за температури 50<sup>0</sup>С. Це вказує на те, що збільшення приведеної в'язкості полімерних іонних рідин при підвищенні температури на початку процесу синтезу пов'язано зі збільшенням швидкості зростання ланцюга макромолекули полімеру, а зменшення приведеної в'язкості полімерних іонних рідин при збільшенні температури вище оптимальної – з побічними реакціями хлорметильних груп дихлоридів.

Раніше встановлено [1], що оптимальний час синтезу полімерних іонних рідин іоненового типу з максимальною в'язкістю знаходиться у межах 18-20 годин. Аналогічна закономірність зміни приведеної в'язкості характерна для досліджуваних полімерних іонних рідин іоненового типу з максимумом при тій же тривалості реакції третинного діаміну з дихлоридом, яка складає 20 годин. Треба зазначити, що можна проводити синтез полімерних іонних рідин іоненового типу при температурі 25<sup>0</sup>С до температур кипіння розчинника, проте тривалість реакції при цьому буде складати більше 100 годин.

Результати дослідження впливу концентрації вихідних мономерів на значення приведеної в'язкості синтезованих полімерних іонних рідин іоненового типу наведені на рис. 1.

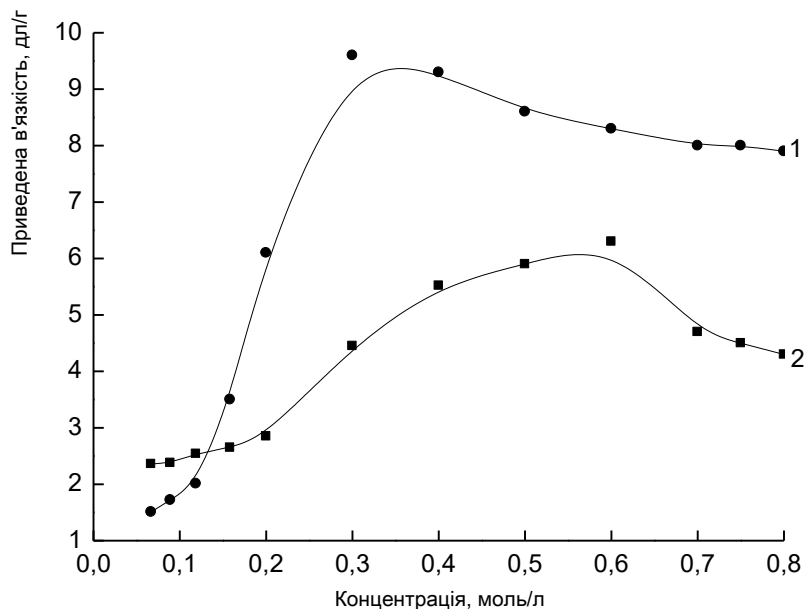


**Рис. 1.** Залежність приведеної в'язкості розчинів полімерних іонних рідин іоненового типу від концентрації вихідних мономерів при температурі 50<sup>0</sup>С протягом 10 годин:  
1 – С-2-2; 2 – С-1-1.

Необхідно зазначити, що оптимальна концентрація вихідних мономерів для отримання полімерних іонних рідин іоненового типу, які містять радикали аліфатичної будови з максимальною в'язкістю відповідає максимуму на цій залежності при концентрації вихідних мономерів, вище 0,3 моль/л, а для полімерних іонних рідин іоненового типу, які містять радикали алкілароматичної будови – 0,6 моль/л. Тобто відбувається згортання макромолекули полімеру, що зумовлене збільшенням кількості й посиленням внутрішньо- та міжмолекулярних взаємодій між продуктами зростання ланцюга полімеру в реакційній суміші. Також спостерігається, що положення максимуму на залежності приведеної в'язкості синтезованих полімерів від концентрації вихідних мономерів визначається будовою полімерних іонних рідин за рахунок впливу упорядкованості будови полімеру на конформацію зростаючого ланцюга його макромолекули і відповідно на активність кінцевих функціональних груп.

Результати проведених досліджень є доцільними з практичної точки зору і дозволяють обґрунтовано підходити до удосконалення методології синтезу полімерних іонних рідин іоненового типу з високою іонною провідністю зі збереженням їх рідкого стану у широкому діапазоні температур. Спосіб синтезу полімерних іонних рідин іоненового типу полягає у взаємодії отриманих третинних діамінів і дигалогенідів. Синтез полімерних іонних рідин іоненового типу проводили у розчиннику змінного складу етанол–вода при початковому співвідношенні 70:30 за температури 50°C протягом 20 годин. Реакцію проводили у гомогенному середовищі: додавали суміш етанол–вода зі вмістом етанолу – 30 об.% для полімерних іонних рідин іоненового типу з меншою густиною заряду в ланцюзі полімеру і 50 об.% для полімерних іонних рідин іоненового типу з більшою густиною заряду в ланцюзі полімеру. Враховуючи суттєву роль конформаційного фактору зростаючого ланцюга макромолекули полііонену в реакційному середовищі, ці дії необхідно повторювати до припинення осадження полімеру. Згідно з існуючими уявленнями: у випадку, коли у реакційній суміші полімер випадає в осад, його макромолекула знаходиться у стані клубка, тобто зі збільшенням ступеня перетворення реакції зменшується розчинність продукту зростання ланцюга полімеру і їх реакційна здатність; при додаванні суміші етанол–вода (збільшується діелектрична проникність реакційного середовища), у якій полімер розчиняється, його макромолекула знаходиться у розгорнутому стані, активні кінцеві функціональні групи знаходяться на поверхні клубка полімеру і доступні для реакції зростання ланцюга полімеру, тобто до збільшення швидкості реакції утворення полімеру з більшою молекулярною масою. Початкова концентрація вихідних мономерів для отримання полімерних іонних рідин іоненового типу з найбільшою молекулярною масою, які містять радикали аліфатичної будови, складає 0,3 моль/л, а для полімерних іонних рідин іоненового типу найбільшою молекулярною масою, які містять радикали алкілароматичної будови, – 0,6 моль/л.

1. Свердліковська О.С., Черваков О.В., Феденко О.О., Кошель С.А., Левченко Є.П. Полімерні іонні рідини та іонні рідини іоненового типу: монографія. – Дніпро, 2020. – 199 с.

## ЗАКОНОМІРНОСТІ ЕСТЕРИФІКАЦІЇ ДИСТИЛЯТУ ВІЛЬНИХ ЖИРНИХ КИСЛОТ *n*-БУТИЛОВИМ СПИРТОМ

*Роговий Ю.О., Мельник С.Р.*

Національний університет «Львівська політехніка», [yurii.o.rohovyi@lpnu.ua](mailto:yurii.o.rohovyi@lpnu.ua)

Бутилові естери вільних жирних кислот (ВЖК) мають нижчу полярність і є кращим розчинником, ніж вихідні карбонові кислоти, характеризуються низькою в'язкістю, достатньою змочуваністю та високою термічною стабільністю. Найпоширенішим у промисловості є каталітичний спосіб їх одержання з використанням концентрованої сульфатної кислоти або матеріалів, функціоналізованих сульфогрупами [1]. Іншими чинниками, які впливають на перебіг реакції є температура [2] і співвідношення реагентів у реакційній суміші [3]. Бутилові естери ВЖК є привабливою альтернативою метиловим естерам, насамперед за низьких температур.

Метою дослідження було визначити закономірності естерифікації *n*-бутанолом (БС) дистиляту ВЖК, одержаного під час дезодорації соняшникової олії, та встановити оптимальні технологічні параметри процесу одержання естерів.

Дослідження проводили за змінних температури, кількості каталізатора та співвідношення реагентів за умови відгонки води, яка утворюється під час реакції. Як реагенти використовували дистилят ВЖК із процесу дезодорації соняшникової олії з кислотним числом 124 мг КОН/г і *n*-бутиловий спирт (марка А). Як каталізатор естерифікації застосовували 25 %-й водний розчин сульфатної кислоти.

Контроль за перебігом реакції здійснювали за накопиченням водного шару у водовідділювачі та титруванням продуктів реакції розчином лугу з подальшим визначенням їх кислотного числа і розрахунком конверсії ВЖК.

Встановлено, що за кількості каталізатора 0,6 % від вмісту реагентів конверсія ВЖК понад 90 % досягається за мольного надлишку *n*-бутанолу, який у 1,5 рази перевищує стехіометричне співвідношення. Мінімальний час реакції для досягнення максимального значення конверсії ВЖК (94,4 %) за мольного співвідношення ДВЖК : БС – 1 : 2 становить приблизно 30 хв. Зі збільшенням надлишку спирту в понад 2,5 рази конверсія ВЖК є на 0,9–1,6 % нижчою.

За мольного співвідношення ДВЖК : БС – 1 : 2 у некаталітичній реакції за 120 хв реакції досягається конверсія ВЖК 41,0 %. За вмісту сульфатної кислоти у реакційній суміші 0,1 мас. % вона збільшується до 97,1 %, а зі збільшенням вмісту каталізатора до 0,6 мас. % практично лінійно зменшується до 95,2 %, можливо частково й за рахунок побічних реакцій.

Незважаючи на значний час реакції (800 хв) за температури 100 °С і вмісту каталізатора 0,1 мас. % значення конверсії ВЖК становить лише 22,5 %. Водночас її збільшення лише на 5 °С забезпечує як скорочення тривалості перетворення, так і збільшення кількості прореагованих ВЖК. За цих умов час реакції становить приблизно 30 хв, а конверсія карбонових кислот – 91,6 %. За подальшого збільшення температури до 125 °С найвища конверсія ВЖК становить 96,9 % за 120 °С.

Отже, оптимальними умовами процесу естерифікації ДВЖК *n*-бутанолом, які забезпечують їх конверсію 94,4–97,1 %, є вміст у реакційній суміші каталізатора 0,1 мас. %, молярне співвідношення ДВЖК : БС – 1 : 2 і температура реакції – 120 °С.

1. Зубенко С. О., Патриляк Л. К. Способи одержання бутилових естерів жирних кислот: сьогодення та перспективи // *Каталіз та нафтохімія*. – 2020. – № 29. – С. 11–23.

2. Одержання біопалива на основі соапстоку / Л. А. Безденежних Н. О., Перфілова, Т. В. Мартинова, М. І. Сокур // *Екологічна безпека*. – № 1/2014 (17). – С. 98–102.

3. Otera, Junzo. Esterification / *Junzo Otera*. – WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2010. – 374 p.

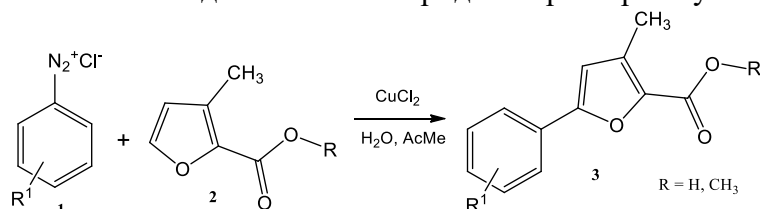
## СИНТЕЗ 3-МЕТИЛ-5-АРИЛФУРАН-2-КАРБОНОВИХ КИСЛОТ ТА ЇХНІ ПЕРЕТВОРЕННЯ

*Садило К.А., Смалюс А.В., Матійчук В.В., Горак Ю.І., Обушак М.Д.*

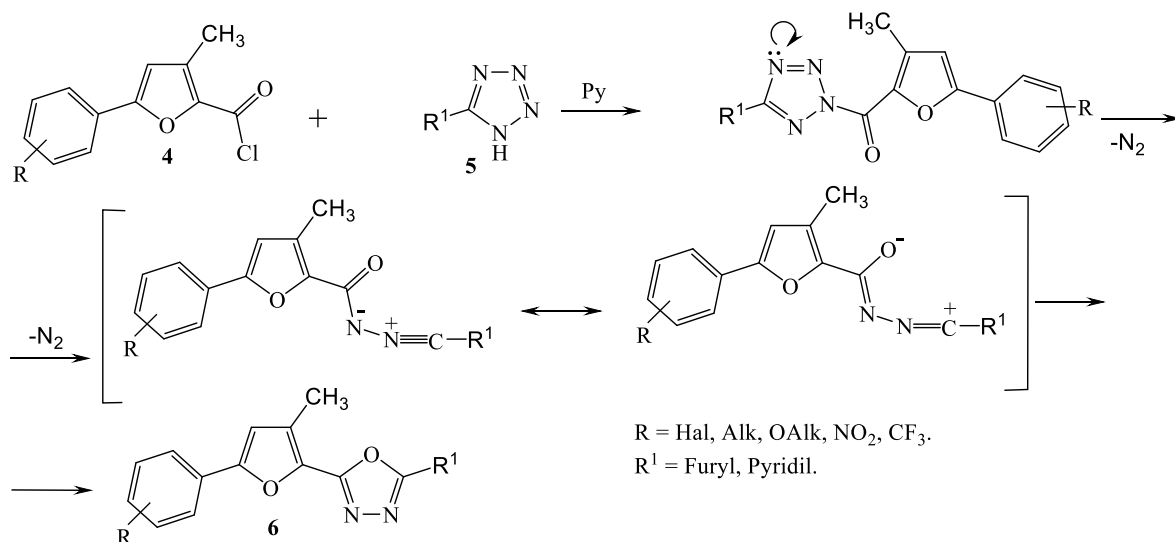
Львівський національний університет імені Івана Франка, [kateryna.sadylo@lnu.edu.ua](mailto:kateryna.sadylo@lnu.edu.ua)

Функціоналізовані фурани, зокрема кислоти арилфуранового ряду – часто вживані реагенти в органічному синтезі, зокрема, для створення комбінаторних бібліотек для скринінгу на біологічну активність, тому синтез нових функціоналізованих похідних фурану з оптимальними виходами є актуальним завданням. Ми запропонували спосіб одержання 3-метил-5-арилфуран-2-карбонівих кислот – нових перспективних реагентів у синтезі конденсованих гетероциклів з арилфурановими замісниками. Ці сполуки отримували за допомогою реакції Меєрвейна.

З'ясовано, що хлориди арендіазонію **1** взаємодіють з 3-метилфуран-2-карбонною кислотою або її метиловим естером **2** селективно, утворюючи продукти арилювання у положення 5 фуранового кільця (сполуки **3**). Арилювання проводили у водно-ацетоновому середовищі за наявності  $\text{CuCl}_2$  до припинення виділення азоту. Таким чином, ми одержали 3-метил-5-арилфуран-2-карбоніві кислоти та їхні естери **3** з виходами до 43%. Естери 3-метил-5-арилфуран-2-карбонівих кислот були омилені до відповідних кислот дією гідроксиду калію в етанолі, а кислоти взаємодією з тіонілхлоридом перетворено у хлорангідриди **4**.



Хлорангідриди 3-метил-5-арилфуран-2-карбонівих кислот **4** використали для синтезу 1,3,4-оксадіазолів з арилфурановим фрагментом. Для формування оксадіазольного циклу використали підхід, який ґрунтується на рециклізації тетразольного циклу. З цією метою ми вивчили взаємодію фурил- та піридилтетразолів **5** з хлорангідридами **4**. При нагріванні реагентів у піридині до припинення виділення азоту отримані сполуки **6**.



1,3,4-Оксадіазоли арилфуранового ряду **6** виявляють сильну люмінесценцію у твердому стані та у розчинах при опроміненні ультрафіолетом при 360 нм.

Робота підтримана фондом *Simons Foundation* (PD-Ukraine-00014574) та Міністерством освіти і науки України.

## ОТРИМАННЯ НЕНАСИЧЕНИХ СПОЛУК НА ОСНОВІ АЛКІЛІДЕНФОСФОРАНІВ

*Сергійчук О.О., Листван В.В.*

Житомирський державний університет ім. І. Франка, [oleksijsergijcuk57@gmail.com](mailto:oleksijsergijcuk57@gmail.com)

Алкіліденфосфорани, також відомі як фосфоріліди, — це органічні сполуки, що містять подвійний зв'язок між атомом фосфору та атомом вуглецю ( $P=C$ ). Вони є похідними третинних фосфінів ( $R_3P$ ) і характеризуються унікальними електронними та хімічними властивостями, що робить їх важливими реагентами в органічному синтезі.

Алкіліденфосфорани в їх реакціях з **альдегідами та кетонами**, де вони діють як нуклеофіли. Ці реакції ініціюються взаємодією нуклеофільного  $\alpha$ -атома Карбону фосфоріліду з електрофільним карбонільним Карбоном, що призводить до утворення алкенів. Найважливішою та найвідомішою трансформацією за участю фосфорілідів в алкени є реакція Віттіга.

Головна перевага реакції Віттіга перед іншими методами отримання алкенів (наприклад, зневодненням спиртів) полягає в тому, що вона дозволяє чітко контролювати положення подвійного зв'язку в кінцевому продукті. Завдяки цьому процесу синтетики можуть отримувати високоселективні сполуки, що є надзвичайно важливим у фармацевтичній хімії, агрохімії та матеріалознавстві.

Об'ємні замісники в структурі іліду відіграють важливу роль у визначенні стереохімічного результату реакції. Під час нуклеофільного приєднання фосфоріліду до карбонільної сполуки утворюється бетаїн, у якому замісники  $R_1$  та  $R_2$ , а також  $PPh_3^+$  і  $O^-$  перебувають в анти-положенні (тобто транс- положенні).

Подальше обертання Карбон-Карбонового зв'язку сприяє утворенню циклічного оксафосфетану, який в результаті елімінації розпадається з утворенням Z-алкену та оксиду трифенілфосфіну ( $Ph_3P=O$ ).

Для звичайних (нестабілізованих) ілідів перший етап (утворення бетаїну) проходить швидко, незалежно від того, чи це альдегід, чи кетон. Отже, швидкість реакції визначається розпадом бетаїну. Для стабілізованих ілідів (де R має електроноакцепторну природу та стабілізує негативний заряд на Карбоні) найповільнішим стає саме перший етап— нуклеофільна атака на карбонільний центр. Як наслідок, зменшується загальна швидкість реакції, а основним продуктом є E-алкен, оскільки стабілізація негативного заряду сприяє іншим конформаційним перебудовам у проміжних стадіях.

Це також пояснює, чому стабілізовані іліди погано реагують з об'ємно заміщеними кетонами—стеричні перешкоди ускладнюють початкову атаку на карбонільний центр, значно знижуючи ефективність реакції.

## РЕОЛОГІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ВУГЛЕВОДНЕВИХ СМОЛ С9 ОТРИМАНИХ ДИСПЕРСІЙНОЮ ОЛІГОМЕРИЗАЦІЄЮ

Субтельний Р.О., Томков Т.О., Сціра В.О., Баліцький І.Г.

Національний університет «Львівська політехніка», [roman.o.subtelnyi@lpnu.ua](mailto:roman.o.subtelnyi@lpnu.ua)

Вуглеводневі смоли є олігомерними продуктами, отриманими з нафтохімічної сировини. Їх синтез базується на олігомеризації ненасичених вуглеводнів, що містяться у рідких побічних продуктах піролізу бензинових і дизельних фракцій, зокрема С9-фракції (422–473 К). Вони широко застосовуються в антикорозійних покриттях і друкарських фарбах.

Досліджено реологічні властивості вуглеводневих смол С9 отриманих різними методами:

Смоли (1, 2) – отримані шляхом високотемпературної вільнорадикальної (ініційованої і термічної) олігомеризації, є коолігомерами стирену та циклопентадієну.

Смоли (3, 4) – отримані методом низькотемпературної (313 К) емульсійної олігомеризації в присутності окисно-відновних систем.

Смоли (5, 6) – отримані методом низькотемпературної (353 К) суспензійної олігомеризації. Смоли (3–6) є коолігомерами стирен та його похідних.

Середня молекулярна маса досліджених смол визначена криоскопічно – 500–690. Температура роз'мякшення (метод «ring and ball») – 347–358 К.

Динамічну в'язкість 10% розчинів смол визначали за допомогою віскозиметра Освальда з діаметром капіляра 0,56 мм. Час витікання вимірювали при шести різних температурах у діапазоні 293–343 К з інтервалом у 10 К. У капілярному віскозиметрі перепад тиску, створений вагою стовпа рідини, обчислювали як добуток густини рідини, висоти стовпа та прискорення вільного падіння. Швидкість зсуву визначали як відношення об'ємної витрати рідини до геометричних параметрів капіляра (діаметр капіляра –  $d = 0,56$  мм, висота – 32 мм). Напруження зсуву обчислювали як функцію перепаду тиску та діаметра капіляра. Густину розчину смоли в бензені та густину чистого бензену при різних температурах визначали методом дилатометрії.

Таблиця

Реологічні властивості розчинів вуглеводневих смол

| Смола | Температурний коефіцієнт, мПа·с/К | Густина на одиницю в'язкості, м <sup>-1</sup> ·с <sup>-1</sup> |        | Показник текучості | Константа консистенції, Па·с <sup>n</sup> |
|-------|-----------------------------------|----------------------------------------------------------------|--------|--------------------|-------------------------------------------|
|       |                                   | 293 К                                                          | 343 К  |                    |                                           |
| 1     | –0.011                            | 909.1                                                          | 1760.0 | –0.129             | 3.49                                      |
| 2     | –0.009                            | 1012.1                                                         | 1958.0 | –0.144             | 3.07                                      |
| 3     | –0.021                            | 507.0                                                          | 1201.5 | –0.111             | 2.70                                      |
| 4     | –0.012                            | 845.4                                                          | 1529.1 | –0.187             | 5.55                                      |
| 5     | –0.014                            | 727.6                                                          | 1620.9 | –0.110             | 2.71                                      |
| 6     | –0.014                            | 783.3                                                          | 2085.5 | –0.078             | 2.10                                      |

В'язкість цих розчинів знижується зі зростанням температури, що характерно для псевдопластичних, неньютонівських рідин. Температурний коефіцієнт для смол знаходиться в межах від –0,009 до –0,021 мПа·с/К, що вказує на суттєве зменшення в'язкості з підвищенням температури. Показник густини на одиницю в'язкості при 293 К варіюється від 507,0 до 1012,1 кг/м<sup>3</sup>, а при 343 К – від 1083,7 до 2085,5 кг/м<sup>3</sup>. Це свідчить про різницю у молекулярних структурах і їхній вплив на поведінку потоку за різних температур. Показник текучості ( $n$ ) змінюється від –0,187 до –0,078, підкреслюючи сильну псевдопластичну поведінку розчинів смол. Константа консистенції (яка є мірою опору матеріалу потоку) – 2,1–5,55 Па·с<sup>n</sup>.

Отримані результати підтверджують, що вуглеводневі смоли С9 одержані суспензійною та емульсійною олігомеризацією придатні для використання у високотемпературних середовищах та в умовах, які потребують стабільної плинності, зокрема, у лакофарбових покриттях.



## ОСОБЛИВОСТІ ПОВЕДІНКИ ГІДРОГЕЛІВ НА ОСНОВІ НАТРІЮ АЛЬГІНАТУ

*Тимчук А.Ф., Олейніков М.І.*

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, [Tymchuk@onu.edu.ua](mailto:Tymchuk@onu.edu.ua)

Гідрогелі на основі природних високомолекулярних сполук мають ряд унікальних фізико-хімічних властивостей, які сприяють їх використанню у багатьох областях, особливо у хімії, біомедицині, фармацевтиці. Функціональність гідрогелів визначають їх фізико-хімічні властивості. Гідрофільність гідрогелів обумовлена наявністю полярних функціональних груп в структурі полімерів. Гідроксильні, карбоксильні, амідні та інші групи здатні утворювати водневі зв'язки з молекулами води, завдяки чому гідрогелі поглинають кількість води, що значно перевищує їх власну масу, та фізично утримують її всередині структури. Ці системи чутливі до зовнішніх факторів та змінюють свої характеристики (ступінь набухання, проникність, механічні властивості та ін.) у відповідь на зміни параметрів середовища, що відкриває широкі можливості для створення систем з керованою поведінкою.

Метою роботи було отримання та дослідження властивостей гідрогелів, утворених природною високомолекулярною сполукою – натрію альгінатом. Саме природні полімери були обрані для отримання гелів, завдяки їх цінним властивостям - біосумісності, здатності до біорозкладання, поновлення сировинної бази. Гідрогелі на основі полімерів, що містять іонізовані групи, здатні набухати або колапсувати в залежності від рН середовища.

Модифікування гелів проводили додаванням каоліну та діатоміту. Досліджували кінетику набрякання та деструкції гідрогелів. В якості моделей відносного вивільнення речовин з альгінатних гідрогелів використовували поверхнево-активні речовини – натрію додецилсульфат, гекспецилпіридинію хлорид. Ступінь вивільнення розраховували якісно за зміною об'єму розчину ПАР, що виділявся з гідрогелю. Раніше [1] було показано, що вони взаємодіють з альгінатом натрію за фізичним механізмом, без утворення ковалентних зв'язків. Вивчення профілю вивільнення ПАР з альгінатних гідрогелів показало наступні закономірності. При низьких значеннях рН вивільнення речовини з гелю сповільнюється. В лужному середовищі при розчиненні альгінатної матриці може відбуватися активне вивільнення речовини, що може спричинити неконтрольоване підвищення його концентрації, що є небажаним у випадку вивільнення, наприклад, лікарських препаратів в організмі. Підбір оптимального значення рН та модифікування гелів дозволяє отримати регульоване вивільнення речовини з гідрогелю, тобто, змінюючи ці параметри, можна керувати профілем вивільнення речовин. Але треба враховувати той факт, що процес вивільнення речовини може протікати або за рахунок деструкції макромолекули полімеру в сильнолужному або сильнокислотному середовищі, або за рахунок дифузії. Для контрольованого вивільнення та доставки лікарського препарату краще працює дифузійний механізм.

Результати проведених експериментів показали, що склад, рН середовища, умови зшивання та модифікації впливають на властивості отриманих гідрогелів. Варіюючи ці фактори, можна отримувати гідрогелі з контрольованими властивостями, що відповідають вимогам конкретного застосування. Отримані дані можуть бути спрямовані на оптимізацію складу та методів отримання гідрогелів на основі альгінату натрію, а також на вивчення їх поведінки в різних умовах; використані для подальшої розробки та оптимізації гідрогелевих терапевтичних систем.

1. Тимчук А. Ф., Гросу А. О., Бабенко А. В. Вивчення солюбілізуючої здатності полімер - колоїдних комплексів, що утворені альгінатом натрію та хлоридом гексадецилпіридинію// *Вісник ОНУ. Хімія*. 2021.- Т. 26, вип. 2(78). С. 40-47.

## ЗРУЧНИЙ СПОСІБ СИНТЕЗУ ЗАМІЩЕНИХ 2-ХЛОРБЕНЗІМІДАЗОЛІВ

Толкунов В.С., Толкунов А.С., Смирнова О.В., Толкунов С.В.

Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка

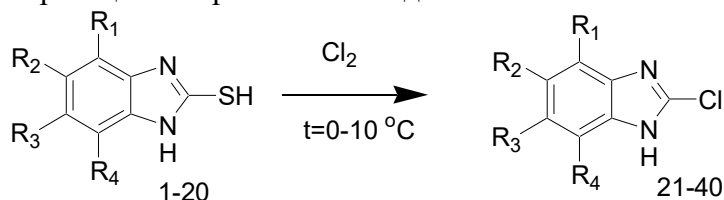
НАН України, [s\\_tolkunov@yahoo.com](mailto:s_tolkunov@yahoo.com)

Похідні бензімідазолів заслуговують уваги як універсальні фармакофори в медичній хімії. Бензімідазольне кільце є одним з основних каркасів для розробки та синтезу нових молекул, що мають терапевтичну цінність. Похідні бензімідазолів виявляють широкий спектр біологічних активностей, таких як антимікробна, протипухлинна, глистогінна, протигрибкова. Фунгіциди на основі бензімідазолів зареєстровані в багатьох країнах для вирощування понад 70 сільськогосподарських структур. У зв'язку з цим бензімідазоли активно вивчаються в медичній хімії як перспективні сполуки для пошуку нових ліків. 2-Хлорбензімідазоли, завдяки наявності активного хлору, здатного до нуклеофільного заміщення, можуть бути застосовані як ключові об'єкти для раціонального дизайну систем із вираженою фармакологічною дією.

Незважаючи на те що методи синтезу 2-хлорбензімідазолів відомі, синтез багатьох заміщених похідних 2-хлорбензімідазолів становить певні труднощі, пов'язані з нестабільними виходами кінцевих продуктів (28-90%) та складністю очищення.

З метою синтезу різнозаміщених 2-хлорбензімідазолів досліджено кілька шляхів їх одержання.

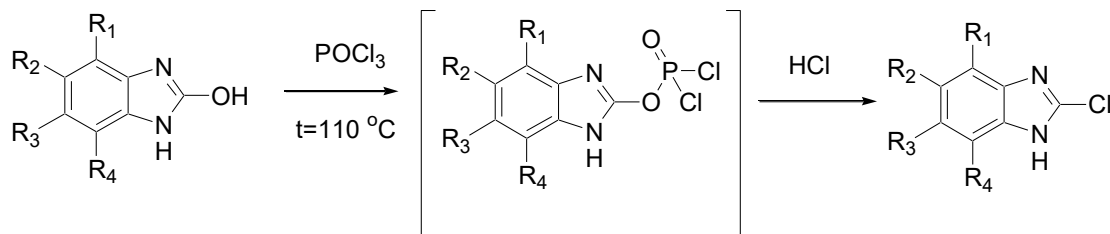
Метод А: На основі реакцій 2-меркаптобензімідазолів.



За методом А суспензію 2-меркаптобензімідазолів у соляній кислоті насичують газоподібним хлором при температурі  $0-10^\circ\text{C}$ . У процесі реакції вихідні 2-меркаптобензімідазоли перетворюються на гідрохлориди 2-хлорбензімідазолів.

Зазвичай використовують 5-6 кратний надлишок хлору. Після фільтрації продукти суспендують у метанолі та відфільтровують. Сполуки не потребують додаткового очищення. Виходи 2-хлорпохідних складають 66-81%. Метод використаний для синтезу 4,5,6,7-галогензаміщених бензімідазолів. Наявність донорних замісників сприяє хлоруванню бензімідазольного кільця.

Метод Б: На основі реакцій 2-оксибензімідазолів з хлорокисом фосфору.



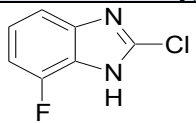
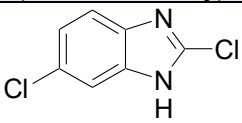
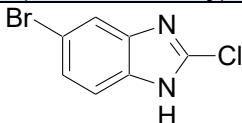
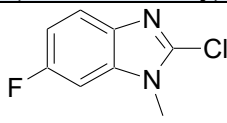
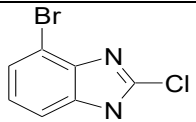
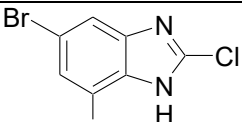
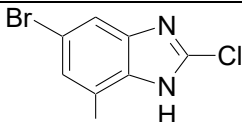
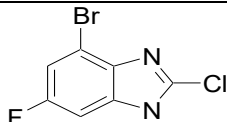
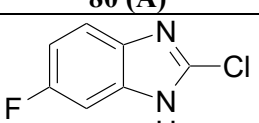
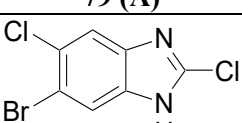
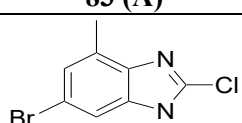
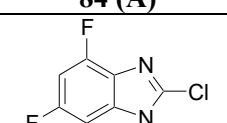
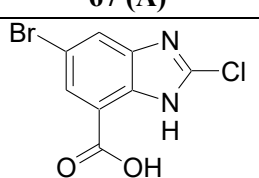
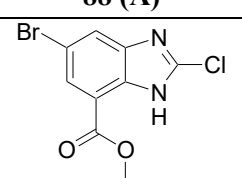
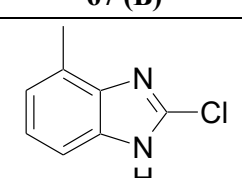
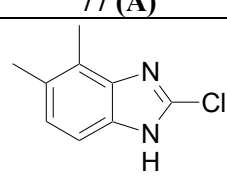
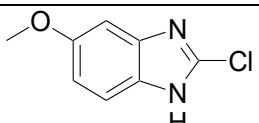
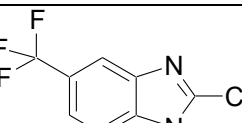
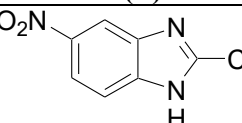
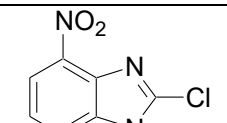
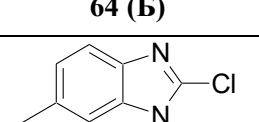
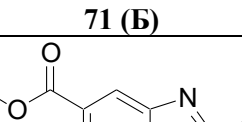
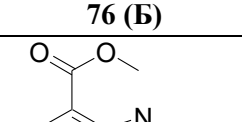
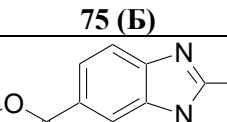
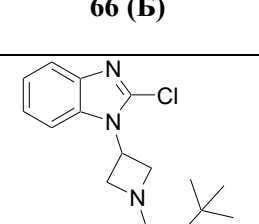
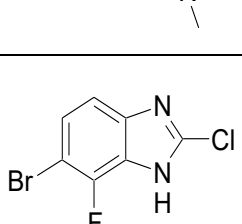
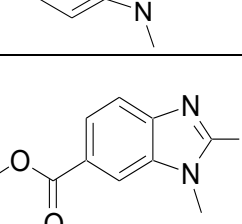
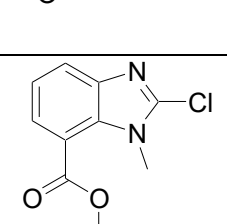
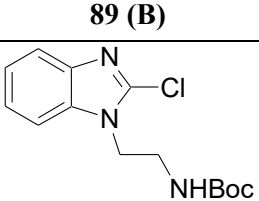
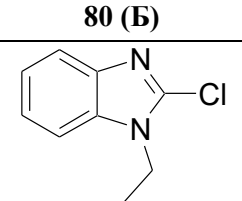
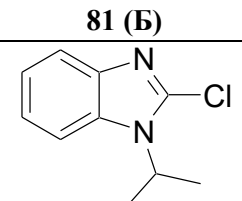
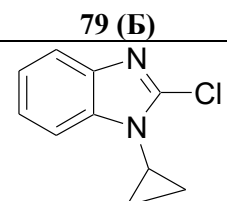
За методом Б суспензію 2-оксибензімідазолів у 20-30-кратному надлишку хлорокису фосфору кип'ятять 8 годин. Охолоджують до  $30^\circ\text{C}$  і по краплях додають 37% соляну кислоту (30% від ваги вихідної речовини). Кип'ятять ще 8 годин.

Після видалення хлорокису фосфору суміш розчиняють у холодній воді, нейтралізують поташем. Продукт відфільтровують. Метод універсальний. Може використовуватись для будь-яких замісників.

Метод В: Алкілювання 2-хлорбензімідазолів.

Таблиця

Структури 2-хлор-1,3-бензімідазолів, отриманих за методами А, Б, В.

| Структура<br>бензімідазолів<br>Вихід %,<br>(Метод синтезу)                                           | Структура<br>бензімідазолів<br>Вихід %,<br>(Метод синтезу)                                           | Структура<br>бензімідазолів<br>Вихід %,<br>(Метод синтезу)                                            | Структура<br>бензімідазолів<br>Вихід %,<br>(Метод синтезу)                                             |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <br><b>66 (A)</b>   | <br><b>68 (A)</b>   | <br><b>82 (A)</b>   | <br><b>79 (B)</b>   |
| <br><b>80 (A)</b>   | <br><b>79 (A)</b>   | <br><b>83 (A)</b>   | <br><b>84 (A)</b>   |
| <br><b>67 (A)</b>   | <br><b>88 (A)</b>   | <br><b>67 (B)</b>   | <br><b>77 (A)</b>   |
| <br><b>70 (A)</b>  | <br><b>70 (B)</b>  | <br><b>69 (B)</b>  | <br><b>75 (B)</b>  |
| <br><b>64 (B)</b> | <br><b>71 (B)</b> | <br><b>76 (B)</b> | <br><b>75 (B)</b> |
| <br><b>66 (B)</b> | <br><b>71 (B)</b> | <br><b>81 (B)</b> | <br><b>79 (B)</b> |
| <br><b>89 (B)</b> | <br><b>80 (B)</b> | <br><b>81 (B)</b> | <br><b>79 (B)</b> |
| <br><b>88 (B)</b> | <br><b>86 (B)</b> | <br><b>83 (B)</b> | <br><b>86 (B)</b> |

# ВИСОКОМОДУЛЬНІ ПОЛІМЕРНІ МАТЕРІАЛИ МЕДИЧНОГО ПРИЗНАЧЕННЯ НА ОСНОВІ ПОЛІФУНКЦІОНАЛЬНИХ АКРИЛАТІВ

Толстов О.Л.

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України, [a.tolstov@ukr.net](mailto:a.tolstov@ukr.net)

Полімерні матеріали медичного призначення поєднують різні типи полімерів залежно від їх фізико-механічних властивостей, безпечності та біосумісності, стабільності під дією біологічних середовищ, інших експлуатаційних характеристик відповідно до напрямку застосування. Найбільш розповсюдженими полімерами для медицини є полісилоксани, поліуретани, поліолефіни, поліаміди та інші.

Акрилатні (уретанакрилатні) полімерні матеріали та композити так само є перспективними для застосування в медичній галузі через широкі можливості контролю кінцевих властивостей внаслідок різноманіття акрилатних мономерів, поєднання яких в складні системи дозволяє в широких межах впливати на цільові характеристики продуктів на їх основі. Варіювання (мет)акрилатних мономерів з різною полярністю, типом замісників та функціональністю можна отримати жорсткі, гнучкі та еластичні матеріали, гідрофобні покриття та гідрогелі, прозорі та непрозорі матеріали, впливати на адгезію до широкого спектру аналогічних та різнорідних матеріалів.

Одним з різновидів полімерних матеріалів медичного призначення є високомодульні матеріали, що використовуються як конструкційні матеріали для інструментарію та приладдя, так і для стоматології та ортодонтальної терапії. Одним з сучасних напрямів використання високомодульних полімерів є створення елайнерів – виробів для корекції прикусу та з декоративною метою. Широке застосування в цьому напрямі набули поліестери як результат поєднання високої міцності, пружності, здатності до технологічної обробки тощо.

На сьогодні акрилатні полімерні матеріали мають значний потенціал застосування у даній галузі через інтенсивний розвиток адитивних технологій, що значно спрощує технологічні аспекти формування виробів без використання надскладного обладнання та специфічних умов.

Метою даної роботи було розроблення складу акрилатних фотополімерних композицій для одержання оптично прозорих високомодульних матеріалів, які за своїми властивостями не поступаються сучасним зразкам термоформованих поліестерних матеріалів для елайнерів.

Експериментальним шляхом було підібрано склад (мет)акрилатної фотополімерної системи на основі ди-, три- та поліфункціональних мономерів та умови їх твердіння для знадання отриманим матеріалам наступних характеристик:

- високого початкового модулю пружності в діапазоні температур до 40 °C;
- збереження модулю пружності впродовж тривалого часу навантаження;
- низької гідрофільності;
- витримування помірних деформаційних навантажень.

Схема одержання високомодульних матеріалів даного типу наведена на рис. 1.

Базові характеристики розробленого високозшитого полімерного матеріалу наведені на рис. 2.

Видно, що розроблений зразок матеріалу має високе значення початкового модулю пружності, що досягає 1,8 ГПа, який впродовж 24 год знижується за експоненціальним законом до 0,6 ГПа та зберігає такий рівень протидії навантаженню впродовж тривалого часу. При порівнянні отриманого зразка зі стандартним термоформувальним полімерним матеріалом для елайнерів (рис. 3) можна спостерігати покращення окремих параметрів, що відображає його перспективність для застосування як одного з видів матеріалів для дентального застосування.

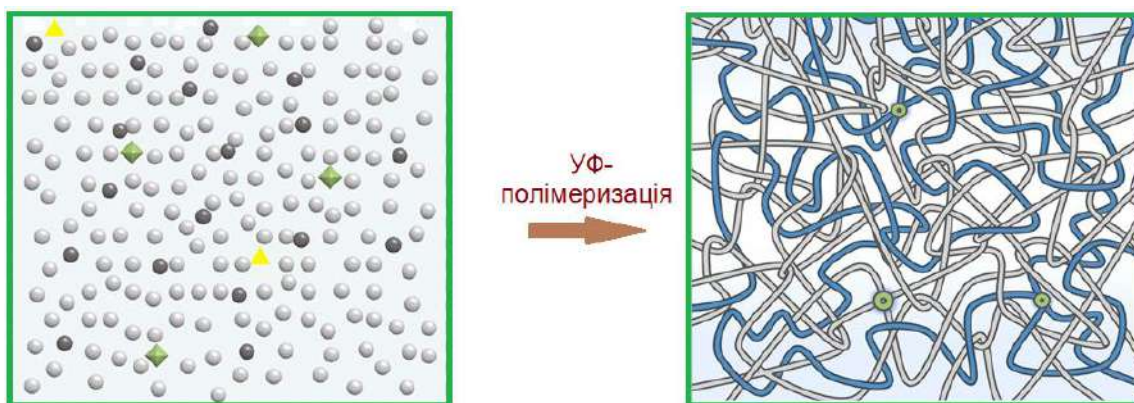


**Рис. 1.** Схема формування високомодульних акрилатних полімерних матеріалів.

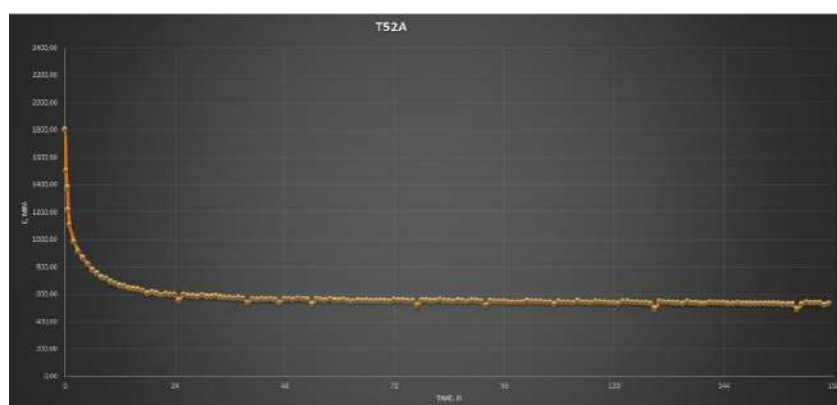


**Рис. 2.** Залежність модулю пружності високомодульного акрилату T52A від часу дії навантаження.

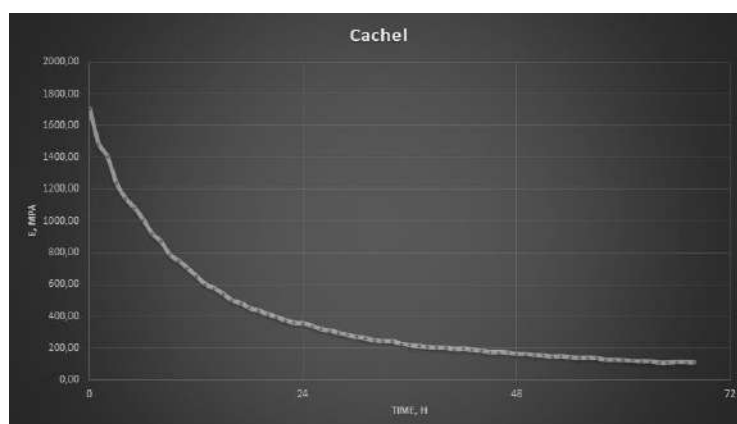


**Рис. 3.** В'язкопружні властивості комерційного термоформувального матеріалу для елайнерів.

Отже розроблені високомодульні акрилатні системи мають потенціал практичного використання як матеріали медичного призначення для дентального застосування.

# ВПЛИВ ТИПУ ОЛІГОМЕРНОЇ СКЛАДОВОЇ НА ВЛАСТИВОСТІ УРЕТАНАКРИЛАТІВ КОНСТРУКЦІЙНОГО ПРИЗНАЧЕННЯ

Толстов О.Л.

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України, [a.tolstov@ukr.net](mailto:a.tolstov@ukr.net)

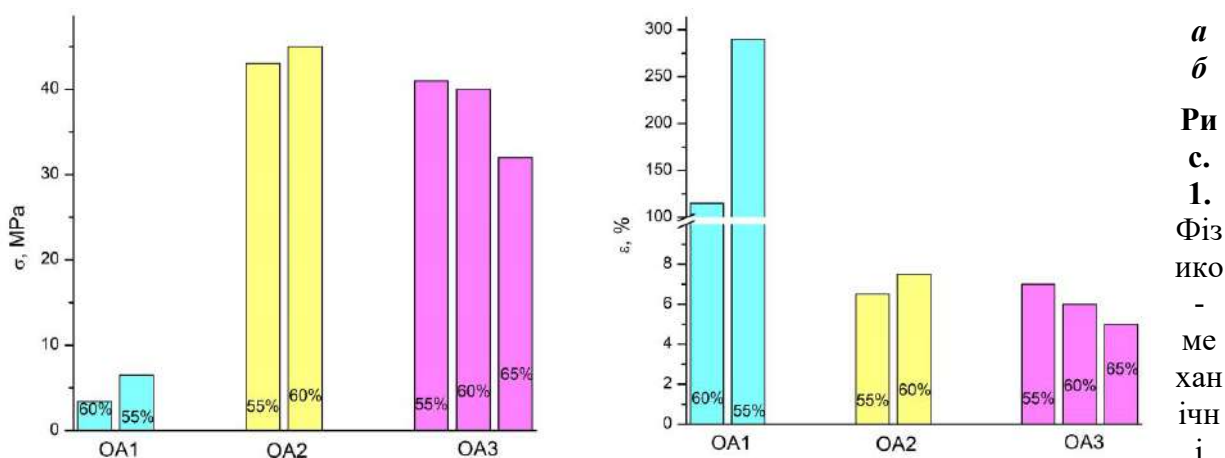
(Мет)акрилатні полімерні матеріали, залежно від типу використаних мономерів та особливостей їх формування можуть мати найрізноманітніші властивості – фізико-механічні та адгезійні, гідро- та ліофільність, хімічну та світлостійкість, світлопрозорість тощо. Сучасні підходи дозволяють регулювати ці характеристики відповідно до кінцевого призначення полімерного матеріалу.

Метою роботи було встановлення впливу олігомерної складової мономер-олігомерних рідких (мет)акрилатних фотополімерних систем на їх технологічні та фізико-механічні властивості.

В роботі було синтезовано три типи олігомерних уретанакрилатів:

- OA1 на основі ПТМГ-1000, ізофорондіізоціанату (ІФДІ) та 2-гідроксиетилакрилату (2ГЕА);
- OA2 на основі дифенілметандіізоціанату (ДФМДІ) та 2ГЕА;
- OA3 на основі ІФДІ та 2ГЕА).

Як реакційні розріджувачі було використано 2-етилгексидакрилат, 2ГЕА та Акрилову кислоту. Вплив олігомерної складової визначали за співмірного співвідношення реакційних розріджувачів та олігомерного компоненту (в складі фотополімерної композиції). Твердіння проводили при опроміненні композиції світлом з довжиною хвилі 405 нм при використанні як ініціатору фосфін-оксидного типу. Залежність фізико-механічних характеристик отверднених систем в залежності від типу та вмісту олігомеру наведена на рис. 1.



характеристики отверднених акрилатних фотополімерних систем: (а) міцність при розриві, (б) відносне подовження при розриві. На колонках зазначено вміст олігомерної складової.

Використання олігомерної складової на основі олігомерного поліетеру сприяє еластифікації кінцевого матеріалу, що веде до зниження міцності кополімеру, але покращенню його деформаційних характеристик. Поліфункціональні олігомери жорсткої будови сприяє значному підвищенню міцності матеріалів, але деформаційні характеристики матеріалів значно погіршуються. Максимальної міцності можна досягти при використанні олігомерів на основі ДФМДІ, як це відбувається при отриманні окремих типів конструкційних поліуретанів методом реакційного формування.

Результати даної роботи є підґрунтям для розроблення багатофункціональних жорстких поліуретанакрилатних систем різного призначення.



# КРЕМНІЙОРГАНІЧНІ УЩІЛЬНЮВАЧІ НА ОСНОВІ ПОЛІАЛКІЛСИЛОКСАНІВ ТА ПОЛІФУНКЦІОНАЛЬНИХ ЕЛЕМЕНТОРГАНІЧНИХ ДОМІШОК

Толстов О.Л.

Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України, [a.tolstov@ukr.net](mailto:a.tolstov@ukr.net)

Полісилоксани є важливим класом промислових полімерних матеріалів з широким потенціалом практичного застосування [1]. На основі полісилоксанів різної будови виробляють клеї, ущільнювачі, герметики, теплозахисні матеріали, ливарні компаунди, електроізолювальні матеріали тощо. Найважливішими характеристиками таких полімерів є їх висока теплова, світло- та хімічна стійкість, регульована міцність та деформаційна стійкість, контрольована адгезія, електроізоляційні характеристики тощо.

Незважаючи на широкий асортимент розроблених промислових матеріалів на основі полісилоксанів, є низка галузей, де матеріали даної будови потребують доопрацювання. Зокрема це стосується надання адгезії до низькоенергетичних матеріалів. Полісилоксани загальнопромислового типу не мають адгезії до багатьох видів полімерних поверхонь, що, що обмежує їх використання по деяких напрямках. Для забезпечення покращених адгезійних характеристик необхідно застосування поліфункціональних структурних модифікаторів та каталізаторів для забезпечення контрольованого процесу твердіння під час формування адгезійного шару.

В роботі було проведено дослідження впливу каталізаторів поліконденсації силоксанів та структурних модифікаторів на адгезійну міцність полісилоксанів з мінеральним та органічним склом. Як полісилоксановий компонент було вибрано полідиметилсилоксан з кінцевими силанольними групами. Як каталізatori твердіння були застосовані сполуки стануму з різним типом замісників.

Встановлено, що хімічна будова каталізаторів критично впливає на швидкість поліконденсації кремнійорганічних сполук. Присутність структурних модифікаторів, як алкілполіалкоксисиланів з різною природою замісників, може, залежно від природи замісника, як прискорювати, так і уповільнювати процес поліконденсації, а також спричиняти процеси мікрофазового розшарування, що погіршує технічні характеристики кінцевого продукту. При використанні 5% наноструктуровального кремнійорганічного модифікатору було досягнута наступна величина межі міцності при розшаруванні: для клейового з'єднання скло/скло 2,0 Н/см<sup>2</sup>, а для клейового з'єднання скло/оргскло 4,8 Н/см<sup>2</sup>. Збільшення вмісту модифікатору в реакційній системі підвищило показники адгезійної міцності у 1,5-1,8 разів.

Наразі продовжуються роботи по вивченню впливу модифікуючих добавок іншого типу на адгезійні та інші експлуатаційні характеристики полісилоксанів багатоцільового призначення.

1. Mark J.E., Schaefer D.W., Lin G. The Polysiloxanes. Oxford University Press, 2015. – 277 p.

# ДОСЛІДЖЕННЯ ІНІЦІЙОВАНОЇ ПЕРОКСИДАМИ ОЛІГОМЕРИЗАЦІЇ ВУГЛЕВОДНЕВИХ ФРАКЦІЙ C<sub>5</sub> І C<sub>9</sub> - ПОБІЧНИХ ПРОДУКТІВ ВИРОБНИЦТВА ЕТИЛЕНУ

*Федотова О.Б., Романів В.П., Дзіняк Б.О.*

Національний університет «Львівська політехніка», [o.dziniak@lpnu.ua](mailto:o.dziniak@lpnu.ua)

Досліджено закономірності ініційованої пероксидами олігомеризації вуглеводневих фракцій C<sub>5</sub> та C<sub>9</sub> рідких побічних продуктів виробництва етену піролізом прямогонного бензину. Вибрано ефективний ініціатор олігомеризації – ді-*трет*-бутилпероксид та визначено оптимальні умови реакції: температура 448 К; тривалість 6 годин; концентрація ініціатора 0,05 моль/л.

Виробництво олефінів здійснюється, в основному, високотемпературним піролізом різних нафтових фракцій – газоподібних вуглеводнів, бензинових і дизельних фракцій тощо. При цьому окрім цільових продуктів (етилен і пропілен) одержують значну кількість (до 25–30% мас.) побічних продуктів, що є складною сумішшю аліфатичних та ароматичних вуглеводнів, і які зазвичай розділяють на окремі фракції, зокрема фракції C<sub>4</sub>, C<sub>5</sub>, C<sub>6</sub>-C<sub>8</sub>, C<sub>9</sub>, C<sub>9+</sub> тощо. З огляду на вміст значної кількості ненасичених вуглеводнів практичний інтерес представляють фракція C<sub>5</sub>, яка містить ізопрен, цикlopентадієн, пентен, і фракція C<sub>9</sub>, що містить стирол, інден, дициклопентадієн тощо. Ці фракції є сировиною для одержання вуглеводневих смол, які відомі як «нафтополімерні смоли» [1-3]. Завдяки доступності, невисокій вартості, хороших експлуатаційних характеристик вони використовуються в різних галузях промисловості, зокрема у виробництві лакофарбових матеріалів, клеїв, друкарських фарб, модифікованих бітумів тощо [4-5].

У результаті досліджень олігомеризації суміші ненасичених вуглеводнів фракцій C<sub>5</sub> і C<sub>9</sub> з використанням пероксидних ініціаторів встановлено, що з ростом температури та тривалості реакції збільшується вихід вуглеводневої смоли, зростає її температура розм'якшеності, але підвищення температури реакції негативно впливає на колір, молекулярну масу та бромне число олігомеру.

Окрім впливу температури та тривалості реакції вивчено вплив природи та концентрації ініціатора, а також масового співвідношення [фракція C<sub>5</sub>] : [фракція C<sub>9</sub>] на вихід і фізико-хімічні показники вуглеводневої смоли.

За результатами досліджень вибрано ефективний ініціатор олігомеризації вуглеводнів фракцій C<sub>5</sub> і C<sub>9</sub> рідких побічних продуктів піролізу прямогонного бензину – ді-*трет*-бутилпероксид та визначено оптимальні умови реакції: температура 448 К; тривалість 6 годин; концентрація ініціатора 0,05 моль/л. В оптимальних умовах одержано вуглеводневу смолу, фізико-хімічні показники якої відповідають вимогам ТУ У 6-05743160.020-99 «Смола нафтополімерна лакофарбова синтетична», та яка може використовуватися як заміник олії у виробництві лакофарбових матеріалів.

1. Speight J. G. Handbook of industrial hydrocarbon processes. – 2019. -786.
2. Mildenberg R., Zander M., Collin G. *Hydrocarbon Resins*. – 207. - 179.
3. Zohuriaan-Mehr M. J., Omidian H. Petroleum resins: an overview. *Journal of Macromolecular Science, Part C: Polymer Reviews*. – 2000. - 40(1). - 23-49.
4. Магорівська, Г.Я., Дзіняк, Б.О. Використання нафтополімерних смол у композиційних матеріалах. Питання хімії та хімічної технології . – 2007. - (1). - 97-99.
5. Дзіняк Б.О., Федотова О.Б. Використання олігомерів на основі побічних продуктів виробництва етилену у лакофарбових матеріалах. *Chemistry, Technology and Application of Substances* . – 2024. - 7 (1). - 60-65.

# МОДИФІКАЦІЯ БІСАМІДІВ УГІ НА ОСНОВІ $\alpha,\beta$ -НЕНАСИЧЕНИХ АЛЬДЕГІДІВ ШЛЯХОМ МІКРОХВИЛЬОВОГО АЗИДУВАННЯ

Циганков О.В.<sup>1,2</sup>, Верещак В.О.<sup>1,2</sup>, Фадєєва С.М.<sup>1,2</sup>, Чебанов В.А.<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> ДНУ НТК «ІМК» НАНУ, Інститут функціональних матеріалів, [vladver02@gmail.com](mailto:vladver02@gmail.com)

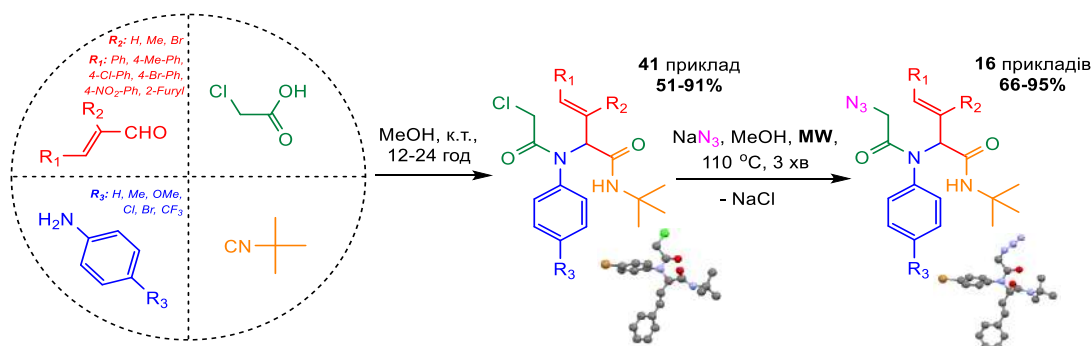
<sup>2</sup> Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»,

<sup>3</sup> Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Органічні азиди – важливий клас сполук, що можуть виступати прекурсорами для синтезу різноманітних амінів, гетероциклічних сполук, що містять триазольні або тетразольні фрагменти, а також мають застосування у фармацевтичних препаратах. [1,2]

Нами було синтезовано бібліотеку нових бісамідів Угі на основі  $\alpha,\beta$ -ненасичених альдегідів, *n*-заміщених анілінів, хлороцтової кислоти та *трет*-бутил ізоціаніду (схема).

## Схема



Азидопохідні бісамідів Угі на основі  $\alpha,\beta$ -ненасичених альдегідів

Наступним кроком було проведено скринінг умов азидування за допомогою азиду натрію, різних розчинників та термічної або мікрохвильової активації (таблиця).

## Таблиця

Скринінг умов азидування бісаміду Угі ( $R^1 = \text{Ph}$ ,  $R^2 = \text{H}$ ,  $R^3 = \text{CF}_3$ )

| Умови             |                                |         |                 | Вихід азидобісаміду, % |
|-------------------|--------------------------------|---------|-----------------|------------------------|
| Розчинник         | Каталізатор                    | Т, °С   | Час реакції, хв |                        |
| DMA               | K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> | 25      | 30              | 43                     |
| Acetone           | -                              | MW, 50  | 90              | 59                     |
| Acetone           | -                              | MW, 100 | 10              | Сліди                  |
| Acetone           | -                              | MW, 60  | 120             | 71                     |
| Acetone           | -                              | 60      | 120             | 33                     |
| Acetone           | 10 mol% NaI                    | 60      | 120             | 80                     |
| Acetonitrile      | -                              | MW, 60  | 120             | 69                     |
| MeNO <sub>2</sub> | -                              | MW, 60  | 120             | -                      |
| MeOH              | -                              | 60      | 30              | 61                     |
| MeOH              | -                              | MW, 110 | 3               | 82                     |
| <sup>t</sup> PrOH | -                              | MW, 120 | 5               | Сліди                  |

За найбільш зручною та ефективною методикою за допомогою мікрохвильової активації суміші бісаміду з азидом натрію в середовищі метанолу за температури 110 °С протягом трьох хвилин було синтезовано ряд сполук із задовільними та відмінними виходами (схема). Такий підхід до синтезу азидобісамідів, застосований нами вперше, дозволив суттєво пришвидшити процес отримання цільових сполук, зменшити утворення побічних продуктів, суттєво скоротивши час нагрівання, і, що найбільш важливо, одразу отримувати чисті цільові сполуки без необхідності хроматографічної очистки.

Будову та чистоту усіх сполук встановлено методами <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C та LC-MS (ESI), а також методом РСД (для кожного типу бісаміду).

1. Bräse S. et al. Organic Azides: An Exploding Diversity of a Unique Class of Compounds. - *Angew. Chem., Int. Ed.* - 2005. V. 44. - P. 5188-5240.

2. Scriven E. F. V. et al. Azides: their preparation and synthetic uses. - *Chem. Rev.* -1988. - V. 88. - P. 297-368.

## ФОРМУВАННЯ ПОЛІМЕРНИХ НАНОШАРІВ ІЗ СПЕЦІАЛЬНИМИ ВЛАСТИВОСТЯМИ НА ПОВЕРХНІ ПОЛІПРОПІЛЕНУ

*Цикунков С.С., Носова Н.Г., Самарик В.Я.*

Національний університет «Львівська політехніка», [erhii.tsykunkov.mkhtkhd.2024@lpnu.ua](mailto:erhii.tsykunkov.mkhtkhd.2024@lpnu.ua)

Надання нових поверхневих властивостей полімерним виробам є актуальним завданням багатьох галузей промисловості. Оскільки в результаті його вирішення суттєво розширюються області застосування промислових полімерних матеріалів завдяки поєднанню властивостей модифікованої поверхні та збереженню об'ємних властивостей полімеру. полімерних поверхонь. Полімерні матеріали загалом характеризуються низькою поверхневою енергією та відносно низькою реакційною здатністю. Яскравим представником таких полімерів є поліолефіни, зокрема поліпропілен. Розроблено цілий ряд методів модифікації цих матеріалів, які включають стадію пероксидації їх поверхні. За цими методами активацію поверхні проводять, головним чином, з використанням жорстких методів обробки (застосування сильних неорганічних окислювачів та озонування, опромінення високоенергетичними частинками, включаючи плазму, коронарні розряди, жорсткий ультрафіолет, електронно променеву радіацію).

В роботі представлено альтернативний шлях модифікації поверхні поліпропілену для надання йому нових властивостей. Спочатку проводиться пероксидація поверхні поліпропілену за рахунок прищеплення до неї пероксидовмісних олігомерів. За даним методом прищеплення ініціюється за рахунок часткового термолізу пероксидних груп зі складу поліпероксиду. Пероксидні групи, що залишаються після прищеплення цих олігомерів можуть бути використані для подальшої модифікації поверхні. Наступним етапом є прищеплення до поверхні декстрану, сульфат декстрану та гепарину до пероксидованої поверхні. Модифіковані цими речовинами поверхні можуть знайти використання при створенні приладів для забезпечення циркуляції крові та для отримання гемосумісних виробів та антибактеріальних полімерних матеріалів.

За методиками «прищеплення до» поверхні пероксидованого поліпропілену здійснювали модифікацію поверхні декстраном, декстран сульфатом, гепарином. Модифікацію підтверджено та досліджено за допомогою визначення крайових кутів змочування двома рідинami з наступним розрахунком складових вільної поверхневої енергії та еліпсометричним мапінгом рис.1.

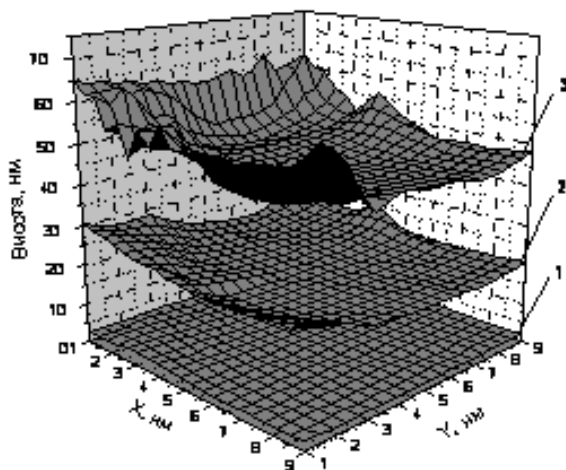


**Рис. 1.** Еліпсометричний аналіз прищепленого шару гепарину (3) до поверхні поліпропілену (1), який був модифікований шаром ПА-ОМА (2).

Визначено ступінь модифікації поверхні для всіх речовин. Встановлено, що найбільш ефективно модифікацію згідно запропонованого методу проведено для випадку модифікації пероксидованого поліпропілену гепарином та декстран сульфатом

Проведені дослідження показали можливість активації поверхні поліолефінів при використанні поліпероксидів з подальшою модифікацією пероксидованої поверхні та надання їй біосумісності та бактерицидних властивостей.

## ДИГІДРОАЗОЛОПІРИМІДИНИ: КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ ВИВЧЕННЯ ПРОЦЕСУ ОКИСНЕННЯ

*Шишкіна М.О., Десенко С.М.*

Інститут хімії функціональних матеріалів ДНУ

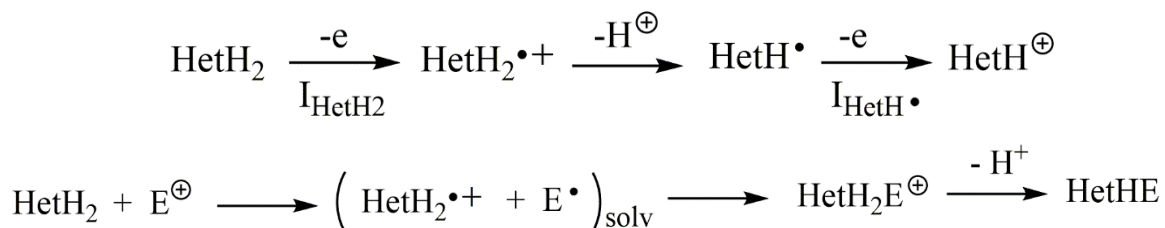
НТК «Інститут монокристалів» НАН України

[masha.o.shishkina@gmail.com](mailto:masha.o.shishkina@gmail.com)

Нітрогеновмісні гетероцикли присутні майже в 60% молекул, схвалених FDA США як ліки. Більшість із цих препаратів містять п'яти- або шестичленні нітрогеновмісні гетероцикли. Сполуки, що містять як ароматичні п'ятичленні, так і частково гідровані шестичленні гетероцикли, є дуже перспективними для пошуку нових біологічно активних молекул. Виходячи з цього, дигідроазолопіримідини представляють великий інтерес з фармацевтичної точки зору. Дійсно, похідні частково гідрованих азолопіримідинів мають дію на серцево-судинну систему, центральну нервову систему, антибактеріальну, протигрибкову, противірусну та протипухлинну дію.

Ненасиченість шестичленного циклу зумовлює здатність дигідроазолопіримідинів до окиснення (гетероароматизації) під дією різних окиснювачів [4, 6]. Механізм цього процесу включає послідовні етапи одноелектронного переходу від нейтральної молекули до електрофільного реагенту, депротонування катіон-радикала, одноелектронного переходу від радикала та депротонування катіону (схема 1) [1, 2]. Для дигідроазолопіримідинів також експериментально було виявлено підвищену здатність приймати участь в конкуруючій реакції електрофільного заміщення по атому Карбона (схема 2). Обидві конкуруючі реакції починаються з процесу одноелектронного переносу від молекули субстрата до електрофілу, але в реакції заміщення утворюється комплекс з повним або частковим переносом електрону, в якому відбувається подальше формування зв'язку С–Е.

Схема



Механізми конкуруючих реакцій дигідрогетероциклів з електрофілами.

Метою даної роботи є квантово-хімічне дослідження реакції окиснення 1,4-дигідропіридину, 1,4-дигідропіримідину та ряду дигідроазолопіримідинів з вузловим атомом азоту (Рис.). Дослідження включає аналіз впливу азольного кільця на електронну структуру вихідних молекул, ключових інтермедіатів (катіон-радикалів і радикалів) та потенціалів іонізації нейтральної молекули та радикалу як характеристик одноелектронного переносу.

Оптимізація нейтральних молекул та інтермедіатів була проведена методом B3LYP/сс-рVTZ. Для врахування впливу поляризаційного середовища на геометрію молекул використовувалась модель поляризаційного континууму (PCM) з водою як розчинником. Метод розрахунку було обрано на основі результатів нашого попереднього дослідження, яке вивчало вплив рівня теорії, базисного набору та методу моделювання поляризаційного середовища (вакуумне наближення, модель PCM або модель PCM з явною молекулою води) на потенціали іонізації нейтральної молекули та радикала під час окиснення частково гідрованих гетероциклів [3].



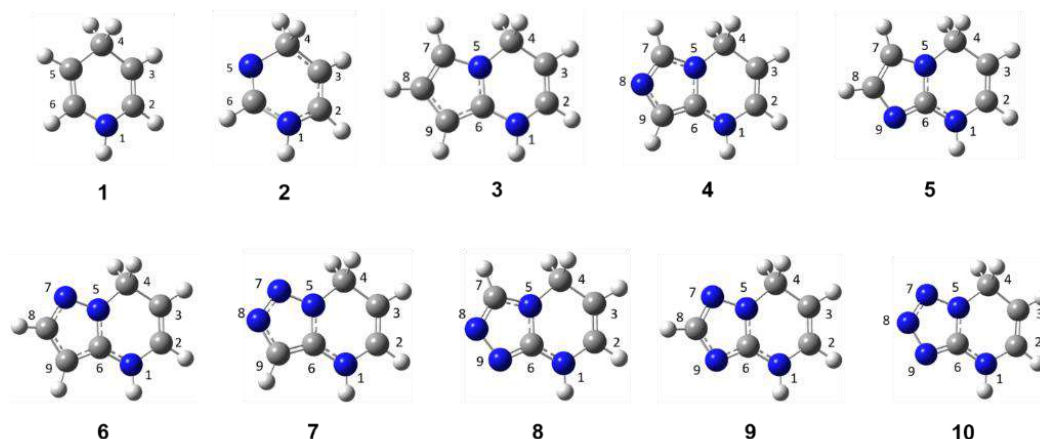


**Рис.** Досліджувані 1,4-дигідропіридин, 1,4-дигідропіримідин та ряд дигідроазолопіримідинів з вузловим атомом азоту.

Потенціали іонізації нейтральних молекул ( $I_{\text{HetH}_2}$ ) розраховували як різницю енергій між катіон-радикалом  $\text{HetH}_2^{\bullet+}$  і вихідною молекулою, тоді як потенціали іонізації радикалів ( $I_{\text{HetH}^\bullet}$ ) розраховували як різницю енергій між  $\text{HetH}^+$  і  $\text{HetH}^\bullet$ .

Дослідження електронної структури молекул показало, що азольний цикл впливає на дигідропіримідиновий фрагмент як С-азолільний замісник у нейтральних молекулах. Ступінь супряження між неподіленою парою Нітрогена і азольною  $\pi$ -системою корелює зі ступенем електронодефіцитності ароматичного азольного кільця. У відповідних радикалах азольний цикл впливає одночасно як С-азолільний і N-азолільний замісник. Вплив азольного циклу в катіон-радикалах є найбільш значущим і призводить до суттєвої перебудови електронної структури. Як результат, для дигідроазолопіримідинів виявлено значний дефект Купманса.

Моделювання процесів відриву електрона як ключових етапів реакції окиснення в 1,4-дигідропіридині, 1,4-дигідропіримідині та дигідроазолопіримідинах показало, що спільною властивістю всіх молекул є більше значення  $I(\text{HetH}_2)$ , ніж  $I(\text{HetH}^\bullet)$ . Проте у дигідроазолопіримідинах спостерігається значне зближення потенціалів іонізації  $I(\text{HetH}_2)$  та  $I(\text{HetH}^\bullet)$  порівняно з дигідроазіновими циклами. Цей факт може пояснити конкуренцію реакцій гетероароматизації та електрофільного заміщення під впливом окислювального реагенту, властиву похідним дигідроазолопіримідину.

Отримані дані дозволяють припустити, що дигідроазолопіримідини слід розглядати як відносно самостійний тип частково гідрованих сполук. Це проявляється в їх реакційній здатності, особливо в тих випадках, коли механізм реакції включає процес одноелектронного переносу на першій стадії.

1. Chebanov V.A., Desenko S.M., Gurley T.W. Azaheterocycles Based on  $\alpha,\beta$ -Unsaturated Carbonyls. - *Springer-Verlag Berlin, Heidelberg* – 2008.

2. Arguello J., Núñez-Vergara L.J., Sturm J.C., Squella J.A. Voltammetric oxidation of Hantzsch 1,4-dihydropyrimidines in protic media: substituent effect on positions 3, 4, 5 of the heterocyclic ring. - *Electrochim. Acta* – 2004. – V.49. – P.4849-4856.

3. Shyshkina M.O., Desenko S.M. Oxidation process of 1,4-dihydropyridine, 1,4-dihydropyrimidine and pyrrolo-1,4-dihydropyrimidine: quantum chemical study. - *Struct. Chem.* – 2024. – V.35. – P.993 –1002.



# КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСУ ОКИСНЕННЯ ДИГІДРОАЗОЛОПІРИДИНІВ

*Шишкіна М.О., Десенко С.М.*

Інститут хімії функціональних матеріалів ДНУ

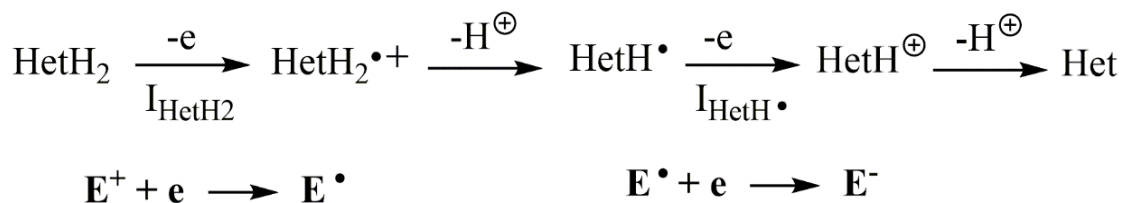
НТК «Інститут монокристалів» НАН України

[masha.o.shishkina@gmail.com](mailto:masha.o.shishkina@gmail.com)

Одним із сучасних напрямів пошуку нових біологічно активних сполук є синтез і дослідження гібридних молекул, що містять два і більше фармакофорних фрагментів із відомою біологічною активністю. Така гібридна сполука може проявляти активність «батьківських» фармакофорних фрагментів або нову активність. Аннелювання 1,4-дигідропіридинового циклу азольним циклом (піролом, піразолом, імідазолом або 1,2,3-тріазолом) може бути використано для створення нових біологічно активних молекул, оскільки і 1,4-дигідропіридиновий фрагмент, і азольні цикли входять до складу багатьох молекул, які використовуються як ліки.

Дигідроазини беруть участь у клітинній біоенергетиці ( $\text{НАДН} \rightarrow \text{НАД}^+$ ) і здатні до окиснення (гетероароматизації) у присутності окислювальних реагентів, у тому числі кисню повітря. Механізм процесу окиснення вивчений як експериментальними, так і квантово-хімічними методами і описується як чотиристадійний процес, де першою і третьою стадією є процеси одноелектронного переносу, а другою і четвертою стадіями є депротонування (схема 1).

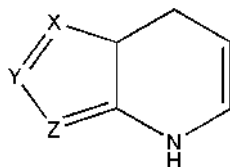
Схема 1



Окиснення дигідрогетероциклу згідно [1, 2], де  $\text{E}^+$  є електрофільним (окислювальним) агентом.

Метою даної роботи є квантово-хімічне дослідження реакції окиснення ряду дигідроазолопіридинів (схема 2), включаючи аналіз електронної структури вихідних молекул і радикалів як ключових інтермедіатів та порівняння потенціалів іонізації як основних характеристик процесів одноелектронного переносу.

Схема 2



X, Y, Z = CH, NH, N

Загальна схема досліджуваних дигідроазолопіридинів.

Квантово-хімічні розрахунки проведені методом B3LYP/cc-pVTZ з використанням моделі поляризаційного континууму (PCM) з водою як розчинником. Метод розрахунку було обрано на основі результатів нашого попереднього дослідження, яке вивчало вплив рівня теорії, базисного набору та методу моделювання поляризаційного середовища (вакуумне наближення, модель PCM або модель PCM з явною молекулою води) на потенціали іонізації

нейтральної молекули та радикала під час окиснення частково гідрогенізованих гетероциклів [3].

Потенціали іонізації нейтральних молекул і радикалів оцінювали згідно з теоремою Купманса як  $I_K(\text{HetH}_2) = -E_{\text{НОМО}}$  для нейтральної молекули і  $I_K(\text{HetH}\bullet) = -E_{\text{СОМО}}$  для радикала. Для врахування перерозподілу електронної густини в молекулі внаслідок відриву електрона також розраховували потенціали іонізації як різницю енергій між початковою та фінальною молекулами відповідних процесів переносу електрона ( $I_{\text{HetH}_2}$  та  $I_{\text{HetH}\bullet}$ ).

Вивчення електронної структури нейтральних молекул ( $\text{HetH}_2$ ) показало, що азольний цикл впливає на дигідропіридиновий фрагмент як азолільний замісник при атомі вуглецю, найближчому до атома азоту дигідропіридину. Ступінь супряження між неподіленою парою електронів Нітрогену і азольною  $\pi$ -системою корелює з кількістю атомів Нітрогена та положенням пірролоподібного атома Нітрогена в ароматичному циклі. В радикалах ( $\text{HetH}\bullet$ ) азольний цикл діє як азолільний замісник одночасно при двох вузлових атомах Карбону, що призводить до конкуренції між двома типами ефектів супряження: супряження між ароматичною  $\pi$ -системою та дигідропіридиновим атомом Нітрогену та супряження між ароматичною  $\pi$ -системою та радикальним центром при атомі С4. Супряження обох типів є сильнішим у випадку найближчого розташування пірролоподібного атома азоту до відповідних атомів частково гідрованого циклу.

Аналіз потенціалів іонізації двох процесів відриву електрона (потенціалів Купманса  $I_K(\text{HetH}_2)$  і  $I_K(\text{HetH}\bullet)$  і розрахованих  $I(\text{HetH}_2)$  і  $I(\text{HetH}\bullet)$ ) показав, що спільною властивістю всіх досліджуваних молекул є більш високе значення потенціалу іонізації нейтральної молекули порівняно з потенціалом іонізації радикального інтермедіату. Значення дефектів Купманса також дещо вищі в нейтральних молекулах порівняно з радикалами і дуже близькі у всіх досліджуваних молекулах.

Значення потенціалів іонізації залежать від кількості, природи і положення атомів Нітрогена в азольному циклі. Збільшення кількості атомів Нітрогена призводить до зростання потенціалів іонізації. В нейтральних молекулах більш високі потенціали іонізації виявляються, коли пірролоподібний атом Нітрогена азольного циклу розташований у положенні, найближчому до дигідропіридинового атома Нітрогена. В радикалах  $\text{HetH}\bullet$  з одним атомом Нітрогену в азольному циклі спостерігається та ж тенденція. Радикали  $\text{HetH}\bullet$ , що містять піразольний або триазольний цикл, мають вищі потенціали іонізації, коли група NH рівновіддалена від атомів частково гідрованого циклу, що забезпечує баланс між двома конкуруючими типами супряження.

Аналізуючи отримані дані, можна припустити дуже подібну реакційну здатність дигіроазолопіридинів і дигідроазинів в реакціях з електрофільними/окислюючими реагентами.

1. Chebanov V.A., Desenko S.M., Gurley T.W. Azaheterocycles Based on  $\alpha,\beta$ -Unsaturated Carbonyls. - *Springer-Verlag Berlin, Heidelberg* – 2008.

2. Arguello J., Núñez-Vergara L.J., Sturm J.C., Squella J.A. Voltammetric oxidation of Hantzsch 1,4-dihydropyrimidines in protic media: substituent effect on positions 3, 4, 5 of the heterocyclic ring. - *Electrochim. Acta* – 2004. – V.49. – P.4849-4856.

3. Shyshkina M.O., Desenko S.M. Oxidation process of 1,4-dihydropyridine, 1,4-dihydropyrimidine and pyrrolo-1,4-dihydropyrimidine: quantum chemical study. - *Struct. Chem.* – 2024. – V.35. – P.993 –1002.

## ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНІ ТА БІОСУМІСНІ ІОННІ РІДИНИ. ФУНКЦІОНАЛІЗАЦІЯ ТА ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ

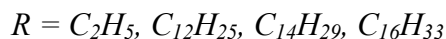
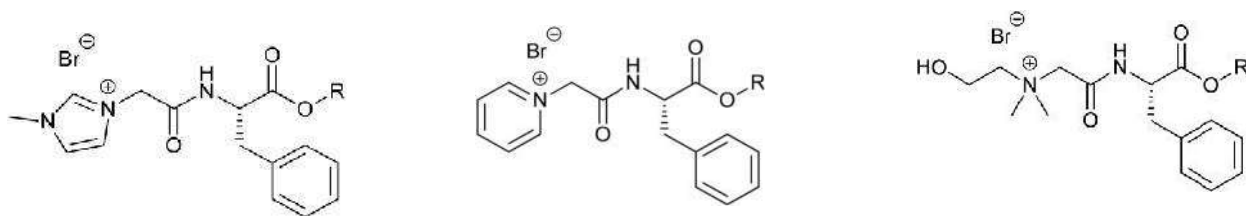
*Шумейко О.Є., Карпічев Є.А., Бураков М.І.*

Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАН України,  
[ashumeiko@ukr.net](mailto:ashumeiko@ukr.net)

Іонні рідини все частіше розглядаються як важлива складова «зеленої хімії» через їх специфічні властивості в якості розчинників з низькою токсичністю, а також можливості їх синтезу з поновлюваних ресурсів. Унікальні властивості поверхнево-активних іонних рідин, зокрема, аномально низька температура плавлення і / або низька температура Крафта, забезпечують очевидну перевагу таких поверхнево-активних речовин і сприяють зростанню інтересу до їх синтезу і вивченню [1].

Різні катіонні групи включали ядра піридинію, імідазолію і холінію, що дозволило провести всебічний аналіз впливу ланцюжка алкілових естерів (від  $C_2$  до  $C_{16}$ ) на синтез, токсичність, здатність до біологічного розкладання та інші властивості нових поверхнево-активних іонних рідин.

Проведена робота по синтезу нових поверхнево-активних іонних рідин на основі L-фенілаланіну з використанням піридину, диметилетаноламіну і 1-метилімідазолу.



Перший етап включав в себе етерифікацію L-фенілаланіну аліфатичними спиртами з використанням п-толуолсульфонової кислоти, як каталізатора. Наступною стадією було алкілювання складних естерів бромацетилбромідом з утворенням відповідних алкілюючих реагентів. Останній етап включав алкілювання піридину, диметилетаноламіну і 1-метилімідазолу для отримання відповідних поверхнево-активних іонних рідин. Молекулярні структури отриманих продуктів і їх високий ступінь чистоти були підтверджені даними  $^1H$  ЯМР -спектроскопії [2].

Досліджено антибактеріальні ефекти *in vitro* іонних рідин на основі лінійних алкільних естерів фенілаланіну. Отримані результати демонструють широкий спектр бактеріальної токсичності для досліджених сполук. Самі фенілаланінові складні естери не демонструють токсичність по відношенню до грамнегативних бактерій, а для іонних рідин спостерігається чітка тенденція до збільшення токсичності при подовженні алкільного ланцюга аж до певної його довжини, незалежно від катіону. Грампозитивні штами бактерій зазвичай демонструють більш високу чутливість до довжини ланцюга, ніж грамнегативні штами. Іонні рідини з довжиною ланцюга не нижче децила, знаходяться в тій області мікробної токсичності, де ліпофільність, розчинність і, отже, біодоступність знаходяться на максимумі, тому тут спостерігаються найвищі рівні бактеріальної токсичності [3].

Отримані результати можуть сприяти розробці нових ефективних амфіфілів з оптимізованою антимікробною активністю, здатних біологічно руйнуватися, які можуть використатися в якості розчинників, що мають високий потенціал рециркуляції, низьку токсичність і можливість синтезу з поновлюваних ресурсів. Це проливає світло на нові підходи до створення екологічно безпечних іонних рідин та функціоналізованих поверхнево-активних речовин [4].

1. Morten S., Haiß A., Westphal J., Jordan A., Kellett A., Kapitanov I., Karpichev Y., Gathergood N., Kümmerer K. Design rules for environmental biodegradability of phenylalanine alkyl ester linked ionic liquids for green chemistry. - *Green Chemistry*. – 2020. – Vol. 22. – P. 4498–4508.
2. Dewi K., Kusumahastuti A., Sihtmäe M., Kapitanov I., Karpichev Ye., Gathergood N., Kahru A. Toxicity profiling of 24 L-Phenylalanine Derived Ionic Liquids based on pyridinium, imidazolium and cholinium cations and varying alkyl chains using rapid screening *Vibrio fischeri* bioassay. - *Ecotoxicology and Environmental Safety*. - 2019. – Vol. 172. – P. 556–565.
3. Raba G., Kapitanov I., Špulák M., Vilu R., Gathergood N., Karpichev Y. Design of sustainable ionic liquids based on L-phenylalanine and L-alanine dipeptides: synthesis, toxicity and biodegradation studies. - *Journal of Molecular Liquids*. – 2023. – Vol. 374. – 121285.
4. Popov A., Kapitanov I., Serdyuk A., Shumeiko A. Reactivity of nucleophiles and  $\alpha$ -effect in substitution processes at electron - deficiency centers. – *Ukr. Chem. J.* – 2020. – Vol 86. – N 8. – P. 77-100.

# **АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ ХІМІЧНОЇ ОСВІТИ**

# ОСВІТНЯ ОНЛАЙН-ПЛАТФОРМА EDUCAPLAY ЯК ЕФЕКТИВНИЙ ІНСТРУМЕНТ ІНТЕРАКТИВНОГО НАВЧАННЯ З ІГРОВИТИ ЕЛЕМЕНТАМИ

Бондарчук Т.О.

Пісківський ліцей Станишівської сільської ради, [ezevikaa@meta.ua](mailto:ezevikaa@meta.ua)

Сучасний урок складно уявити без інтерактивних та ігрових форм роботи, бо вони здатні посилити інтерес учнів до навчання. Ігрові методи створюють доброзичливу атмосферу в класі, активізують увагу школярів та сприяють легшому сприйняттю складного матеріалу. Вони здатні розвивати креативність, критичне мислення та навички спілкування у дітей. Інтерактивні вправи вмотивовують учнів до спільної роботи, дають змогу кожному відчути себе успішним та залученим у спільну діяльність. Окрім того, завдяки грі діти можуть краще сприймати і запам'ятовувати нову важливу інформацію, так як навчання перетворюється на цікавий і активний процес. Тож, застосування інтерактивних та ігрових форм роботи на уроці є важливим та ефективним засобом для формування компетентностей і розвитку особистості учнів.

Educaplay - це онлайн-платформа для створення інтерактивних освітніх матеріалів. За допомогою нею можливо створювати велику різноманітність вправ та навчальних ігор, що сприяють засвоєнню нової інформації та узагальненню знань. Вчитель може створювати навчальні вправи у цікавій формі. За допомогою даного сервісу можливо створювати вправи у такому форматі: вікторини та тести, пазли та кросворди, асоціації, заповнення пропусків у тексті, аудіозавдання, вправи з зображеннями, хмари слів та інші. [1]

Онлайн-платформа Educaplay була створена іспанською компанією ADR Formacion у 2010 році. ADR Formacion профілюється на розробці програм та сервісів для e-learning та дистанційної освіти. Основною метою створення Educaplay можливість отримання зручного інструменту для будування інтерактивних навчальних ігор та вправ, що можна використовувати у навчальному процесі, а також можливість вчителям, репетиторам, тренерам зробити урок активним та інтерактивним для учнів. Учні можуть самостійно виконувати вправи та бачити свої помилки та правильні відповіді. Наразі Educaplay використовується по всьому світу, що робить платформу доступною для широкої аудиторії, включаючи користувачів з України.

Завдання можна використовувати на уроках, тренінгах, онлайн-курсах. В ході виконання завдання дитина одразу може побачити помилку або ж після виконання роботи, все залежить від виду завдання. Можлива інтеграція платформи з Moodle, Google Classroom та іншими. На платформі є бібліотека готових вправ, а також можливість створювати вправи власноруч з допомогою можливостей штучного інтелекту, що полегшує роботу вчителя. Також є можливість використати завдання, створені іншими людьми та адаптувати їх під власні потреби. Інтерфейс доступний багатьма мовами, в тому числі і українською. Можна користуватися і на ПК і на мобільному пристрої. Доступна і базова (безкоштовна) версія, так і преміум-підписка, що забезпечує додаткові можливості. [2]

Отже, онлайн-платформа Educaplay є дієвим інструментом у навчально-виховному процесі, що активізує учня та забезпечує інтерактив на занятті, а також гейміфікує його.

1. Мельник Ю. В. Використання інтерактивних платформ для організації дистанційного навчання // *Інформаційні технології і засоби навчання*. - 2021. - № 3. - С. 45–53. - Режим доступу: <https://journal.iitta.gov.ua/>

2. Мої ігри. Educaplay. Мої ігри. Режим доступу: [https://www.educaplay.com/user/12103639-learning\\_resource/](https://www.educaplay.com/user/12103639-learning_resource/) (дата звернення: 16.03.2025).



# ЕФЕКТИВНЕ ВИКОРИСТАННЯ ІННОВАЦІЙНИХ ПЕДАГОГІЧНИХ ТЕХНОЛОГІЙ ПРИ ФОРМУВАННІ У ЗДОБУВАЧІВ ОСВІТИ КЛЮЧОВИХ КОМПЕТЕНТОСТЕЙ ПРИ ВИВЧЕННІ ХІМІЇ

*Мартинюк Г.В.<sup>1</sup>, Мартинюк І.В.<sup>2</sup>, Гакало О.І.<sup>3</sup>, Лапкевич Г.М.<sup>4</sup>*

<sup>1</sup>Рівненський державний гуманітарний університет, [galmart@ukr.net](mailto:galmart@ukr.net)

<sup>2</sup>Рівненський ліцей «Лідер»,

<sup>3</sup>ВСП «Рівненський технічний фаховий коледж НУВГП»,

<sup>4</sup>Добросинський ЗЗСО І-ІІІ ступеня, Львівська обл..

Хімія є найцікавішим предметом у навчальних закладах, оскільки допомагає здобувачам освіти зрозуміти навколишній світ, формує їх науковий світогляд. Позаяк, хімія також є досить складною та вимогливою наукою, яка потребує логічного мислення, системних знань, спостережливості та експериментальних навичок. Як відомо не всі учні можуть засвоювати великий обсяг матеріалу в одному темпі і в однаковий спосіб. Тому дуже важливо організувати навчальний процес так, щоб кожна дитина отримувала власний навчальний досвід та достатню мотивацію до навчання. Дітям має бути цікаво і легко працювати.

Мета навчання хімії залишається незмінною, а саме: формування в учнів ключових та предметних компетентностей, в результаті яких здобувачі освіти володітимуть не лише відмінними знаннями, а й умінням їх застосовувати у нестандартних ситуаціях.

Впровадження в життя нових інноваційних педагогічних технологій дають змогу вчителю реалізувати особистісний підхід до кожного свого вихованця, розвивати його творчий потенціал, сприяти формуванню ключових компетентностей для успішної адаптації в умовах сьогодення, дозволить вирішити основне завдання сучасної освіти – навчити сучасну молоду людину вчитися самостійно [1].

Основою розвитку ключових компетентностей, з метою підвищення ефективності навчання мають стати такі інноваційні педагогічні технології, які сприяють розвитку пізнавального інтересу, творчих здібностей, самостійності та критичного мислення здобувачів освіти [2].

По відношенню до навчального предмету хімія можна виділити основні інноваційні педагогічні технології а саме: ігрові, проектного навчання; інтерактивні, інформаційно-комунікаційні технології; технологія критичного мислення.

Самою простою і відомою при вивченні хімії є ігрова технологія, яку найчастіше застосовують для учнів 7-8 класів. Назви та форми її різноманітні і залежать від творчого потенціалу вчителя. Для молодших класів це: хімічні ігри, Казки та кросворди на тему «Знайди помилку», «Подорож до майбутнього», «Детективне розслідування». Для здобувачів освіти 9-11 класів прикладом ігрових технологій можна використати екологічну експедицію у промислові хімічні підприємства, ситуативні завдання, ділові ігри та інші форми, які дозволяють підвищити інтерес до вивчення хімії, розвивають їх ініціативу та проявити їх винахідливість, та кмітливість.

Наступною технологією можна вважати **проектну технологію**, що передбачає розробку здобувачами освіти самостійних дослідницьких робіт на основі планування дій, збору та аналізу необхідної інформації, презентації результатів за допомогою технічних засобів та інформаційних технологій. Прикладом таких технологій є використання навчальних проектів під назвою «Що ми знаємо про мінеральні добрива», «Мило своїми руками» конкурс «Загадкові хмаринки слів».

**Інтерактивна технологія** забезпечує активну взаємодію усіх учасників навчального процесу на основі діалогу, дискусії та обміну думками, яку можна використати на різних етапах уроків. Особливо хочеться виділити етап підведення підсумків уроку у вигляді підсумкової рефлексії тобто оцінювання з коментуванням. Використовуючи метод «мікрофон» здобувачі освіти відповідають на запитання, поставлені вчителем заздалегідь. За використання методу Квінтіліана, який полягає у постановці запитань, які розпочинаються

словами «Хто? Що? Коли? Навіщо? Де? Як?». Відповіді на ці запитання дозволять учителю оцінити ефективність засвоєння інформації учнями. Використання інтерактивних технологій допомагає виробити в школярів здатність вести дискусію, працювати в команді, відстоювати свою власну думку, а також приймати колективні рішення.

**Інформаційно – комунікаційна технологія** без якої не можна уявити сучасний урок або підготовку до нього. Щодо хімії то за допомогою мультимедійних презентацій чи віртуальних лабораторій можна урізноманітнити процес навчання хімії. Віртуальні хімічні лабораторії дозволяють проводити хімічні досліди, моделювати різноманітні хіміко-технологічні процеси, які в реальних умовах провести важко і небезпечно.

Досить вдалим і поширеним є використання на уроці «хмари» слів, що виконують роль опорного конспекту. Навіть старшокласникам варто запропонувати скласти творчу роботу з використанням якомога більше слів із «хмари», створивши цікаву головоломку. Ця технологія також сприяє формуванню інформаційної культури, цифрової грамотності та самоорганізації здобувачів освіти на всіх етапах уроків.

**Технологія критичного мислення** заснована на творчій співпраці між здобувачами освіти та вчителями, на розвитку у них аналітичного й творчого підходів до вивчення будь-якого матеріалу. Ця методика дозволяє залучити вихованців до власних досліджень, обговорення і відстоювання своїх думок при розв'язанні поставлених завдань. За таких умов здобувачі освіти стають активними учасниками навчального процесу, в них формується самостійність і творчість, помітно посилюється бажання розширити та поглибити знання. Прикладом є завдання написати твір-п'ятихвилинку на теми: «Якби не було б хімії», «Чи вірите ви, що без нітратів», «Людина не може обійтися без металів...», що дозволить школярам виробити свої власні судження та думки, а також вміння їх відстоювати в дискусії.

Вдале використання здобувачами освіти інноваційних технологій на уроці, суттєво підвищує їх інтерес до вивчення хімії, посилює прагнення до самостійного навчання та спонукає до творчості. Під час таких уроків однокласники стають друзями, навчившись слухати, досягати згоди та домовлятися [3].

Підсумовуючи можна сказати, що за допомогою елементів інноваційних технологій на уроках вчитель намагається підвищити інтерес здобувачів освіти учнів до вивчення хімії. Досить вдалим є висловлення Маргарет Тетчер, яке можна використати як учням, так і вчителям в якості побажання «Єдиний спосіб піднятися на вершину драбини – долати сходинку за сходинкою, по одній за раз. І в процесі цього підйому ви раптом виявите у себе всі необхідні якості, навички і вміння, потрібні для досягнення успіху, якими ви, начебто, ніколи не володіли».

1. Савченко О. Ключові компетентності – інноваційний результат шкільної освіти. – *Рідна школа*. – 2011. – Т.8–9. – С.4–8.

2. К.А. Дмитренко, М.В. Коновалова, О.П. Семиволос, С.В. Бекетова. Звичайні форми роботи – новий підхід: розвиваємо ключові компетентності: метод. посіб. – Х.: ВГ Основа. – 2018. – 119 с.

3. Баханов К. Інноваційні системи, технології та моделі навчання в школі: Монографія. – Запоріжжя: Просвіта – 2000. – 160 с.

## ДОСВІД ВПРОВАДЖЕННЯ ДИСЦИПЛІНИ «ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ ВОДНИХ І НЕВОДНИХ РОЗЧИНІВ» У НАВЧАЛЬНИЙ ПРОЦЕС ЗДОБУВАЧІВ-ХІМІКІВ

*Перлова О.В., Солдаткіна Л.М.*

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, [olga\\_perlova@onu.edu.ua](mailto:olga_perlova@onu.edu.ua)

Протягом останніх п'яти років на факультеті хімії та фармації ОНУ імені І.І. Мечникова для здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти 1 року навчання спеціальності 102 Хімія (ОПП Хімія) у 2 семестрі викладається обов'язкова дисципліна «Теоретичні основи водних і неводних розчинів» обсягом 3 кредити ЄКТС.

Введення цієї навчальної дисципліни у навчальний процес обумовлений великою роллю, яку відіграють розчини у природі, побуті, сільському господарстві, науці (зокрема, у медицині, фармації, біології) та техніці. Хімія розчинів є теоретичною основою гідрометалургії, галургії, аналітичної хімії. Виробництва, в основі яких лежать хімічні процеси, зазвичай пов'язані з розчинами; великотоннажні синтези в хімічній промисловості здійснюються, як правило, у розчинах. Впровадження даної навчальної дисципліни обумовлено необхідністю формування у здобувачів системних знань з даного розділу хімії, оскільки саме оволодіння системними знаннями складає основу для формування у здобувачів хімічного стилю мислення.

Мета даної роботи – проаналізувати досвід викладання дисципліни «Теоретичні основи водних і неводних розчинів» у підготовці здобувачів за спеціальністю 102 Хімія, висвітлити її роль у формуванні фундаментальних знань про властивості розчинів, методи їх дослідження та практичне застосування.

Ця дисципліна базується на первинних знаннях, одержаних при вивченні теми «Розчини» в курсі загальної хімії у 1 семестрі, не дублює, а поглиблює та розширює одержані знання. Знання теоретичних основ водних і неводних розчинів знадобляться здобувачам на старших курсах при вивченні базових загальнохімічних дисциплін – аналітичної, органічної, фізичної хімії тощо. Наприклад, саме при вивченні цієї дисципліни здобувачі дізнаються про різноманітні теорії розчинів, знайомляться з кислотами та основами Бренстеда, Льюїса та Усановича, учаться розрізняти жорсткі та м'які кислоти та основи, диференціюючи та нівелюючи розчинники, опановують особливості термодинаміки та кінетики процесу розчинення, основи рідинної екстракції.

Дисципліна викладається у формі лекцій і практичних занять; необхідною складовою є самостійна робота здобувачів. Практичні заняття відіграють ключову роль у курсі, оскільки сприяють поглибленню теоретичних знань, здобутих на лекціях, та підвищенню рівня засвоєння матеріалу. Вони дають здобувачам можливість перевірити свої знання через відповіді на контрольні питання, тестування, розв'язання задач та тренувальних вправ [1-2], що позитивно впливає на якість освіти.

Після опанування навчальної дисципліни здобувач навчається встановлювати взаємозв'язок поведінки розчиненої речовини та розчинника у розчинах та обирати розчинник для проведення хімічних реакцій і фізико-хімічних процесів, одержує знання про різні класифікації та найважливіші властивості розчинників; роль взаємодій між частинками у фізико-хімічних процесах у розчинах; особливості практичного використання неводних розчинників та проблеми, які виникають при цьому.

1. Теоретичні основи водних і неводних розчинів [Електронний ресурс] : метод. вказівки до практ. занять для студентів ф-ту хімії та фармації спец. 102 «Хімія», 014 «Середня освіта (Хімія)» / О. В. Перлова, Л. М. Солдаткіна; ОНУ ім. І. І. Мечникова, Ф-т хімії та фармації. – Електрон. кн. – Одеса : Одеський нац. ун-т, 2022. – 60 с.

2. Теоретичні основи водних і неводних розчинів. Частина 2. [Електронний ресурс] : електрон. метод. вказівки до практ. занять для здобувачів вищ. освіти ф-ту хімії та фармації спец. 102 «Хімія» / уклад.: О. В. Перлова, Л. М. Солдаткіна. – Одеса : Одес. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова, 2023. – 55 с.

## МЕТОДИ ЕФЕКТИВНОГО КОНСПЕКТУВАННЯ НА ЗАНЯТТЯХ МЕДИЧНОЇ ТА БІОЛОГІЧНОЇ ХІМІЇ

Пилипенко О.О.

Донецький національний медичний університет, [Pilipenkoolena1@gmail.com](mailto:Pilipenkoolena1@gmail.com)

Конспект, який створює здобувач освіти під час лекції чи практичного заняття з медичної хімії чи біологічної хімії, повинен сприяти як засвоєнню викладеного матеріалу, так і закріпленню знань в довготривалій пам'яті. Вміння правильно конспектувати – це незамінна навичка, яка буде корисною і за межами навчальної аудиторії. Вміння занотовувати потрібну інформацію підвищує концентрацію та покращує здатність запам'ятовувати, доречно використовувати записи в майбутньому. Спосіб, у який конспектується матеріал, може суттєво вплинути на розуміння та сприйняття інформації.

Окрім звичного конспектування лекцій, з презентацій чи схем, що зображає лектор, на заняттях з медичної хімії та біологічної хімії використовується три основні методи ведення нотаток.

*Метод речень*, який є найбільш схожим до класичного конспектування, покликаний чітко виокремлювати головне та фіксувати кожну думку одним реченням[1]. Основний принцип такого конспектування полягає в тому, щоб кожне записане речення, що передає головну ідею певного поняття, записувати з нового рядка та присвоювати порядковий номер. Таким чином при перегляді нотаток згодом, здобувач швидше орієнтується в пошуку необхідної інформації. А для встановлення логічно-наслідкових зв'язків можна скомбінувати номери для чіткого порядку відтворення. Такий метод підходить, в тому випадку, якщо лекція містить багато теоретичного матеріалу і потрібно при мінімумі записів охопити максимум інформації. Для швидкого орієнтування в таких конспектах рекомендується виділяти підтеми кольорами.

Часто на лекціях з біологічної хімії пропонується здобувачам освіти створювати конспект за *методом Корнелла*. Такий конспект передбачає поділ аркуша на три основні зони, дає змогу здобувачу освіти аналізувати та узагальнювати почутий матеріал, одразу на лекції[1,2]. Основна частина – це найбільша колонка справа (охоплює дві третини сторінки), в ній записується коротко необхідна інформація з лекції. При нотуванні між реченнями рекомендується залишати місце, щоб дозаповнити необхідний чи пропущений матеріал вдома. Друга частина – ліва колонка, що займає одну третю аркуша, необхідна для важливих понять, ключових термінів, хімічних формул чи схем перетворень, логічних послідовностей. Цю колонку заповнюють здобувачі наприкінці лекції. Таким чином, формується вміння швидко зорієнтуватися в матеріалі, зосереджуючись на головному.

І третя зона аркуша, під час конспектування за методом Корнелла, дає змогу записати короткий підсумок за темою лекції. Ця частина знаходиться внизу аркуша, під двома основними зонами. Цю частину здобувач заповнює самостійно або після лекції одразу або ж протягом доби, після заняття. Такий спосіб конспектування допомагає краще засвоїти матеріал, осмислити основні поняття та запам'ятати потрібні терміни та формули, а також швидше віднайти та повторити матеріал перед підсумковим контролем.

*Метод ментальних карт або Mind Mapping* передбачає створення візуалізованих, схематичних конспектів [2,3]. Такий підхід доречно використовується не тільки під час деяких лекцій з медичної хімії, біологічної хімії, а й під час практичних занять з даних освітніх компонентів. Таке структурування матеріалу дозволяє вдало відображати зв'язки між окремими поняттями, процесами, перетвореннями. Для створення такого конспекту в центрі аркуша записується ключове поняття (формула сполуки, назва ферменту чи метаболічного процесу) і від нього відходять стрілки («гілки»), що позначають певну характеристику, аспект чи факт. Кожна «гілка» може мати свої відгалуження, що відображають певні деталі, ідеї чи фактори, особливі умови, які вимагає даний процес чи поняття центрального елемента. Таким чином легко вибудовуються взаємозв'язки та структурованість між окремими компонентами. Такий метод підходить для тих тем, де

пов'язано багато структурних компонентів або проміжних продуктів, метаболічних перетворень та схем. Використання ментальних карт допомагає детально показати взаємозв'язок між окремими сполуками та їх логічне перетворення, наприклад цикл Кребса, орнітиновий цикл або ж загальні схеми метаболізму ліпідів, вуглеводів, білків.

Таким чином, вдало підібраний спосіб конспектування інформації забезпечує результативне запам'ятовування матеріалу. Важливо, навчити здобувачів освіти використовувати дані методи, пояснити принципи їх застосування, вміння виділяти та структурувати матеріал лекції чи практичного заняття.

1. Методи ефективного конспектування *Всеосвіта* URL: <https://vseosvita.ua/c/pedagogy/post/38993> (дата звернення: 03.03.2025)

2. Ефективні навчальні стратегії: Конспектування. Частина 1. *Освіта Нова*. URL: <https://osvitanova.com.ua/posts/4594-efektyvni-navchalni-stratehii-konspektuvanniachastyna-1> (дата звернення: 05.03.2025)

3. Ефективне конспектування: 3 методи нотування інформації. *Освітні практики від IT: навчай сміливо*. URL: [https://t.me/navchai\\_smilyvo/319?single](https://t.me/navchai_smilyvo/319?single) (дата звернення 05.03.2025)

## ЗАСТОСУВАННЯ ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ ГРИ «WORDLE» ПРИ ВИВЧЕННІ ХІМІЧНОЇ ТЕРМІНОЛОГІЇ

*Ткач В.В.<sup>1</sup>, Кушнір М.<sup>2</sup>, Підлубна С.І.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, [nightwatcher2401@gmail.com](mailto:nightwatcher2401@gmail.com)

<sup>2</sup> Чернівецький міський ліцей №5 «Оріяна», Україна

Покращення мотивації вивчення хімії учнями середніх шкіл вимагає пошуку балансу у класичній тріаді вчіння-гра-праця. І хоча праця та вчіння все ж залишаються найважливішими, гра теж виконує свою фундаментальну роль у шкільному навчанні. Покращення засвоєння матеріалу через гейміфікацію – закріплення цієї фундаментальної ролі та її спрямування в руслі праці та вчіння.

Однією із класних та позакласних форм засвоєння хімічного матеріалу є адаптація ігор. Ці ігри можуть бути як початково неінтелектуальними (приклад – доміно із хімічних реакцій та похідне від нього поліміно із схем хімічних перетворень або хрестики-нулики із сполук конкретних елементів), так і інтелектуальними. Одним із цікавих випадків інтелектуальних ігор на засвоєння хімічних термінів є ігри на вгадування слів – класична шибениця та wordle (словко).

Оригінальна гра у Wordle була вперше розроблена редакцією онлайн-сторінки газети New York Times і пролягала у тому, щоб читачі вгадали із шести спроб слово на п'ять літер. При цьому вгадана літера відзначалася зеленим, якщо вона знаходилася на вірному місці і жовтим, якщо вона була в слові, але на невірному місці. Наприклад, якщо загадане слово «Реній», партія у Wordle могла б виглядати наступним чином:

|   |   |   |   |   |
|---|---|---|---|---|
| А | У | Д | І | О |
| Т | О | Р | І | Й |
| Ц | Е | Р | І | Й |
| Р | Е | Н | І | Й |

У показаному прикладі слово «Реній» вказано з четвертої спроби із шести можливих.

Пізніше Wordle почав з'являтися у різних варіантах:

- Слова від 4 до 12 літер;
- Одночасне вгадування до 8 слів (кількість спроб при цьому зростала – так у восьмислівному варіанті гри спроб стає 12) – причому як однією, так і різними мовами;



- Ускладнений варіант – відкриті у попередніх спробах літери стають обов'язковими до використання у наступних;
- Гра на час.

Оскільки гра у Wordle пропрацьована із стратегічної та тактичної точки зору (існують стратегії швидкого вгадування слів через виключення ненаявних у слові голосних та частовживаних приголосних – наприклад, вибір слова «аудіо», в якому одна приголосна і чотири голосних, в якості першого – чисто стратегічний хід, спрямований на виключення ненаявних голосних), засвоєння хімічної термінології з її використанням стимулює логічне, критичне та креативне мислення учнів на уроках хімії. Мало того, можливість гри різними мовами дозволяє вивчити хімічну термінологію як українською, так і іноземними мовами, що можна використати на інтегрованих уроках хімії, української та іноземної мови.

Таким чином, Wordle сприяє одночасному стимулюванню вивчення хімії, української мови та іноземних мов через ігровий підхід і її можна легко застосувати для засвоєння хімічної термінології як українською, так і іноземними мовами. Це покращує мотивацію до вивчення хімії та мов через гру.

## ЕКОЛОГІЧНА ГЕНЕТИКА, ГЕНОТОКСИЧНІСТЬ ТА МУТАГЕНЕЗ ЯК НЕОБХІДНИЙ КОМПОНЕНТ ПІДГОТОВКИ СТУДЕНТІВ ХІМІЧНИХ СПЕЦІАЛЬНОСТЕЙ

Ткач В.В.<sup>1,2</sup>, Морозова Т.В.<sup>3</sup>, О'Ніл І., ді Машкареньяш Гайвай І.<sup>4</sup>, Іванушко Я.Г.<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, [nightwatcher2401@gmail.com](mailto:nightwatcher2401@gmail.com)

<sup>2</sup> Факультет інженерії університету Порту, Португалія

<sup>3</sup> Національний транспортний університет, Україна

<sup>4</sup> Університет Траз-уж-Монтіш і Алту-Доуру, Португалія

<sup>5</sup> Буковинський державний медичний університет, Україна

Екологічна генетика, генотоксикологія та мутагенез міждисциплінарною галуззю знань на стику хімії, екології та генетики, актуальність якої є беззаперечною. Особливої значущості вона набуває в умовах сучасних екологічних викликів, зокрема впливу токсичних сполук на геном людини та біоти загалом. В українських реаліях воєнного часу проблема генотоксичності загострюється через застосування бойових отруйних речовин, що можуть спричинити мутації, порушення процесів реплікації ДНК, синтезу білка та інші генетичні аномалії. Відтак, для студентів-хіміків важливим є розуміння механізмів спадковості, мінливості та успадкування змін, спричинених дією таких чинників.

На жаль, традиційні навчальні курси, що охоплюють аспекти екології та безпеки життєдіяльності, не забезпечують достатнього рівня знань щодо генетичних механізмів мутагенезу, хімічної природи мутацій та їхніх наслідків. Зокрема, у програмах студентів-хіміків часто відсутні розділи, що стосуються біохімії нуклеїнових кислот, механізмів відновлення ДНК, хромосомних аберацій, редакції геному, екогенетики та геноремедіації. Крім того, засвоєння фундаментальних методів дослідження, таких як електрофорез, полімеразна ланцюгова реакція (ПЛР), секвенування ДНК хімічними та електрохімічними методами, геносенсорика, є необхідним для оцінки генетичних ризиків і контролю за генетичною безпекою навколишнього природного середовища.

В умовах зростаючої антропогенної загрози, що посилюється воєнними діями, вивчення екологічної генетики та мутагенезу стає не просто теоретичним питанням, а практичною необхідністю. Хімічне та біологічне забруднення навколишнього середовища генотоксикантами матиме довготривалі наслідки, що потребуватимуть ґрунтового моніторингу та ефективних заходів з відновлення.



Для розуміння механізмів генетичних змін студентам-хімікам необхідно мати знання не лише з хімічної природи мутагенезу, а й з біологічних процесів, зокрема реплікації ДНК, трансмутації, інтеркаляції, хромосомних аберацій та поліплоїдії. Наразі дисципліни, такі як «Органічна хімія», «Біоорганічна хімія», «Хімія високомолекулярних сполук», «Основи екології» та «Безпека життєдіяльності», не забезпечують комплексного підходу до вивчення впливу природних і синтетичних сполук на генетичні механізми. Крім того, для розуміння поширення мутацій важливим є ознайомлення з основами популяційної генетики, зокрема законом Гарді-Вайнберга та принципами міграції особин із нормальним і мутованим геномом, що дозволить ефективніше здійснювати моніторинг та ідентифікацію джерел забруднення,

Таким чином, у цій роботі пропонується розширення курсу «Основи екології» для студентів-хіміків із семестрового до річного, з акцентом на генетику, мутагенез, екогенетику та популяційну генетику. Дисципліна має стати базовою для подальшого вивчення екологічної хімії та екобезпечних технологій, завершуючись підсумковим оцінюванням. Такий підхід сприятиме формуванню комплексного розуміння взаємодії хімічних речовин із генетичними структурами, механізмів їхньої мутагенності та довготривалих наслідків для екосистем і здоров'я людини. Це, своєю чергою, підвищить екологічну компетентність майбутніх фахівців-хіміків, сприяючи їхній готовності до вирішення сучасних викликів у сфері екологічної безпеки та біозахисту.

## МЕЙКЕРСТВО ТА DIY-ЛАБОРАТОРІЇ У ШКІЛЬНОМУ КУРСІ ХІМІЇ

*Яцько А.О.<sup>1</sup>, Шпирка З.М.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Середня загальноосвітня школа №97 м. Львів, [alinalinonka@gmail.com](mailto:alinalinonka@gmail.com)

<sup>2</sup>Львівський національний університет імені Івана Франка

*“Наука стає тільки тоді плідною, коли вона  
застосовується на практиці.”*

*Іван Пулюй*

Сучасна освіта швидко змінюється, адаптуючись до викликів ХХІ століття. Учні все менше цікавляться пасивним засвоєнням інформації та прагнуть до активного навчання, у якому знання здобуваються через практичний досвід. Одним із найефективніших способів зробити навчання цікавим і доступним є мейкерство та DIY-лабораторії (Do It Yourself – “зроби сам”). Мейкерство (від англ. “make” – *зробити*) – це підхід, що ґрунтується на експериментуванні, самостійному створенні приладів та проведенні дослідів із використанням доступних матеріалів [1]. Під час вивчення хімії у школі цей метод дозволяє здобувачам освіти не лише правильно поєднувати знання, винахідливість, творчість, уміння робити щось власними руками, а й розвивати навички критичного мислення, винахідливості та самостійної дослідницької діяльності. Чи можливо в умовах школи створити повноцінну лабораторію власноруч? Чи можуть учні без дорогого обладнання проводити цікаві та безпечні експерименти? Як мейкерство змінює традиційний підхід до вивчення хімії? Що таке мейкерство у школі і як воно пов'язане з хімією?

Мейкерський рух виник на початку 2000-х років і швидко набув популярності завдяки розвитку цифрових технологій та спрощеному доступу до знань. Основна ідея мейкерства – навчання через створення: коли людина не просто засвоює теоретичний матеріал, а застосовує його на практиці, виготовляючи власні пристрої, інструменти чи експериментальні моделі. У шкільному курсі хімії мейкерство стає потужним інструментом для глибшого розуміння природних процесів. Учні не лише проводять стандартні лабораторні роботи, а й експериментують із різними матеріалами, створюють власні прилади та навіть моделюють хімічні реакції в умовах класу чи домашньої лабораторії. Наприклад, семикласники можуть виготовити саморобні газометри для збирання та зберігання газів,

фільтри для очищення води, створити простий електрохімічний елемент (гальванічний елемент), що генерує електричний струм. Такі практичні заняття не тільки роблять навчання захопливим, а й формують у дітей навички наукового експерименту та проектної діяльності.

Одним із найбільших викликів у навчанні хімії є забезпечення кабінетів хімії лабораторним обладнанням. У багатьох школах вони або недостатньо оснащені через брак реактивів, або зовсім відсутні. Саме тут на допомогу приходить DIY-підхід, який допомагає розвивати творчість та інженерні навички, дозволяє створити просту, але функціональну лабораторію за допомогою доступних матеріалів. Щоб така лабораторія була ефективною та безпечною, необхідно дотримуватись кількох принципів DIY. По-перше, доступність матеріалів (реактивів). Використання речовин, які є в побуті: сода, оцет, лимони, картопля, спирт, крохмаль, йод, харчові барвники, пластикові пляшки, мідні монети, залізні цвяхи. По-друге, безпечність – основний пріоритет. Необхідно виконувати роботу з дотриманням чітких інструкцій, під наглядом вчителя, уникати токсичних або легкозаймистих речовин. По-третє, функціональність обладнання. Використання саморобних лабораторних пристроїв, наприклад, фільтрів, газозометрів та електрохімічних елементів, дозволяє мінімізувати витрати та розширити можливості експериментальної роботи. Створення власних лабораторних приладів дає можливість учням не лише глибше засвоїти теоретичний матеріал, а й навчитися самостійно конструювати обладнання для досліджень. Наприклад, саморобний газометр може бути виготовлений із пластикової пляшки, коктейльної трубочки, корка, пластиліну. Він використовується для збирання газів, що виділяються під час реакцій, а також для вимірювання їхнього об'єму. Інший цікавий прилад – фільтр для очищення води виготовляють з пластикової пляшки (2 л), за допомогою кожниць, вати або марлі, знадобляться дрібні камінці, пісок, деревне вугілля або активоване вугілля (таблетки) та посудина для чистої води. Він дозволяє очищати забруднену воду та вивчати механізм фільтрації. Щоб переконатись як працюють батарейки учні самотужки можуть створити простий електрохімічний елемент за допомогою цинкової та мідної пластин, дроту, склянки з розчином кухонної солі, лимонного соку, газованої води. Прилад дозволяє демонструвати хімічні джерела струму та вивчати процеси окиснення-відновлення. Такі прилади не лише допомагають зрозуміти основи хімічних процесів, а й сприяють розвитку творчого та аналітичного мислення. Виготовлення власних лабораторних приладів дозволяє учням не лише повторювати вже відомі експерименти, а й модифікувати їх та інтегрувати знання з різних дисциплін. Це також формує навички проектної роботи, планування та критичного аналізу отриманих результатів.

Сучасні освітні підходи все більше орієнтуються на активне навчання і мейкерство в хімії стає важливим елементом цієї трансформації. Відомі міжнародні ініціативи, такі як Maker Movement, Fab Lab, а також розвиток STEM-лабораторій в Україні, підтверджують значення інтерактивного підходу до навчання [2]. Освітні платформи, відкриті лабораторії та онлайн-ресурси сприяють обміну знаннями, пошуку ідей для проектів та залученню молоді до наукових досліджень.

Мейкерство та DIY-лабораторії в шкільному курсі хімії є не лише засобом проведення цікавих експериментів, а й потужним інструментом для розвитку дослідницьких навичок учнів. Вони допомагають формувати у них глибоке розуміння хімічних процесів, навчають самостійно працювати з науковою інформацією та спонукають до творчого підходу в навчанні. Інтеграція таких методів у шкільну практику відкриває нові можливості для освіти, роблячи її більш практичною, доступною та захопливою.

1. Мейкерство як інноваційний підхід впровадження STEM-освіти. Інститут модернізації змісту освіти. URL: <https://imzo.gov.ua/2017/04/27/mejkerstvo-yakinnovatsijnj-pidhid-vprovadzhennya-stem-osvity/>.

2. Matthews Dona. How People Learn: Brain, Mind, Experience, and School: Expanded Edition. edited by Bransford J. D., Brown, A. L., Cocking, R. R. Gifted Children: 2006. – Vol. 1. – Iss. 1. – Article 5.

# **ПІДТРИМКА КОНФЕРЕНЦІЇ**



**Компанія «УкрХімАналіз» спеціалізується на проведенні хімічного аналізу і незалежних хімічних експертиз**

<https://himanaliz.ua/uk/>

Основні види діяльності компанії «УкрХімАналіз»:

1. Визначення хімічного складу матеріалів
2. Розробка рецептур товарів
3. Дослідження якості промислової сировини
4. Екологічна експертиза житла і офісних приміщень
5. Визначення якості повітря в приміщеннях
6. Аналіз якості питної води
7. Аналіз ґрунту на родючість і забруднювачі
8. Дослідження якості палив, масел та ін. ГСМ
9. Аналіз стічних вод підприємств
10. Визначення важких металів

Серед наших клієнтів відомі українські бренди:

*Метінвест, Vents, Sport Life, Iveco, Юрія-Фарм, Макрохім, телеканал СТБ, вікна Паритет, Vaillant, Баухеми, Наша Ряба*

**Запрошуємо Вас до співпраці!**

## ЗМІСТ

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |          |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------|
| <b>АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ ТА ХІМІЯ НАВКОЛИШНЬОГО СЕРЕДОВИЩА.....</b>                                                                                                                                                                                                                                                                 | <b>5</b> |
| APPLICATION OF METAL NANOPARTICLES FOR WATER PURIFICATION<br><i>Bityutsky V.S., Tsekhmistrenko S.I., Tsekhmistrenko O.S.....</i>                                                                                                                                                                                               | 6        |
| EFFECT OF pH AND ORGANIC LIGAND ON THE RECOVERY OF CADMIUM AND LEAD<br>USING NEW MENTHOL-BASED (DEEP) EUTECTIC SOLVENTS<br><i>Cherniakova M.Yu., Vashchenko O.V., Belikov K.N.....</i>                                                                                                                                         | 8        |
| NEW METHOD FOR DETERMINATION OF FLUMIOXAZIN BY HPLC<br><i>Maga I.M.....</i>                                                                                                                                                                                                                                                    | 9        |
| ANALYSIS OF THE SYN-GAS COMPOSITION FORMED DURING THE PYROLYSIS OF<br>FERULIC ACID OVER CERIUM OXIDE SURFACE<br><i>Nastasiienko N.S., Kulik T.V., Palianytsia B.B.....</i>                                                                                                                                                     | 10       |
| НОВІ КОМПОЗИТНІ МАТЕРІАЛИ НА ОСНОВІ БЕНТОНІТУ<br><i>Бідовська К.В., Басюк В.О., Кичкирук О.Ю. ....</i>                                                                                                                                                                                                                         | 12       |
| ЕФЕКТИВНІСТЬ ЗАСТОСУВАННЯ КОАГУЛЯНТІВ СЕРІЇ «BESFLOC» В ПРОЦЕСАХ<br>ОЧИЩЕННЯ СТІЧНИХ ВОД<br><i>Борук С.Д., Куліш В.Г.....</i>                                                                                                                                                                                                  | 13       |
| ПЕРСПЕКТИВИ ВИКОРИСТАННЯ АЛЬТЕРНАТИВНИХ ВИДІВ ПАЛИВА ДЛЯ<br>ТРАНСПОРТУ<br><i>Дрехліс Є.Р., Власенко Н.Є., Коваленко І.В.....</i>                                                                                                                                                                                               | 15       |
| РОЗРОБКА ТА ВАЛІДАЦІЯ МЕТОДИКИ ДЛЯ ПРОВЕДЕННЯ ПОРІВНЯЛЬНИХ<br>ДОСЛІДЖЕНЬ СТАБІЛЬНОСТІ ПРИ ВИВЧЕННІ ДОСТАВКИ ЛІКАРСЬКОГО ЗАСОБУ<br>ТИКАГРЕЛОРУ ЧЕРЕЗ НАЗОГАСТРАЛЬНИЙ ЗОНД <i>IN VITRO</i><br><i>Єгорова А.В., Скрипинець Ю.В., Чеботарська І.І., Александрова Д.І.,<br/>Сухоставська Н.М., Кіріяк Г.В., Кашиуцький С.М.....</i> | 17       |
| СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ЗАГАЛЬНОГО ВМІСТУ ПОЛІФЕНОЛІВ У<br>КАВІ<br><i>Замковий Н.О., Микитин І.М., Прокіпчук І.В.....</i>                                                                                                                                                                                               | 20       |
| СУЧАСНІ МЕТОДИ МОНІТОРИНГУ ЯКОСТІ АТМОСФЕРНОГО ПОВІТРЯ: ВИКЛИКИ<br>ТА ПЕРСПЕКТИВИ<br><i>Івченко М.М.....</i>                                                                                                                                                                                                                   | 21       |
| ТЕСТ-ВИЗНАЧЕННЯ ЙОНІВ $\text{Cr}^{3+}$ , $\text{Pb}^{2+}$ У СКЛАДІ ОПАЛОГО ЛИСТЯ<br><i>Кавалжи О.М., Кристат Н.О., Солдаткіна Л.М.....</i>                                                                                                                                                                                     | 22       |
| КІЛЬКІСНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ЛОМАДЕНА КІНЕТИКО-СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНИМ<br>БІОХІМІЧНИМ МЕТОДОМ<br><i>Ковальська О.В., Блажеевський М.Є.....</i>                                                                                                                                                                                            | 23       |

|                                                                                                                                      |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| МОДИФІКУВАННЯ НАНОЧАСТИНОК ЦИНК ОКСИДУ ФЕНІЛСИЛІЛЬНИМИ ГРУПАМИ ДЛЯ ВИЛУЧЕННЯ МЕТИЛЕНОВОГО СИНЬОГО                                    |    |
| <i>Козакевич Р.Б., Севостьянов С.В., Тьортих В.А.</i> .....                                                                          | 25 |
| КОМПЛЕКСИ ТРИХЛОРАЦЕТАТІВ ЛАНТАНОЇДІВ З КРАУН-ЕТЕРАМИ ТА ЇХ ЕКСТРАКЦІЯ ОРГАНІЧНИМИ РОЗЧИННИКАМИ                                      |    |
| <i>Кроніковський О.І., Михалюк А.П., Стаднічук Н.О.</i> .....                                                                        | 28 |
| МАС-СПЕКТРОМЕТРИЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ЗМІН СКЛАДУ БІОДИЗЕЛЮ В РЕЗУЛЬТАТІ ОКИСНЕННЯ                                                         |    |
| <i>Кузема П.О., Ставинська О.М., Фесенко Т.В., Лагута І.В.</i> .....                                                                 | 30 |
| ХРОМАТОГРАФІЧНИЙ АНАЛІЗ ЖОВЧНИХ КИСЛОТ                                                                                               |    |
| <i>Литвин Н.С., Коновалова О.Ю.</i> .....                                                                                            | 32 |
| ЧУТЛИВІ ЕЛЕМЕНТИ ОПТИЧНИХ СЕНСОРІВ ОРГАНІЧНИХ АМІНІВ                                                                                 |    |
| <i>Марків Ю.Б., Аксіментьєва О.І., Конопельник О.І., Журіна Н.Ю., Мартинюк Г.В.</i> .....                                            | 33 |
| АДСОРБЦІЙНЕ ВИЛУЧЕННЯ ТАРТРАЗИНУ З МОДЕЛЬНИХ ВОДНИХ РОЗЧИНІВ ПОЛІАНІЛІНОМ                                                            |    |
| <i>Марчук І.Є., Буклів Р.Л., Засадна В.Т.</i> .....                                                                                  | 36 |
| ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДУ ІНВЕРСІЙНОЇ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРІЇ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ІОНІВ $\text{Cd}^{2+}$ В РІДИНАХ                                    |    |
| <i>Медик І.А., Воробець В.С., Колбасов Г.Я.</i> .....                                                                                | 38 |
| ФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ БЕРВНИКА ЕОЗИН Б А У РОЗЧИНІ                                                                                 |    |
| <i>Олексюк О.Ю., Камінський О.М., Денисюк Р.О., Кучерук С.В.</i> .....                                                               | 40 |
| ПОШУК ТА ДОСЛІДЖЕННЯ «ЗЕЛЕНИХ» ІНГІБІТОРІВ КОРОЗІЇ МЕТАЛІВ                                                                           |    |
| <i>Петруша Ю.Ю.</i> .....                                                                                                            | 41 |
| ХІМІЧНА МОДИФІКАЦІЯ ГУМОВОЇ КРИХТИ З ШИН ДЛЯ ВИКОРИСТАННЯ В АСФАЛЬТОБЕТОННИХ СУМІШАХ                                                 |    |
| <i>Поліщук Д.В.</i> .....                                                                                                            | 42 |
| АДСОРБЦІЙНЕ ВИДАЛЕННЯ ОКСІАНІОНІВ $\text{Cr(VI)}$ ІЗ МОДЕЛЬНИХ ВОДНИХ РОЗЧИНІВ КОМПОЗИТАМИ ТЕРМІЧНО АКТИВОВАНИЙ ГЛАУКОНІТ/ПОЛІАНІЛІН |    |
| <i>Сидорко М.С., Стеців Ю.А., Яцишин М.М., Зелінський А.В., Решетняк О.В.</i> .....                                                  | 44 |
| МІКРОГРІН І ПРОРОСТКИ- ЗЕЛЕНІ СУПЕРФУДИ ДЛЯ ЗБАГАЧЕННЯ РАЦІОНУ ЛЮДИНИ КОРИСНИМИ МІКРОЕЛЕМЕНТАМИ                                      |    |
| <i>Смітюк Н.М., Васильєв А.М.</i> .....                                                                                              | 46 |
| ЕКОЛОГІЧНИЙ СТАН ВОДНИХ РЕСУРСІВ ПРИФРОНТОВИХ МІСТ ДОНЕЧЧИНИ НА ПРИКЛАДІ ШАХТАРСЬКОГО МІСТА МИРНОГРАДА                               |    |
| <i>Смітюк Н.М., Сурпун Е.Ю.</i> .....                                                                                                | 47 |
| РОЛЬ МІНЕРАЛЬНИХ РЕЧОВИН В ОРГАНІЗМІ ЛЮДИНИ                                                                                          |    |
| <i>Тімошук О.О., Авдєєва О.Ю., Авдєєв С.В.</i> .....                                                                                 | 49 |



|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |           |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ СУКРАЛОЗИ ТА СУКРОНООВОЇ КИСЛОТИ КАТОДНИМ ШЛЯХОМ<br><i>Ткач В.В., Кушнір М.В., де Машкареньяш Гайвау І.О., де Барруш А.І., Іванушко Я.Г., Морозова Т.В., да Пайва Мартіни Ж.І., Ягодинець П.І.</i>                                                                                                                 | 50        |
| МАТЕМАТИЧНИЙ ОПИС ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ АНТИГЕЛЬМІНТНОГО ПРЕПАРАТУ ТІАБЕНДАЗОЛ НА АНОДІ, МОДИФІКОВАНОМУ НАНОЧАСТИНКАМИ КУПРУМ (II) СУЛЬФІДУ<br><i>Ткач В.В., Кушнір М.В., Морозова Т.В. Монтейру М.Ж. О'Ніл І., де Машкареньяш Гайвау І.О., Іванушко Я.Г. да Сілва А.О. Ягодинець П.І. Кормош Ж.О. , Луганська О.В., Гарсія Ж.Р., да Пайва Мартіни Ж.І.</i> | 51        |
| ТЕОРЕТИЧНИЙ ОПИС ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ТА ЕЛЕКТРОПОЛІМЕРИЗАЦІЇ БУФОТЕНІНУ НА ЕЛЕКТРОДІ, МОДИФІКОВАНОМУ КОБАЛЬТ (III) ОКСИГІДРОКСИДОМ<br><i>Ткач В.В., Кушнір М.В., Морозова Т.В. Монтейру М.Ж. О'Ніл І., де Машкареньяш Гайвау І.О., Іванушко Я.Г., да Сілва А.О., Ягодинець П.І., Кормош Ж.О. , Луганська О.В., Гарсія Ж.Р., да Пайва Мартіни Ж.І.</i>     | 52        |
| ТЕОРЕТИЧНИЙ ОПИС ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ АНТИГЕЛЬМІНТНОГО ПРЕПАРАТУ МЕБЕНДАЗОЛ НА ЕЛЕКТРОДІ, МОДИФІКОВАНОМУ ПОЛІ(НІНГАЛІНОМ А)<br><i>Ткач В.В., Кушнір М.В., де Олівейра С.С., Листван В.В., Дитинченко І.М., да Сілва А.О., Акинай Ю., Ягодинець П.І., Кормош Ж.О.</i>                                                                                       | 53        |
| ТЕОРЕТИЧНИЙ ОПИС ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ АПОМОРФІНУ<br><i>Ткач В.В., Кушнір М.В., Морозова Т.В. Монтейру М.Ж. , О'Ніл І., де Машкареньяш Гайвау І.О., Іванушко Я.Г. да Сілва А.О., Ягодинець П.І., Кормош Ж.О. , Луганська О.В., Гарсія Ж.Р., да Пайва Мартіни Ж.І.</i>                                                                                       | 54        |
| ДОСЛІДЖЕННЯ ПЕРСЕКТИВИ ВПРОВАДЖЕННЯ «ЗЕЛЕНИХ ТЕХНОЛОГІЙ»<br><i>Шкварун І., Власенко Н.С., Коваленко І.В.</i>                                                                                                                                                                                                                                                      | 55        |
| <b>МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО ТА НАНОТЕХНОЛОГІЇ</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | <b>57</b> |
| S- AND N-DOPED MICROPOROUS CARBON SUPPORTED BY MgO AND ZnO FOR HIGHLY SELECTIVE CO <sub>2</sub> CAPTURE<br><i>Galaburda M., Dyachenko A., Deryło-Marczewska A.</i>                                                                                                                                                                                                | 58        |
| INVESTIGATION OF NANOCOMPOSITE SYSTEMS PECTIN/SILICA AND THEIR PROPERTIES<br><i>Krupska T.V., Klymenko N.Yu., Wei Q., Zheng J., Yang W., Turov V.V.</i>                                                                                                                                                                                                           | 59        |
| THE EFFECT OF PHYTOREDUCTANT ON THE STRUCTURE, MORPHOLOGY AND ADSORPTION-CATALYTIC PROPERTIES OF COBALT FERRITE<br><i>Liaskovska M.R.</i>                                                                                                                                                                                                                         | 60        |
| STRUCTURAL AND ENERGY TRANSFORMATIONS IN TiNi <sub>1-x</sub> Ag <sub>x</sub> Sn<br><i>Romaka L., Stadnyk Yu., Romaka V.A., Horyn A., Demchenko P.</i>                                                                                                                                                                                                             | 61        |

|                                                                                                                                                                                                              |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| SWELLING BEHAVIOR OF MIXED ALGINATE-PECTIN GELS<br><i>Samchenko K., Goncharuk O., Samchenko Y.</i> .....                                                                                                     | 62 |
| CARBOXYMETHYL CHITOSAN NANOPARTICLES CROSS-LINKED BY TERBIUM IONS:<br>SYNTHESIS AND CHARACTERISTICS<br><i>Shcheglov O.D., Kusyak A.P., Mechyk P.O., Petranovska A.L., Gorbyk P.P.</i> .....                  | 64 |
| RESEARCH OF NEW THERMOELECTRIC MATERIAL $Zr_{1-x}Al_xNiSn$<br><i>Stadnyk Yu., Romaka V.A., Romaka L., Horyn A., Haraniuk P.</i> .....                                                                        | 65 |
| ELECTRICAL PROPERTIES OF FERRITE STRUCTURES $n-NiFe_2O_4/n-InSe$<br><i>Tkachuk I.G., Ivanov V.I., Kovalyuk M.Z.</i> .....                                                                                    | 67 |
| ENGINEERING FLUORINATED SILICA-BASED MATRICES WITH TERBIUM-AMINO<br>COMPLEXES FOR HIGH-PERFORMANCE SENSING<br><i>Tomina V.V., Semeshko O.Y., Dutková E., Melnyk I.V.</i> .....                               | 69 |
| Zn, Ag-DOPED CuO NANOPARTICLES WITH ENHANCED COLLOIDAL STABILITY AND<br>THEIR ANTIMICROBIAL PERFORMANCE<br><i>Varchenko V., Bryleva K., Bunina Z., Belikov K., Zavgorodnii A., Paliy A.</i> .....            | 72 |
| ELECTROCHEMICAL FORMATION AND OPTICAL PROPERTIES OF<br>POLYPYRROLE/MAX PHASE FILMS<br><i>Zhytskyi A.K., Horbenko Y.Y., Aksimentyeva O.I.</i> .....                                                           | 74 |
| ВЛАСТИВОСТІ І ВИКОРИСТАННЯ ОКСИДНИХ НАНОМАТЕРІАЛІВ В ХІМІЧНИХ<br>ДЖЕРЕЛАХ СТРУМУ<br><i>Андрєєва О.Р., Коваленко І.В., Потаскалов В.А., Власенко Н.Є.</i> .....                                               | 76 |
| СИНТЕЗ НАНОЧАСТИНОК МЕТАЛІВ НА ОСНОВІ РІСТ-СТИМУЛЮЮЧОЇ БАКТЕРІЇ<br><i>BACILLUS SUBTILIS</i> ТА ХАРАКТЕРИСТИКА ЇХ БАКТЕРИЦИДНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ<br><i>Борова М., Денисенко С., Бузіашвілі А., Ємець А.</i> ..... | 77 |
| ПОЛЕМ ЖНИВ КВАНТОВОЇ ХІМІЇ СТАЄ ПЕРІОДИЧНА ТАБЛИЦЯ ЕЛЕМЕНТІВ<br><i>Віленський В.О., Віленська Л.М.</i> .....                                                                                                 | 78 |
| ЗМЕНШЕННЯ ФАНТОМНИХ ВІДМОВ ЕЛЕКТРОТЕХНІЧНИХ ПРИСТРОЇВ ЗА РАХУНОК<br>КОНТРОЛЮ ЗАЛИШКІВ ПОЛІМЕР-НЕОРГАНІЧНИХ КОМПОЗИЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ<br>З ЕЛЕКТРОННОЮ ПРОВІДНІСТЮ<br><i>Володимиров В.В.</i> .....            | 84 |
| КОРОЗІЙНА ТРИВКІСТЬ КОБАЛЬТОВИХ АМОРФНИХ СПЛАВІВ<br>У ЛУЖНОМУ РОЗЧИНІ<br><i>Герцик О.М., Слободний В.А., Чала Д.Ю., Пандяк Н.Л., Ташак М.С.</i> .....                                                        | 86 |
| РАДІОПОГЛИНАЮЧІ МАТЕРІАЛИ З ГІБРИДНИМИ ВУГЛЕЦЬВМІСНИМИ І<br>ФЕРИТОВИМИ НАПОВНЮВАЧАМИ<br><i>Горбик П.П., Дубровін І.В., Прокопенко С.Л.</i> .....                                                             | 87 |

|                                                                                                                                                                                                             |     |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| ПРОСТОРОВА БУДОВА ТА ЕЛЕКТРОННІ СПЕКТРИ ПОГЛИНАННЯ НАНОЧАСТИНОК НЕОРГАНІЧНОГО ПІГМЕНТА ОРТОВАНАДАТУ БІСМУТУ<br><i>Гребенюк А.Г.</i> .....                                                                   | 90  |
| Mn-ЗАМІЩЕНІ ФЕРИТИ КОБАЛЬТУ ЯК ЕФЕКТИВНІ КАТАЛІЗАТОРИ ДЛЯ ОКИСНЕННЯ ОРГАНІЧНИХ ЗАБРУДНЕНЬ<br><i>Данилюк І.В., Татарчук Т.Р., Шийчук О.В.</i> .....                                                          | 92  |
| ВИДАЛЕННЯ ПЕР- ТА ПОЛІФТОРАЛКІЛЬНИХ РЕЧОВИН ІЗ ПРИРОДНИХ І СТІЧНИХ ВОД СПЕЦІАЛЬНИМИ СОРБЕНТАМИ НА ОСНОВІ КРЕМНЕЗЕМУ<br><i>Дударко О.А., Сейсенбаєва Г.</i> .....                                            | 93  |
| АНАЛІЗ РЕОЛОГІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ КОМПОЗИТУ НА ОСНОВІ ПОЛІКАПРОАМІДУ<br><i>Земке В.М., Братичак М.М., Чопик Н.В.</i> .....                                                                                    | 95  |
| ОСОБЛИВОСТІ ФОРМУВАННЯ КАЛЬЦІЙ ФОСФАТІВ У ПРИСУТНОСТІ СУМІШІ КАТІОНІВ $Fe^{3+} + Mg^{2+}$ (чи $Zn^{2+}$ )<br><i>Комащенко Є.О., Струтинська Н.Ю., Лівіцька О.В.</i> .....                                   | 96  |
| МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ГАЗО-ЛАЗЕРНОГО РІЗАННЯ ТРУБЧАСТОЇ ЗАГОТОВКИ<br><i>Кондрашев П.В., Степура О.М.</i> .....                                                                                         | 97  |
| ВПЛИВ УМОВ СИНТЕЗУ НА ХІМІЮ ПОВЕРХНІ, СТРУКТУРНІ ТА ФОТОЕЛЕКТРОХІМІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ Ti- і Zn-ВМІСНИХ ОКСИДНИХ ПЛІВОК<br><i>Крамар А.С., Воробець В.С., Колбасов Г.Я., Дяченко А.Г., Ліннік О.П.</i> ..... | 99  |
| ЗАСТОСУВАННЯ ФУЛЕРЕНІВ ДЛЯ КОНСЕРВАЦІЇ ПРОДУКТІВ<br><i>Кричковська Л.В., Карпушина С.А., Бирта Г.О., Грицаєнко Ю.А.</i> .....                                                                               | 100 |
| СУПРАМОЛЕКУЛЯРНІ КОМПЛЕКСИ ВКЛЮЧЕННЯ $\beta$ -ЦИКЛОДЕКСТРИНВМІСНОГО АЕРОСИЛОГЕЛЮ З БЕНЗЕНОМ ТА ЙОГО КАРБОКСИЛЬНИМИ ПОХІДНИМИ<br><i>Ляшенко Д.Ю.</i> .....                                                   | 102 |
| ХІМІЧНА ВЗАЄМОДІЯ МОНОКРИСТАЛІВ GaSb З ТРАВІЛЬНИМИ КОМПОЗИЦІЯМИ $I_2 + HI$<br><i>Маланич Г.П., Денисюк Р.О., Томашик В.М., Лозова М.В.</i> .....                                                            | 104 |
| РОЗРАХУНОК ПАРАМЕТРІВ АДСОРБЦІЇ РИВАНОЛУ НА ПОВЕРХНІ НАНОКРИСТАЛІЧНОГО ДІОКСИДУ ТИТАНУ<br><i>Маркітан О.В.</i> .....                                                                                        | 106 |
| МАГНІТОЧУТЛИВИЙ НАНОКОМПОЗИТ НА ОСНОВІ ДИБЕНЗО-18-КРАУН-6 ЕТЕРУ<br><i>Мечик П., Щеглов О., Кусяк А., Петрановська А., Горбик П.</i> .....                                                                   | 108 |
| КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА СПОЛУКИ $HoRe_{0,25(3)}Ge_2$<br><i>Михалічко В.М., Федина Л.О., Федорчук А.О., Федина М.Ф.</i> <sup>4</sup> .....                                                                     | 108 |
| КАЛИНА ЗВИЧАЙНА У СИНТЕЗІ НАНОЧАСТИНОК СРІБЛА<br><i>Мусієнко Д.Р., Литвин В.А.</i> .....                                                                                                                    | 110 |

|                                                                                                                                                                                                                                           |            |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| ТРИБОКОРОЗІЙНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТРУБНОЇ СТАЛІ У СІРКОВОДНЕВМІСНИХ СЕРЕДОВИЩАХ ЗА ПРИСУТНОСТІ КИСНЮ<br><i>Рацька Н.Б., Чучман М.Р., Василюк Х.Б.</i> .....                                                                                   | 112        |
| ВПЛИВ КАТАЛІЗАТОРІВ КРИСТАЛІЗАЦІЇ НА СТРУКТУРУ ТА ВЛАСТИВОСТІ БРОНЬОВИХ МАТЕРІАЛІВ<br><i>Рябінін С.О., Захаров А.В., Майстат М.С.</i> .....                                                                                               | 113        |
| ВПЛИВ МОРФОЛОГІЇ ПОВЕРХНІ СВІТЛОКОНВЕРТОРІВ НА ОСНОВІ ЕВТЕКТИКИ $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{YAG:Ce}$ НА ЇХ СВІТЛОТЕХНІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ<br><i>Сірик Ю.В., Кривоногов С.І., Вовк О.М., Ніжанковський С.В.</i> .....                      | 114        |
| ВПЛИВ УМОВ СИНТЕЗУ НА СТРУКТУРУ ТА СОРБЦІЙНІ ВЛАСТИВОСТІ КРЕМНЕЗЕМІВ: РОЛЬ ФУНКЦІОНАЛЬНОГО СИЛАНУ ТА ЦИКЛІЧНОГО ОЛІГОСАХАРИДУ ЯК КОМПОНЕНТІВ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ СУМІШІ<br><i>Трофимчук І.М., Роїк Н.В.</i> .....                                   | 116        |
| АДСОРБЕНТИ З ДОВГОПОЛУМЕНЕВОГО ВУГІЛЛЯ, ОКИСНЕНОГО ПЕРОКСИДОМ ВОДНЮ<br><i>Фролова І.Б., Тамаркіна Ю.В., Редько А.В., Кучеренко В.О.</i> .....                                                                                             | 118        |
| ВПЛИВ ФУНКЦІОНАЛІЗАЦІЇ САЖІ НА СТАБІЛЬНІСТЬ ЇЇ КОЛОЇДНИХ СИСТЕМ У ВОДНО-СПИРТОВОМУ СЕРЕДОВИЩІ<br><i>Хора О.В., Андрійко Л.С., Маринін А.І., Горєлов Б.М., Гаврилюк Н.А., Золотаренко Ан.Д., Щур Д.В.</i> .....                            | 120        |
| <b>НЕОРГАНІЧНА ТА ФІЗИЧНА ХІМІЯ</b> .....                                                                                                                                                                                                 | <b>123</b> |
| IR SPECTRAL ANALYSIS OF THE FUNCTIONAL GROUP CHARACTERISTICS OF PHOSPHORITES FOR THE DEVELOPMENT OF BIOFERTILIZERS BASED ON THEM<br><i>Andriyko L.S., Tagaev I.A., Rakhmatullaeva L.B., Toshburiev Sh.O.</i> .....                        | 124        |
| INFLUENCE OF THE NOVEL TECHNOLOGIES ON THE DEVELOPMENT OF PYRAZOLE COORDINATION CHEMISTRY<br><i>Davydenko Y.M., Vynohradov O.S., Pavlenko V.A.</i> .....                                                                                  | 126        |
| PHYSICOCHEMICAL ANALYSIS OF LIQUID MIXTURES. METHOD OF BINARY ADDITIVE QUASI-SOLVATES<br><i>Efimov P.V.</i> .....                                                                                                                         | 127        |
| SYNTHESIS AND LUMINESCENCE PROPERTIES OF MATERIALS BASED ON $\text{Eu}^{3+}$ -DOPED $\text{Ba}_3\text{Tb}(\text{PO}_4)_3/\text{SiO}_2$<br><i>Khomenko O.V., Terebilenko K.V., Dotsenko V.P., Berezovskaya I.V., Efryushina N.P.</i> ..... | 128        |
| SYNTHESIS AND THERMODYNAMIC PARAMETERS OF DISSOLUTION OF 1-CYCLOHEXYL-2-METHYL-5-PHENYL-1H-PYRROLE-3-CARBOXYLIC ACID IN ALCOHOLS<br><i>Kostiuk R., Horak Yu., Obushak M., Sobechko I.</i> .....                                           | 130        |

|                                                                                                                                                                                                                      |     |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| TOXIC Cr(VI) IONES PHOTOREDUCTION IN WATER ENVIRONMENTS VIA $W^{n+}/TiO_2$ FILMS ACTIVATED BY PLASMA IRRADIATION<br><i>Petrik I.S., Eremenko A.M., Smirnova N.P., Frolova E.K., Khomych V.O., Kolomys O.F.</i> ..... | 131 |
| ELECTROLYTE COMPONENTS EFFECT ON THE VANADIUM-CONTAINING COATINGS COMPOSITION<br><i>Sakhnenko M., Zhelavska Y., Proskurina V., Korohodska A., Rudneva S.</i> .....                                                   | 133 |
| EXPERIMENTAL AND ANALYTICAL ENERGETIC STUDY OF 3-(5-PHENYL- 1-(FURAN-2-YLMETHYL)-1H-PYRROL-2-YL)PROPANOIC ACID<br><i>Shevchenko D.S., Horak Yu.I., Obushak M.D., Pyshna D.B., Sobechko I.B.</i> .....                | 135 |
| SPECTROSCOPY AND ELECTROCHEMICAL BEHAVIOUR OF HETEROMETALLIC Cu/Cd AND Cu/Zn COMPLEXES WITH AN O-VANILLIN-DERIVED LIGAND<br><i>Vassilyeva O.Y., Buvaylo E.A., Kokozay V.N.</i> .....                                 | 136 |
| THERMODYNAMICS OF PHASE EQUILIBRIA OF SYSTEMS POLYETHYLENE GLYCOL – SODIUM TARTRATE – WATER<br><i>Yukhno G.D., Krasnoporova A.P., Efimova N.V.</i> .....                                                             | 139 |
| СИСТЕМИ $La(Pr)_2Se_3 - In_2Se_3 - SnSe_2$<br><i>Блашко Н.М., Марчук О.В.</i> .....                                                                                                                                  | 140 |
| РЕАКЦІЇ НАСИЧЕНИХ ВУГЛЕВОДНІВ І БЕНЗОЛУ ТА АЛКІЛБЕНЗОЛІВ З ПЕРМАНГНАТОМ КАЛІЮ У ВОДНИХ РОЗЧИНАХ<br><i>Волкова Л.К., Опейда Й.О.</i> .....                                                                            | 143 |
| ДРУГЕ ПРАВИЛО ПОЛЯРНОСТІ ІЗОМОРФНИХ ЗАМІЩЕНЬ В АСИМЕТРИЧНИХ РЕГУЛЯРНИХ ТВЕРДИХ РОЗЧИНАХ<br><i>Гетьман Є.І., Радіо С.В.</i> .....                                                                                     | 145 |
| КІНЕТИКА ДЕГРАДАЦІЇ АЗОБРАВНИКІВ ЗА УЧАСТІ АМОΡФНИХ СПЛАВІВ НА ОСНОВІ АЛЮМІНІЮ<br><i>Головатюк А.Ю., Бойчишин Л.М.</i> .....                                                                                         | 147 |
| ОСОБЛИВОСТІ ВЗАЄМОДІЇ КОМПОНЕНТІВ НА ПЕРЕРІЗАХ $RGe_2 - R'Ge_2$<br><i>Дармонук О.Т., Шпирка З.М., Павлюк В.В.</i> .....                                                                                              | 148 |
| СИНТЕЗ І КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА СПОЛУКИ $Pr_{11}Co_4In_9$<br><i>Димитриаді Д.Г., Ничипорук Г.П., Каличак Я.М.</i> .....                                                                                               | 150 |
| ОКИСНЕННЯ СУЛЬФОКСИДІВ ПЕРОКСИКИСЛОТАМИ В ОРГАНІЧНИХ РОЗЧИННИКАХ<br><i>Дутка В.С., Мідяна Г.Г., Дутка Ю.В.</i> .....                                                                                                 | 151 |
| БІМЕТАЛІЧНІ Ni-Fe НАНОКАТАЛІЗАТОРИ НА ОСНОВІ КОМПОЗИТНИХ КЕРАМІЧНИХ МАТЕРІАЛІВ ДЛЯ ГІДРОНЕНУВАННЯ $CO_2$ ДО МЕТАНУ<br><i>Дяченко А., Пригунова О., Борисенко М., Дуднік О., Іщенко О.</i> .....                      | 154 |

|                                                                                                                                                                                                                                                |     |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| ВПЛИВ ДИФУЗІЇ НА ДИСКРИМІНАЦІЮ ШВИДКІСТЬ-ВИЗНАЧАЛЬНОЇ СТАДІЇ МЕХАНІЗМУ ІЛІ-РІДІЛА<br><i>Жох О.О.</i> .....                                                                                                                                     | 156 |
| БІАДЕРНІ ТЕТРАКІС-КОМПЛЕКСИ РЗЕ З БІСКАРБАЦИЛАМІДОФОСФАТОМ<br><i>Каряка Н.С., Труш В.О., Амірханов В.М.</i> .....                                                                                                                              | 158 |
| МОНО- ТА БІМЕТАЛЬНІ КОМПОЗИЦІЇ, ЗАКРІПЛЕНІ НА ПРИРОДНИХ НОСІЯХ РІЗНОГО ПОХОДЖЕННЯ В РЕАКЦІЇ ХЕМОСОРБЦІЙНО-КАТАЛІТИЧНОГО ОКИСНЕННЯ ДІОКСИДУ СУЛЬФУРУ<br><i>Кіосе Т.О., Раскола Л.А., Бакуменко А.-Д. В., Лагутова А.Д., Голубчик К.О.</i> ..... | 159 |
| ТЕОРЕТИЧНІ АСПЕКТИ ОТРИМАННЯ ВОГНЕТРИВКИХ ЦЕМЕНТІВ НА ОСНОВІ АЛЮМІНАТІВ ТА ТИТАНАТІВ КАЛЬЦІЮ<br><i>Кітченко А.В.</i> .....                                                                                                                     | 162 |
| ІЗОТЕРМІЧНИЙ ПЕРЕРІЗ ДІАГРАМИ СТАНУ СИСТЕМИ Dy-Ti-Ge (800° C)<br><i>Коник М.Б., Ромака Л.П., Яцків Ю.І., Стадник Ю.В.</i> .....                                                                                                                | 163 |
| ЕЛЕКТРОХІМІЧНЕ ВИЛУЧЕННЯ МІДІ З КОНЦЕНТРОВАНИХ РІДКИХ ВІДХОДІВ<br><i>Корчик Н.М., Буденкова Н.М., Мисіна О.І.</i> .....                                                                                                                        | 165 |
| ЗАСТОСУВАННЯ КІНЕТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ДО ОПИСУ ПРОЦЕСІВ АДСОРБЦІЇ ДОКОСРУБЦИНУ НА ПОВЕРХНІ НАНОМАГНЕТИТУ<br><i>Кусяк Н.В., Мельник І.В., Свиридчук К.П., Горбик П.П.</i> .....                                                                       | 167 |
| КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ІНІЦІАЦІЇ ПОЛІМЕРИЗАЦІЇ ЕТИЛЕНУ ЗА УЧАСТІ $\pi$ -КОМПЛЕКСІВ $\text{Cu}^+$<br><i>Лучинський Н.В., Осокін Є.С.</i> .....                                                                                            | 168 |
| КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА ФАЗ СИСТЕМИ DYNIN-DYNISN<br><i>Ничипорук Г., Горяча М., Зелінський А., Заремба В.</i> .....                                                                                                                              | 169 |
| РОЗЧИНЕННЯ 4,7-ДІОКСО-7-ФЕНІЛГЕПТАНОВОЇ КИСЛОТИ У ОРГАНІЧНИХ РОЗЧИННИКАХ РІЗНОЇ ПОЛЯРНОСТІ<br><i>Огороднік М.Я., Горак Ю.І., Обушак М.Д., Собечко І.Б.</i> .....                                                                               | 170 |
| ЕФЕКТИВНІСТЬ СИСТЕМИ $\text{KMnO}_4 - \text{NHSI} - \text{AsOH}$ У РАДИКАЛЬНО-ЛАНЦЮГОВОМУ АЕРОБНОМУ ОКИСНЕННІ КУМОЛУ<br><i>Опейда Л.І., Шепарович Р.Б., Хавунко О.Ю., Волкова Л.К.</i> .....                                                   | 171 |
| ГІБРИДНІ МАТЕРІАЛИ НА ОСНОВІ КРЕМНЕЗЕМУ ТА МЕТАЛООРГАНІЧНИХ ІМІДАЗОЛЯТНИХ СТРУКТУР<br><i>Роїк Н.В., Трофимчук І.М.</i> .....                                                                                                                   | 173 |
| АДСОРБЦІЙНА АКТИВНІСТЬ НАНОПОРИСТИХ МАТЕРІАЛІВ, ОТРИМАНИХ ЛУЖНОЮ АКТИВАЦІЄЮ З ТЕПЛОВИМ УДАРНОМ<br><i>Сабєрова В.О., Редько А.В., Тамаркіна Ю.В., Кучеренко В.О.</i> .....                                                                      | 174 |



|                                                                                                                                                                                                                                                                    |            |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| ГОМО- ТА ГЕТЕРОМЕТАЛЬНІ КООРДИНАЦІЙНІ СПОЛУКИ ГЕРМАНІЮ(IV) З НІТРИЛОТРИМЕТИЛФОСФОНОВОЮ КИСЛОТОЮ<br><i>Сахаренко Л.В., Чокан Л.О., Марцинко О.Е.</i> .....                                                                                                          | 176        |
| ВЗАЄМОДІЯ В СИСТЕМІ $\text{Ti}_2\text{Se}-\text{CdSe}-\text{GeSe}_2$<br><i>Селезень А.О., Мороз М.В., Гулай Л.Д., Піскач Л.В.</i> .....                                                                                                                            | 177        |
| ФОТОЕЛЕКТРОХІМІЧНИЙ АНАЛІЗ КОНЦЕНТРАЦІЇ ЙОНІВ СВИНЦЮ<br><i>Смілик В.О., Фоманюк С.С., Колбасов Г.Я., Русецький І.А., Данілов М.О.</i> .....                                                                                                                        | 179        |
| ПІДВИЩЕННЯ ПРОТИКОРОЗІЙНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ АЛЮМІНІЄВОГО СПЛАВУ В ХЛОРИДОВМІСНОМУ СЕРЕДОВИЩІ ІНГІБУВАЛЬНОЮ КОМПОЗИЦІЄЮ НАТРІЮ АЛЬГІНАТУ ТА ЦИНКУ АЦЕТАТУ<br><i>Сободош Н.Й., Хлопик О.П., Корній С.А.</i> .....                                                        | 180        |
| ВПЛИВ НИЗЬКОМОЛЕКУЛЯРНИХ СПИРТІВ НА ПРОЦЕС МІЦЕЛОУТВОРЕННЯ В РОЗЧИНАХ АЛКІЛСУЛЬФАТІВ НАТРІЮ ТА ЇХ АДСОРБЦІЮ<br><i>Стрельцова О.О., Волювач О.В.</i> .....                                                                                                          | 182        |
| СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМІНЕСЦЕНТНІ ВЛАСТИВОСТІ ФТАЛОЦІАНІНОВИХ КОМПЛЕКСІВ ЦИРКОНІЮ З ПОЗАПЛОЩИННИМИ КАРБОКСИЛОВМІСНИМИ ЛІГАНДАМИ<br><i>Федосова Н.М., Третьякова І.М., Черній В.Я., Ротару А.</i> .....                                                                     | 183        |
| ЕЛЕКТРОННІ СПЕКТРИ ПОГЛИНАННЯ ДЕФЕКТНИХ ЦЕНТРІВ В НАНОЧАСТИНКАХ $\text{SnO}_2$<br><i>Філоненко О.В., Дем'яненко Є.М., Гребенюк А.Г., Лобанов В.В.</i> .....                                                                                                        | 185        |
| ДОСЛІДЖЕННЯ АДСОРБЦІЇ ОЛЕЇНОВОЇ КИСЛОТИ НА ІОНООБМІННИХ СМОЛАХ<br><i>Черніченко О.В., Мельник Ю.Р.</i> .....                                                                                                                                                       | 187        |
| ДОСЛІДЖЕННЯ КРИСТАЛІЧНОЇ БУДОВИ НОВИХ СОЛЬВАТОВАНИХ ФОРМ АФІ ФУРАЗИДИН<br><i>Шапошник А.М., Баумер В.М.</i> .....                                                                                                                                                  | 188        |
| ПЕРСПЕКТИВНІ ОБЛАСТІ ДЛЯ ОТРИМАННЯ ВИСОКО ЗАЛІЗИСТИХ ЦЕМЕНТІВ У СИСТЕМІ $\text{CaO}-\text{BaO}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{Fe}_2\text{O}_3$<br><i>Шарапов М.І., Тараненкова В.В., Золотарьов К.В., Гуровий Д.В.</i> .....                                          | 189        |
| <b>ХІМІЧНІ ПРЕПАРАТИ В БІОЛОГІЇ ТА МЕДИЦИНІ</b> .....                                                                                                                                                                                                              | <b>191</b> |
| PHYSICOCHEMICAL AND ANTIBACTERIAL PROPERTIES OF ORNIDAZOLE-BASED NANOCOMPOSITES FOR MEDICAL APPLICATION<br><i>Avramenko V., Vakuliuk P., Furtat I., Pryshchepa O., Kozakevych R., Demianenko E., Murlanova T., Smarsly B., Pomastowski P.</i> .....                | 192        |
| STUDY OF GUANIDINE-CONTAINING OLIGOMER FOR DESINFECTANT APPLICATION<br><i>Hodlevskyi H., Hudyma A., Vakuliuk P., Pryshchepa O., Furtat I., Vortman M., Fijałkowski P., Rafińska K., Lemeshko V., Murlanova T., Smarsly B., Pomastowski P., Shevchenko V.</i> ..... | 193        |

|                                                                                                                                                                                                                             |     |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| DEVELOPMENT OF EXTRACTION-SPECTROPHOTOMETRIC METHOD FOR THE QUANTITATIVE DETERMINATION OF THE ANTIDEPRESSANT FLUOXETINE WITH METHYL ORANGE<br><i>Karpushyna S.A., Baiurka S.V.</i> .....                                    | 194 |
| QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF SOLVATION AND ADSORPTION OF NATURAL POLYPHENOL CURCUMIN ON THE SURFACE OF SILICA ENTEROSORBENT<br><i>Kazakova O.O., Barvinchenko V.M., Lipkovska N.O.</i> .....                                   | 195 |
| CONFORMATIONAL SAMPLING OF DUAL CK2/HDAC INHIBITORS BY CLUSTERING AND BOLTZMANN-TYPE DISTRIBUTION ANALYSIS IN DIFFERENT ENVIRONMENTS<br><i>Klenina O.V., Márquez-Cantudo L., Coderch C., de Pascual-Teresa B.</i> .....     | 197 |
| INTERACTION OF POLYPHENOLS WITH MODEL MEMBRANES: A MOLECULAR DYNAMICS STUDY<br><i>Lonin D.O., Malovytsia U.K., Zhytniakivska O.A., Vus K.O., Trusova V.M., Gorbenko G.P.</i> .....                                          | 199 |
| PHARMACOGNOSTIC POTENTIAL OF ESSENTIAL OIL PLANTS IN CREATING INNOVATIVE COSMETICS: THE EXPERIENCE OF THE “LAVENDER PROVINCE”<br><i>Paientko V.V., Kapitula A.V., Matkovsky A.K., Kustovska A.V., Grygorieva O.V.</i> ..... | 200 |
| INNOVATIVE APPROACHES IN CREATING NATURAL COSMETICS: THE EXPERIENCE OF THE COMPANY "ZELENAHA"<br><i>Paientko V.V., Kurinna N., Matkovsky A.K., Wiśniewska M., Gladysz-Plaska A., Tkachuk O.</i> .....                       | 202 |
| “GREEN” NANOPARTICLES OF METALS AND NONMETALS IN ANIMAL AND POULTRY FEEDING<br><i>Tsekhmistrenko S.I., Polishchuk V.M., Rol N.V., Polishchuk S.A.</i> .....                                                                 | 204 |
| РОЗРОБКА ЕКСТРАКЦІЙНО-СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНОГО МЕТОДУ КІЛЬКІСНОГО ВИЗНАЧЕННЯ СЕРТРАЛІНУ ЗА РЕАКЦІЄЮ З НОВИМ АЗОБАРВНИКОМ – ПОХІДНИМ ТЕОФІЛІДИНУ<br><i>Баярка С.В., Карпушина С.А.</i> .....                                    | 206 |
| ПОШУК БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ СПОЛУК В РЯДІ КАРБОНІЛВМІСНИХ 1,2,4-ТРИАЗОЛІВ<br><i>Борисенко Н.М., Губенко І.Я.</i> .....                                                                                                        | 207 |
| ОЦІНКА ВЗАЄМОДІЇ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ, ЩО ЗДІЙСНЮЄТЬСЯ ЗА УЧАСТЮ ФЕРМЕНТІВ ЦИТОХРОМУ P450 – В РАМКАХ СЕКЦІЇ ХІМІЧНІ ПРЕПАРАТИ В БІОЛОГІЇ ТА МЕДИЦИНІ<br><i>Валіводзь І.П., Ларіонов В.Б., Головенко М.Я.</i> .....            | 208 |
| ВПЛИВ КАЛІКС[4]АРЕНІВ C-107 ТА C-1130 НА Na <sup>+</sup> , K <sup>+</sup> -АТФазу ПЛАЗМАТИЧНОЇ МЕМБРАНИ ТА СКОРОТЛИВУ АКТИВНІСТЬ МІОМЕТРІЯ<br><i>Векліч Т.О., Цимбалюк О.В.</i> .....                                       | 211 |
| ФУНГІЦИДНІ ВЛАСТИВОСТІ КОМПОЗИТНИХ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ КОМПОНЕНТІВ З ЦЕОЛІТОМ<br><i>Головань А.П., Сіора І.В., Крупська Т.В.</i> .....                                                                 | 215 |

|                                                                                                                                                                                                                                         |     |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| ЦИТОТОКСИЧНА ДІЯ СПОЛУК РУТЕНІЮ<br><i>Каплюк Н.А., Жолобак Н.М.</i> .....                                                                                                                                                               | 216 |
| ГІПОГЛІКІМІЧНА АКТИВНІСТЬ ПОХІДНИХ В РЯДУ 6-(4-ЕТИЛ-5-МЕРКАПТО-4Н-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ІЛ)ПІРИМІДИН-2,4(1Н,3Н)-ДІОНІВ<br><i>Карпенко Ю.В.</i> .....                                                                                          | 218 |
| ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОТИГРИБКОВОЇ ТА АНТИБАКТЕРІАЛЬНОЇ АКТИВНОСТІ 5-АРИЛСУЛЬФАНИЛ-, 5-АРИЛСУЛЬФОНІЛ-1,3-ОКСАЗОЛІВ ТА ОКСАЗОЛО-5-СУЛЬФОНАМІДІВ<br><i>Качаєва М.В., Година Д.М., Шульга Ю.В., Северін О.О., Пільо С.Г., Броварець В.С.</i> ..... | 219 |
| ІНГІБІТОР НАТРІЄВОЇ ПОМПИ ПЛАЗМАТИЧНОЇ МЕМБРАНИ - КАЛІКС[4]АРЕН С-1220 ПІДВИЩУЄ КОНЦЕНТРАЦІЮ $\text{Ca}^{2+}$ У МІОЦИТАХ МАТКИ<br><i>Малюк О.В., Векліч Т.О.</i> .....                                                                  | 223 |
| 2Н-ХРОМЕН-3-КАРБОКСАМІДИ ЯК ПЕРСПЕКТИВНІ БІОЛОГІЧНО АКТИВНІ РЕЧОВИНИ<br><i>Матійчук Ю.Е., Хома О.Я., Драпак І.В.</i> .....                                                                                                              | 227 |
| ЕФЕКТИВНІСТЬ НАНОЧАСТИНОК МІДІ ТА СРІБЛА ЯК АНТИБАКТЕРІАЛЬНИХ ПРЕПАРАТІВ<br><i>Муквич В.Ю., Пшеничний Р.М.</i> .....                                                                                                                    | 228 |
| МОДЕЛЮВАННЯ МЕХАНІЗМІВ ВЗАЄМОДІЇ АЛЬБУМІНУ З КОМПЛЕКСНИМИ СПОЛУКАМИ Pt(II)<br><i>Перико Н.Ю., Дем'яненко Є.М., Журавський С.В., Сігарьова Н.В., Юр'єва К.А., Сидоренко М.В.</i> .....                                                   | 229 |
| СИНЕРГІЯ КРЕМНЕЗЕМУ ТА ДОПОМІЖНИХ РЕЧОВИН У СКЛАДІ ГЕЛЕПОДІБНИХ ДІСТИЧНИХ ДОБАВОК СОРБЦІЙНОЇ ДІЇ<br><i>Сіора І.В., Геращенко І.І.</i> .....                                                                                             | 231 |
| СИНЕРГЕТИЧНИЙ ВПЛИВ L – КАРНІТИНУ І L – АРГІНІНУ У РЕГУЛЯЦІЇ МЕТАБОЛІЧНИХ ПРОЦЕСІВ ЛЮДСЬКОГО ОРГАНІЗМУ<br><i>Скорейко Р.С., Скорейко Н.Т.</i> .....                                                                                     | 233 |
| ЗАСТОСУВАННЯ СИНТЕТИЧНИХ ПОХІДНИХ ПІРИМІДИНУ ДЛЯ ІНТЕНСИФІКАЦІЇ ПРОЦЕСУ ФОТОСИНТЕЗУ У РОСЛИН СОРГО ЦУКРОВОГО<br><i>Циганкова В.А., Василенко Н.М., Андрусевич Я.В., Копіч В.М., Пільо С.Г., Броварець В.С.</i> ...                      | 234 |
| ВИЗНАЧЕННЯ ВІДНОВЛЮВАЛЬНОЇ ЗДАТНОСТІ ЕКСТРАКТІВ ПРОПОЛІСУ З ВИКОРИСТАННЯМ ІОНІВ ФЕРУМУ<br><i>Шевчук К.Р., Гордєєва І.О., Куц О.В., Шендрік О.М.</i> .....                                                                               | 236 |

|                                                                                                                                                                                                                                                       |            |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| <b>ОРГАНІЧНА ХІМІЯ, ХІМІЯ ВИСОКОМОЛЕКУЛЯРНИХ СПОЛУК.....</b>                                                                                                                                                                                          | <b>238</b> |
| APPLICATION OF COMPOSITE MATERIALS BASED ON MANGANESE AND TITANIUM OXIDES FOR THE DEGRADATION OF POLYETHYLENE FILMS<br><i>Gayuk N.V., Tsekhmistrenko S.I., Mykhailenko O.V., Yakhnovska O.V.</i> .....                                                | 239        |
| HYDROLYSIS AND REDUCTIVE CYCLIZATION ETHYL 5-CHLORO-4-(4-NITROPYRROLIDIN-3-YL)PYRROLE-3-CARBOXYLATES<br><i>Dorokhov V.I., Grozav A.N., Chornous V.A., Vovk M.V.</i> .....                                                                             | 241        |
| REACTION OF SOME CYCLIC DIENES WITH 2-ARYL-1,4-BENZOQUINONES<br><i>Martyak R.L., Filitovych I.D., Kinzhybalov V.V., Obushak M.D.</i> .....                                                                                                            | 242        |
| PHYSICOCHEMICAL CHARACTERISTICS OF 6,6-DIFLUOROBICYCLO[3.2.0]HEPTANE DERIVATIVES<br><i>Moroz, B. Melnykov K.P., Holovach S., Filatov A.A., Grygorenko O.O.</i> .....                                                                                  | 243        |
| SYNTHESIS OF AZO DYES BASED ON DIMEDONE AND COMPARATIVE STUDY OF ITS PHOTOINDUCED ISOMERIZATION<br><i>Oliinyk A.O., Ovdenko V.M.</i> .....                                                                                                            | 244        |
| DIALKYL N-ALKOXY-N-(N'-ARYL(ALKYL)CARBAMOYL)PHOSPHORAMIDATES AND DIALKYL N-ALKOXY-N-(4-TOLUENESULFONYL)PHOSPHORAMIDATES. SYNTHESIS AND STRUCTURE<br><i>Shtamburg V.G., Klots E.A., Kravchenko S.V., Anishchenko A.A., Shishkina S.V., Mazepa A.V.</i> | 245        |
| SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF ACRYLIC PRESSURE-SENSITIVE ADHESIVES<br><i>Slisenko O.V.</i> .....                                                                                                                                                  | 247        |
| DESIGN AND BIOLOGICAL ACTIVITY OF TRIAZOLE-NAPHTHALIMIDE HYBRID COMPOUNDS<br><i>Slivka M.V., Korol N.I., Pallah O.V.</i> .....                                                                                                                        | 248        |
| SYNTHESIS OF 2-TRIFLUOROMETHYLPYRAZOLO[1,5-A]PYRIMIDINE CARBOXYLIC ACID<br><i>Tolkunov A.S., Tolkunov V.S., Smirnova O.V., Tolkunov S.V.</i> .....                                                                                                    | 250        |
| MODIFICATION OF FIRE PROTECTION PAINTS WITH NANOGRAFITES<br><i>Vakhitov R.A., Sholohon V.I., Taran N.A., Kalafat K.V. Bessarabov V.I.</i> .....                                                                                                       | 252        |
| СИНТЕЗ ІНДОЛ-3-АЦЕТАМІДУ АЛАНІНУ В УМОВАХ ІНВЕРСІЙНОГО ТРАНСФАЗНОГО КАТАЛІЗУ<br><i>Аніщенко В.М., Аніщенко Г.В.</i> .....                                                                                                                             | 253        |
| СОРБЦІЙНІ ВЛАСТИВОСТІ КОМПОЗИТНИХ ГІДРОГЕЛІВ НА ОСНОВІ ПОЛІАКРИЛАМІДУ ТА ХІТОЗАНУ<br><i>Бей І.М., Будзінська В.Л., Толстов О.Л.</i> .....                                                                                                             | 254        |
| НОВІ АДУКТИ УГІ НА ОСНОВІ 2-АЗИДО-3-АРИЛПРОПАНОВИХ КИСЛОТ ТА 2,2-ДИМЕТОКСИЕТАН-1-АМІНУ<br><i>Боднар М.І., Тупичак М.А., Походило Н.Т.</i> .....                                                                                                       | 255        |

|                                                                                                                                                                                                                   |     |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНА РИЦИНОВА ОЛІЯ В СИНТЕЗІ ПОЛІУРЕТАНІВ<br><i>Брикова О.М., Ахранович О.Р., Робота Л.П., Савельєв Ю.В.</i> .....                                                                                   | 256 |
| ФУНКЦІОНАЛІЗАЦІЯ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБОК ШЛЯХОМ ПРИЩЕПЛЕННЯ ПОЛІМЕРНИХ ШТОК ДЛЯ СТВОРЕННЯ ГІБРИДНИХ МАТЕРІАЛІВ ІЗ «РОЗУМНИМИ» ВЛАСТИВОСТЯМИ<br><i>Бугайчук Н.Ю., Чеботар А.С., Стецишин Ю.Б.</i> .....              | 258 |
| ВПЛИВ БУДОВИ ПОЛІМЕРНИХ ІОННИХ РІДИН ІОНЕНОВОГО ТИПУ НА ІОННУ ПРОВІДНІСТЬ<br><i>Буркевич Б.В., Потапчук М.О., Свердліковська О.С.</i> .....                                                                       | 259 |
| ОЛІГОЕТЕРГУАНІДИНІЄВІ КОМПЛЕКСИ ЗІ СРІБЛОМ НА ОСНОВІ АЛКІЛЗАМІСНИХ ОЛІГОМЕРІВ ТА ЇХ АНТИБАКТЕРІАЛЬНА АКТИВНІСТЬ<br><i>Вортман М.Я., Коптєва Ж.П., Коптєва Г.С., Лемешко В.М., Шевченко В.В.</i> .....             | 261 |
| РІДИННОФАЗНЕ ОКИСНЕННЯ АЛКІЛАРЕНІВ ОЗОНОМ<br><i>Галстян А.Г., Сидорук С.В., Волинець А.О.</i> .....                                                                                                               | 263 |
| ВИКОРИСТАННЯ БЕНЗЕНУ ЯК РОЗЧИННИКА ДЛЯ СИНТЕЗУ (1-ПЕНТИЛ)ТРИФЕНІЛФОСФОНІЙ БРОМІДУ<br><i>Горобей К.М., Листван В.В.</i> .....                                                                                      | 265 |
| ТЕРМОСТІЙКІ ПІНИ НА ОСНОВІ ПОЛІЦІАНУРАТІВ<br><i>Гусакова К.Г., Старостенко О.М., Шульженко Д.М., Файнлейб О.М., Гранде Д.</i> .....                                                                               | 266 |
| ВПЛИВ ПРИРОДИ КИСЛОТИ НА КАТАЛІТИЧНУ АКТИВНІСТЬ КЛІНОПТИЛОЛІТУ В РЕАКЦІЇ ГЛІЦЕРИНУ З ОЦТОВОЮ КИСЛОТОЮ<br><i>Давтян А.С., Левченко О.О., Камалов Г.Л.</i> .....                                                    | 269 |
| MALDI-TOF МАС-СПЕКТРОМЕТРИЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ОСНОВ ШИФФА ГОСИПОЛУ<br><i>Дикун О.М., Аніщенко В.М., Кузема П.О., Редько А.М., Рибаченко В.І.</i> .....                                                                | 270 |
| АМІДУВАННЯ 2-ЕТИГЕКСАНОВОЇ КИСЛОТИ МОНОЕАНОЛАМІНОМ У ПРИСУТНОСТІ ГОМОГЕННИХ КАТАЛІЗАТОРІВ<br><i>Захарко Н.О., Мельник С.Р.</i> .....                                                                              | 272 |
| ВИКОРИСТАННЯ БІОРОЗКЛАДНИХ ПОЛІМЕРІВ В СУЧАСНОМУ СВІТІ<br><i>Зимнік Д.В., Віленський В.О.</i> .....                                                                                                               | 273 |
| СТВОРЕННЯ МОДИФІКОВАНИХ ЕПОКСИУРЕТАНОВИХ КОМПОЗИЦІЙ ЯК СПОЛУЧНИХ ДЛЯ РІЗНОРІДНИХ МАТЕРІАЛІВ<br><i>Зінченко О.В., Єжова В.Д., Толстов О.Л.</i> .....                                                               | 274 |
| СИНТЕЗ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ІЗОЦІАНАТНОГО СПОЛУЧНОГО, МОДИФІКОВАНОГО ЕПОКСИДНИМИ ОЛІГОМЕРАМИ<br><i>Зінченко О.В., Толстов О.Л.</i> .....                                                                                | 276 |
| КІНЕТИЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ СИСТЕМИ «БЕНЗОЙНА КИСЛОТА–ЕПІХЛОРГІДРИН– $\text{Me}_4\text{NOOSPh}$ »: ВПЛИВ СПІВВІДНОШЕННЯ КОМПОНЕНТІВ<br><i>Казаков О.А., Швед О.М., Бахалова Є.А., Діденко Н.О., Розанцев Г.М.</i> ..... | 277 |

|                                                                                                                                |     |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ПЕРЕТВОРЕННЯ КОМПОНЕНТІВ ДЕРЕВИНИ У ПРОЦЕСІ ВИРОБНИЦТВА ПАЛИВНИХ ПЕЛЕТ                                          |     |
| <i>Куленко О.А., Криворучко А.В.</i>                                                                                           | 278 |
| ОЦІНКА ЕНЕРГІЇ ШИРИНИ ЗАБОРОНЕНОЇ ЗОНИ ТРИБРОМІДУ 2- (БРОМОМЕТИЛ)-5-ОКСО-2,3-ДИГІДРО-5Н-ТІАЗОЛО[2,3- <i>b</i> ]ХІНАЗОЛІН-10-ІЮ |     |
| <i>Кут Д.Ж., Кут М.М., Погодін А.І., Онисько М.Ю.</i>                                                                          | 280 |
| СИНТЕЗ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ БІОЛОГІЧНОЇ АКТИВНОСТІ АМІНОАЛКІЛЗАМІЩЕНИХ 1,4 - БЕНЗОДІАЗЕПІН-2-ОНІВ                                    |     |
| <i>Літвінова В.Е., Шевченко О.В.</i>                                                                                           | 281 |
| СИНТЕЗ ТА ОЦІНКА АНТИОКСИДАНТНОЇ АКТИВНОСТІ 3-АРИЛ-5,6,7,8-ТЕТРАГІДРОТІАЗОЛО[3,2- <i>a</i> ][1,3]ДІАЗЕПІНІВ                    |     |
| <i>Лукашевич Б., Примачук О., Шандрук Р., Кадикало Е., Салієва Л., Сливка Н.</i>                                               | 282 |
| СИНТЕЗ 7-ЗАМІЩЕНИХ ПОХІДНИХ 2-АЗАБІЦИКЛО[4.2.0]ОКТАНУ                                                                          |     |
| <i>Лук'яненко С.Ю., Носик Д.А., Гранат Д.С., Козицький А.В., Юрченко О.О., Григоренко О.О.</i>                                 | 284 |
| ТРАНСЕСТЕРИФІКАЦІЯ ТРИГЛІЦЕРИДІВ СПИРТАМИ C <sub>1</sub> -C <sub>3</sub> НА ЦЕОЛІТАХ                                           |     |
| <i>Маласняк Р.М., Мельник Ю.Р.</i>                                                                                             | 285 |
| 3-ФУРАН-2-ІЛ-7Н-[1,2,4]ТРИАЗОЛО[3,4-В][1,3,4]ТІАДІАЗИНИ ЯК ПЕРСПЕКТИВНІ АНТИСТАФІЛОКОКОВІ АГЕНТИ                               |     |
| <i>Мирко І.І.</i>                                                                                                              | 286 |
| НОВА ДОМІНО РЕАКЦІЯ ЕЛЕКТРОФІЛЬНОГО БРОМУВАННЯ-ОКИСНЕННЯ                                                                       |     |
| <i>Нефедов Є.А., Хропот О.С., Бригас А.О., Матійчук В.С.</i>                                                                   | 287 |
| ВПЛИВ ЛИМОННОЇ КИСЛОТИ І МАГНІТНОГО ПОЛЯ НА РЕОЛОГІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ГЕЛІВ АГАР-АГАРУ                                            |     |
| <i>Потапчук І.М., Дубровіна Л.В., Макаров А.С.</i>                                                                             | 288 |
| ОСОБЛИВОСТІ СИНТЕЗУ ІННОВАЦІЙНИХ ПОЛІМЕРНИХ ІОННИХ РІДИН                                                                       |     |
| <i>Потапчук М.О., Свердіковська О.С.</i>                                                                                       | 292 |
| ЗАКОНОМІРНОСТІ ЕСТЕРИФІКАЦІЇ ДИСТИЛЯТУ ВІЛЬНИХ ЖИРНИХ КИСЛОТ Н-БУТИЛОВИМ СПИРТОМ                                               |     |
| <i>Роговий Ю.О., Мельник С.Р.</i>                                                                                              | 294 |
| СИНТЕЗ 3-МЕТИЛ-5-АРИЛФУРАН-2-КАРБОНОВИХ КИСЛОТ ТА ЇХНІ ПЕРЕТВОРЕННЯ                                                            |     |
| <i>Садило К.А., Смаліус А.В., Матійчук В.В., Горак Ю.І., Обушак М.Д.</i>                                                       | 295 |
| ОТРИМАННЯ НЕНАСИЧЕНИХ СПОЛУК НА ОСНОВІ АЛКІЛІДЕНФОСФОРАНІВ                                                                     |     |
| <i>Сергійчук О.О., Листван В.В.</i>                                                                                            | 296 |
| РЕОЛОГІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ВУГЛЕВОДНЕВИХ СМОЛ C <sub>9</sub> ОТРИМАНИХ ДИСПЕРСІЙНОЮ ОЛІГОМЕРИЗАЦІЄЮ                                |     |
| <i>Субтельний Р.О., Томков Т.О., Сціра В.О., Баліцький І.Г.</i>                                                                | 297 |



|                                                                                                                                                                                           |     |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| ОСОБЛИВОСТІ ПОВЕДІНКИ ГІДРОГЕЛІВ НА ОСНОВІ НАТРІЮ АЛЬГІНАТУ<br><i>Тимчук А.Ф., Олейніков М.І.</i> .....                                                                                   | 296 |
| ЗРУЧНИЙ СПОСІБ СИНТЕЗУ ЗАМІЩЕНИХ 2-ХЛОРБЕНЗОТІАЗОЛІВ<br><i>Толкунов В.С., Толкунов А.С., Смирнова О.В., Толкунов С.В.</i> .....                                                           | 299 |
| ВИСОКОМОДУЛЬНІ ПОЛІМЕРНІ МАТЕРІАЛИ МЕДИЧНОГО ПРИЗНАЧЕННЯ НА<br>ОСНОВІ ПОЛІФУНКЦІОНАЛЬНИХ АКРИЛАТІВ<br><i>Толстов О.Л.</i> .....                                                           | 301 |
| ВПЛИВ ТИПУ ОЛІГОМЕРНОЇ СКЛАДОВОЇ НА ВЛАСТИВОСТІ УРЕТАНАКРИЛАТІВ<br>КОНСТРУКЦІЙНОГО ПРИЗНАЧЕННЯ<br><i>Толстов О.Л.</i> .....                                                               | 303 |
| КРЕМНІЙОРГАНІЧНІ УЩІЛЬНЮВАЧІ НА ОСНОВІ ПОЛІАЛКІЛСИЛОКСАНІВ ТА<br>ПОЛІФУНКЦІОНАЛЬНИХ ЕЛЕМЕНТОРГАНІЧНИХ ДОМІШОК<br><i>Толстов О.Л.</i> .....                                                | 304 |
| ДОСЛІДЖЕННЯ ІНІЦІЙОВАНОЇ ПЕРОКСИДАМИ ОЛІГОМЕРИЗАЦІЇ<br>ВУГЛЕВОДНЕВИХ ФРАКЦІЙ C5 І C9 - ПОБІЧНИХ ПРОДУКТІВ ВИРОБНИЦТВА<br>ЕТИЛЕНУ<br><i>Федотова О.Б., Романів В.П., Дзіняк Б.О.</i> ..... | 305 |
| МОДИФІКАЦІЯ БІСАМІДІВ УГІ НА ОСНОВІ $\alpha,\beta$ -НЕНАСИЧЕНИХ АЛЬДЕГІДІВ<br>ШЛЯХОМ МІКРОХВИЛЬОВОГО АЗИДУВАННЯ<br><i>Циганков О.В., Верещак В.О., Фадєєва С.М., Чебанов В.А.</i> .....   | 306 |
| ФОРМУВАННЯ ПОЛІМЕРНИХ НАНОШАРІВ ІЗ СПЕЦІАЛЬНИМИ ВЛАСТИВОСТЯМИ<br>НА ПОВЕРХНІ ПОЛІПРОПІЛЕНУ<br><i>Цикунков С.С., Носова Н.Г., Самарик В.Я.</i> .....                                       | 307 |
| ДИГІДРОАЗОЛОПІРИМІДИНИ: КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ ВИВЧЕННЯ ПРОЦЕСУ<br>ОКИСНЕННЯ<br><i>Шшикіна М.О., Десенко С.М.</i> .....                                                                         | 308 |
| КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСУ ОКИСНЕННЯ<br>ДИГІДРОАЗОЛОПІРИДИНІВ<br><i>Шшикіна М.О., Десенко С.М.</i> .....                                                                        | 310 |
| ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНІ ТА БІОСУМІСНІ ІОННІ РІДИНИ. ФУНКЦІОНАЛІЗАЦІЯ ТА<br>ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ<br><i>Шумейко О.Є., Карпичев Є.А., Бураков М.І.</i> .....                                | 312 |

|                                                                                                                                                                                                                     |            |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| <b>АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ ХІМІЧНОЇ ОСВІТИ.....</b>                                                                                                                                                                      | <b>314</b> |
| ОСВІТНЯ ОНЛАЙН-ПЛАТФОРМА EDUCAPLAY ЯК ЕФЕКТИВНИЙ ІНСТРУМЕНТ ІНТЕРАКТИВНОГО НАВЧАННЯ З ІГРОВИТИ ЕЛЕМЕНТАМИ<br><i>Бондарчук Т.О.</i> .....                                                                            | 315        |
| ЕФЕКТИВНЕ ВИКОРИСТАННЯ ІННОВАЦІЙНИХ ПЕДАГОГІЧНИХ ТЕХНОЛОГІЙ ПРИ ФОРМУВАННІ У ЗДОБУВАЧІВ ОСВІТИ КЛЮЧОВИХ КОМПЕТЕНОСТЕЙ ПРИ ВИВЧЕННІ ХІМІЇ<br><i>Мартинюк Г.В., Мартинюк І.В., Гакало О.І., Лапкевич Г.М.</i> .....   | 316        |
| ДОСВІД ВПРОВАДЖЕННЯ ДИСЦИПЛІНИ «ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ ВОДНИХ І НЕВОДНИХ РОЗЧИНІВ» У НАВЧАЛЬНИЙ ПРОЦЕС ЗДОБУВАЧІВ-ХІМІКІВ<br><i>Перлова О.В., Солдаткіна Л.М.</i> .....//.....                                           | 318        |
| МЕТОДИ ЕФЕКТИВНОГО КОНСПЕКТУВАННЯ НА ЗАНЯТТЯХ МЕДИЧНОЇ ТА БІОЛОГІЧНОЇ ХІМІЇ<br><i>Пилипенко О.О.</i> .....                                                                                                          | 319        |
| ЗАСТОСУВАННЯ ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ ГРИ «WORDLE» ПРИ ВИВЧЕННІ ХІМІЧНОЇ ТЕРМІНОЛОГІЇ<br><i>Ткач В.В., Кушнір М., Підлубна С.І.</i> .....                                                                                    | 320        |
| ЕКОЛОГІЧНА ГЕНЕТИКА, ГЕНОТОКСИЧНІСТЬ ТА МУТАГЕНЕЗ ЯК НЕОБХІДНИЙ КОМПОНЕНТ ПІДГОТОВКИ СТУДЕНТІВ ХІМІЧНИХ СПЕЦІАЛЬНОСТЕЙ<br><i>Ткач В.В., Морозова Т.В., О'Ніл І., ді Машикареньяш Гайвау І., Іванушко Я.Г.</i> ..... | 321        |
| МЕЙКЕРСТВО ТА DІY-ЛАБОРАТОРІЇ У ШКІЛЬНОМУ КУРСІ ХІМІЇ<br><i>Яцько А.О., Шпирка З.М.</i> .....                                                                                                                       | 322        |

## Авторський покажчик

### A

Aksimentyeva O.I., 74  
Andriyko L.S., 124  
Anishchenko A.A., 245  
Avramenko V., 192

### B

Baiurka S.V., 194  
Barvinchenko V.M., 195  
Belikov K., 8, 72  
Berezovskaya I.V., 128  
Bessarabov V.I., 252  
Bityutskyy V.S., 6  
Bryleva K., 72  
Bunina Z., 72  
Buvaylo E.A., 136

### C

Cherniakova M.Yu., 8  
Chornous V.A., 241  
Coderch C., 197

### D

Davydenko Y.M., 126  
Demchenko P., 61  
Demianenko E., 192  
Deryło-Marczewska A., 58  
Dorokhov V.I., 241  
Dotsenko V.P., 128  
Dutková E., 69  
Dyachenko A., 58

### E

Efimov P.V., 127  
Efimova N.V., 139  
Efryushina N.P., 128  
Eremenko A.M., 131

### F

Fijałkowski P., 193  
Filatov A.A., 243  
Filitovych I.D., 242  
Frolova E.K., 131  
Furtat I., 192, 193

### G

Galaburda M., 58  
Gayuk N.V., 239  
Goncharuk O., 62  
Gorbenko G.P., 199  
Gorbyk P.P., 64  
Grozav A.N., 241  
Grygorenko O.O., 243  
Grygorieva O.V., 200

### H

Haraniuk P., 65  
Hodlevskiy H., 193  
Holovach S., 243  
Horak Yu., 130, 135  
Horbenko Y.Y., 74  
Horyn A., 61, 65  
Hudyma A., 193

### I

Ivanov V.I., 67

### K

Kalafat K.V., 252  
Kapitula A.V., 200  
Karpushyna S.A., 194  
Kazakova O.O., 195  
Khomenko O.V., 128  
Khomych V.O., 131  
Kinzhybalo V.V., 242  
Klenina O.V., 197  
Klots E.A., 245  
Klymenko N.Yu., 59  
Kokozay V.N., 136  
Kolomys O.F., 131  
Korohodska A., 133  
Korol N.I., 248  
Kostiuk R., 130  
Kovalyuk M.Z., 67  
Kozakevych R., 192  
Krasnopyorova A.P., 139  
Kravchenko S.V., 245  
Krupska T.V., 59  
Kulik T.V., 10  
Kurinna N., 202  
Kustovska A.V., 200  
Kusyak A.P., 64

### L

Lemeshko V., 193  
Liaskovska M.R., 60  
Lipkovska N.O., 195  
Lonin D.O., 199

### M

Maga I.M., 9  
Malovytsia U.K., 199  
Márquez-Cantudo L., 197  
Martyak R.L., 242, 337  
Matkovsky A.K., 200, 202  
Mazepa A.V., 245  
Mechyk P.O., 64  
Melnik I.V., 69  
Melnikov K.P., 243  
Moroz, B., 243  
Murlanova T., 192, 193  
Mykhailenko O.V., 239

### N

Nastasiienko N.S., 10

### O

Obushak M.D., 130, 135, 242  
Oliinyk A.O., 244  
Ovdenko V.M., 244

### P

Paientko V.V., 200, 202  
Palianytsia B.B., 10  
Paliy A., 72  
Pallah O.V., 248  
Pascual-Teresa B., 197  
Pavlenko V.A., 126  
Petranovska A.L., 64  
Petrik I.S., 131  
Polishchuk S.A., 204  
Polishchuk V.M., 204  
Pomastowski P., 192, 193  
Proskurina V., 133  
Pryshchepa O., 192, 193  
Pyshna D.B., 135

## R

Rafińska K., 193  
Rakhmatullaeva L.B., 124  
Rol N.V., 204  
Romaka L., 61, 65, 328  
Romaka V., 61, 65, 328  
Rudneva S., 133

## S

Sakhnenko M., 133  
Samchenko K., 62  
Samchenko Y., 62  
Semeshko O.Y., 69  
Shcheglov O.D., 64  
Shevchenko D.S., 135  
Shevchenko V., 193  
Shishkina S.V., 245  
Sholohon V.I., 252  
Shtamburg V.G., 245  
Slisenko O.V., 247  
Slivka M.V., 248  
Smarsly B., 192, 193  
Smirnova N.P., 131  
Smirnova O.V., 250  
Sobechko I.B., 130, 135  
Stadnyk Yu., 61, 65, 328

## T

Tagaev I.A., 124  
Taran N.A., 252  
Terebilenko K.V., 128  
Tkachuk I.G., 67  
Tolkunov A.S., 250  
Tolkunov S.V., 250  
Tolkunov V.S., 250  
Tomina V.V., 69  
Toshburiev Sh.O., 124  
Trusova V.M., 199  
Tsekhmistrenko S.I., 6, 204, 239  
Turov V.V., 59

## V

Vakhitov R.A., 252  
Vakuliuk P., 192, 193  
Varchenko V., 72  
Vashchenko O.V., 8  
Vassilyeva O.Y., 136  
Vortman M., 193  
Vovk M.V., 241  
Vus K.O., 199

Vynohradov O.S., 126

## W

Wei Q., 59  
Wiśniewska M., 202

## Y

Yakhnovska O.V., 239  
Yang W., 59  
Yukhno G.D., 139

## Z

Zavgorodnii A., 72  
Zhelavska Y., 133  
Zheng J., 59  
Zhytniakivska O.A., 199  
Zhytskyi A.K., 74

## A

Авдєєв С.В., 49  
Авдєєва О.Ю., 49  
Акинай Ю., 53  
Аксiмeнтъєва О. І., 33  
Александрова Д.І., 17  
Амiрханов В.М., 158  
Андрєєва О.Р., 76  
Андрiйко Л.С., 120  
Андрусевич Я.В., 234  
Анiщенко В.М., 253, 270  
Анiщенко Г.В., 2537  
Ахранович О.Р., 256

## Б

Бакуменко А.-Д. В., 159  
Балiцький І.Г., 297  
Барруш А.І., 50  
Басюк В.О., 12  
Баумер В.М., 188  
Бахалова Є.А., 277  
Баюрка С.В., 206  
Бей І.М., 254  
Бирта Г.О., 100  
Бiдовська К.В., 12  
Блажєєвський М.Є., 23  
Блашко Н.М., 140  
Боднар М.І., 255  
Бойчишин Л.М., 147  
Бондарчук Т.О., 315  
Борисенко М., 154  
Борисенко Н.М., 207  
Борова М., 77

Борук С.Д., 13  
Братичак М.М., 95  
Бригас А.О., 287  
Брикова О.М., 256  
Броварець В.С., 219, 234  
Бугайчук Н.Ю., 258  
Буденкова Н.М., 165  
Будзiнська В.Л., 254  
Бузіашвілі А., 77  
Буклiв Р.Л., 36  
Бураков М.І., 312  
Буркевич Б.В., 259

## В

Валiводзь І.П., 208  
Василенко Н.М., 234  
Василів Х.Б., 112  
Васильєв А.М., 46  
Веклiч Т.О., 211, 223  
Верещак В.О., 306  
Вiленська Л.М., 78  
Вiленський В.О., 78, 273  
Власенко Н.Є., 15, 55, 76  
Вовк О.М., 114  
Волинець А.О., 263  
Волкова Л.К., 143, 171  
Володимиров В.В., 84  
Волювач О.В., 182  
Воробець В.С., 38, 99  
Вортман М.Я., 261

## Г

Гаврилюк Н.А., 120  
Гакало О.І., 316  
Галстян А.Г., 263  
Гарсія Ж.Р., 51, 52, 54  
Геращенко І.І., 231  
Герцик О.М., 86  
Гетьман Є.І., 145  
Година Д.М., 219  
Головань А.П., 215  
Головатюк А.Ю., 147  
Головенко М.Я., 208  
Голубчик К.О., 159  
Горак Ю.І., 170, 295  
Горбик П.П., 87, 108, 167  
Гордєєва І.О., 236  
Горєлов Б.М., 120  
Горобей К.М., 265  
Горяча М., 169  
Гранат Д.С., 284  
Гранде Д., 266

Гребенюк А.Г., 90, 185  
Григоренко О.О., 284  
Грицаєнко Ю.А., 100  
Губенко І.Я., 207  
Гулай Л.Д., 177  
Гуровий Д.В., 189  
Гусакова К.Г., 266

## Д

Давтян А.С., 269  
Данилюк І.В., 92  
Данілов М.О., 179  
Дармонук О.Т., 148  
Дем'яненко Є.М., 185, 229  
Денисенко С., 77  
Денисюк Р.О., 40, 104  
Десенко С.М., 308, 309  
Дзіняк Б.О., 305  
Дикун О.М., 270  
Димитриаді Д.Г., 150  
Дитинченко І.М., 53  
Діденко Н.О., 277  
Драпак І.В., 227  
Дрехліс Є.Р., 15  
Дубровін І.В., 87  
Дубровіна Л.В., 288  
Дударко О.А., 93  
Дуднік О., 154  
Дутка В.С., 151  
Дутка Ю.В., 151  
Дяченко А., 99, 154

## Є

Єгорова А.В., 17  
Єжова В.Д., 274  
Ємець А., 77

## Ж

Жолобак Н.М., 216  
Жох О.О., 156  
Журавський С.В., 229  
Журіна Н.Ю., 33

## З

Замковий Н.О., 20  
Заремба В., 169  
Засадна В.Т., 36  
Захарко Н.О., 272  
Захаров А.В., 113  
Зелінський А., 44, 169  
Земке В.М., 95

Зимнік Д.В., 273  
Зінченко О.В., 274  
Золотаренко Ан.Д., 120  
Золотарьов К.В., 189

## І

Іванушко Я.Г., 50, 51, 52,  
54  
Івченко М.М., 21  
Іщенко О., 154

## К

Кавалжи О.М., 22  
Кадикало Е., 282  
Казаков О.А., 277  
Каличак Я.М., 150  
Камалов Г.Л., 269  
Камінський О.М., 40  
Каплюк Н.А., 216  
Карпенко Ю.В., 218  
Карпівчєв Є.А., 312  
Карпушина С.А., 100, 206  
Каряка Н.С., 158  
Качасва М.В., 219  
Кашуцький С.М., 17  
Кичкирук О.Ю., 12  
Кіосє Т.О., 159  
Кіріяк Г.В., 17  
Кітченко А.В., 162  
Коваленко І.В., 15, 55, 76  
Ковальська О.В., 23  
Козакєвич Р.Б., 25,  
Козицький А.В., 284  
Колбасов Г.Я., 38, 99, 179  
Комащенко Є.О., 96  
Кондрашев П.В., 97  
Коник М.Б., 163  
Коновалова О.Ю., 32  
Конопельник О. І., 33  
Копіч В.М., 234  
Коптева Г.Є., 261  
Коптева Ж.П., 261  
Кормош Ж.О., 51, 52, 53,  
54  
Корній С.А., 180  
Корчик Н.М., 165  
Крамар А.С., 99  
Кривонігов С.І., 114  
Криворучко А.В., 278  
Кристат Н.О., 22  
Кричковська Л.В., 100  
Кроніковський О.І., 28

Крупська Т.В., 215  
Кузєма П.О., 30, 270  
Куленко О.А., 278  
Куліш В.Г., 13  
Кусяк А., 108  
Кусяк Н.В., 167  
Кут Д.Ж., 280  
Кут М.М., 280  
Кучеренко В.О., 118, 174  
Кучерук С.В., 40  
Кушнір М.В., 50, 51, 52,  
53, 54  
Куш О.В., 236

## Л

Лагута І.В., 30  
Лагутова А.Д., 159  
Лапкевич Г.М., 316  
Ларіонов В.Б., 208  
Лєвченко О.О., 269  
Лємєшко В.М., 261  
Листван В.В., 53, 265, 296  
Литвин В.А., 110  
Литвин Н.С., 32  
Лівіцька О.В., 96  
Ліннік О.П., 99  
Літвінова В.Е., 281  
Лобанов В.В., 185  
Лозова М.В., 104  
Луганська О.В., 51, 52, 54  
Лук'яненко С.Ю., 284  
Лукашевич Б., 282  
Лучинський Н.В., 168  
Ляшенко Д.Ю., 102

## М

Майстат М.С., 113  
Макаров А.С., 288  
Маланич Г.П., 104  
Маласняк Р.М., 285  
Малюк О.В., 223  
Маринін А.І., 120  
Марків Ю.Б., 33  
Маркітан О.В., 106  
Мартинюк Г. В., 33, 316  
Мартинюк І.В., 316  
Марцинко О.Е., 176  
Марчук І.Є., 36  
Марчук О.В., 140  
Матійчук В.В., 287, 295  
Матійчук Ю.Е., 227

Машкареньяш Гайвау І.О.,  
50, 51, 52, 54  
Медик І.А., 38  
Мельник І.В., 167  
Мельник С.Р., 272, 294  
Мельник Ю.Р., 187, 285,  
Мечик П., 108  
Микитин І.М., 20  
Мирко І.І., 286  
Мисіна О.І., 165  
Михалічко В.М., 108  
Михалюк А.П., 28  
Мідяна Г.Г., 151  
Монтейру М.Ж., 51, 52, 54  
Мороз М.В., 177  
Морозова Т.В., 50, 51, 52,  
54, 321  
Муквич В.Ю., 228  
Мусієнко Д.Р., 110

## Н

Нефедов Є.А., 287  
Ничипорук Г., 150, 169  
Ніжанковський С.В., 114  
Носик Д.А., 284  
Носова Н.Г., 307

## О

О'Ніл І., 51, 52, 54  
Обушак М.Д., 170, 295  
Огороднік М.Я., 170  
Олексюк О.Ю., 40  
Олєйніков М.І., 298  
Олівейра С.С., 53  
Онисько М.Ю., 280  
Опейда Й.О., 143  
Опейда Л.І., 171  
Осокін Є.С., 168

## П

Павлюк В.В., 148  
Пайва Мартінш Ж.І., 50,  
51, 52, 54  
Пандяк Н.Л., 86  
Перлова О.В., 318  
Першко Н.Ю., 229  
Петрановська А., 108  
Петруша Ю.Ю., 41  
Пилипенко О.О., 319  
Пільо С.Г., 219, 234  
Піскач Л.В., 177

Погодін А.І., 280  
Поліщук Д.В., 42  
Потапчук І.М., 288  
Потапчук М.О., 259, 292  
Потаскалов В.А., 76  
Походило Н.Т., 255  
Пригунова О., 154  
Примачук О., 282  
Прокіпчук І.В., 20  
Прокопенко С.Л., 87  
Пшеничний Р.М., 228

## Р

Радіо С.В., 145  
Раскола Л.А., 159  
Рацька Н.Б., 112  
Редько А.В., 118, 174  
Редько А.М., 270  
Решетняк О.В., 44  
Рибаченко В.І., 270  
Робота Л.П., 256  
Роговий Ю.О., 294  
Розанцев Г.М., 277  
Роїк Н.В., 116, 173  
Ромака Л.П., 163  
Романів В.П., 305  
Ротару А., 183  
Русецький І.А., 179  
Рябінін С.О., 113

## С

Сабєрова В.О., 174  
Савельєв Ю.В., 256  
Садило К.А., 295  
Салієва Л., 282  
Самарик В.Я., 307  
Сахаренко Л.В., 176  
Свердліковська О.С., 259,  
292  
Свиридчук К.П., 167  
Северін О.О., 219  
Севостьянов С.В., 25  
Сейсенбаєва Г., 93  
Селезень А.О., 177  
Сергійчук О.О., 296  
Сидоренко М.В., 229  
Сидорко М.С., 44  
Сидорук С.В., 263  
Сігарьова Н.В., 229  
Сілва А.О., 51, 52, 53, 54  
Сіора І.В., 215, 231  
Сірик Ю.В., 114

Скорейко Н.Т., 233  
Скорейко Р.С., 233  
Скрипинець Ю.В., 17  
Сливка Н., 282  
Слободний В.А., 86  
Смалиус А.В., 295  
Смирнова О.В., 299  
Смілик В.О., 179  
Смітюк Н.М., 46, 47  
Собечко І.Б., 170  
Сободош Н.Й., 180  
Солдаткіна Л.М., 22, 318,  
Ставинська О.М., 30  
Стадник Ю.В., 163  
Стаднічук Н.О., 28  
Старостенко О.М., 266  
Степура О.М., 97  
Стецишин Ю.Б., 258  
Стеців Ю.А., 44  
Стрельцова О.О., 182  
Струтинська Н.Ю., 96  
Субтельний Р.О., 297  
Супрун Е.Ю., 47  
Сухоставська Н.М., 17  
Сціра В.О., 297

## Т

Тамаркіна Ю.В., 118, 174  
Тараненкова В.В., 189  
Татарчук Т.Р., 92  
Ташак М.С., 86  
Тимчук А.Ф., 298  
Тімошук О.О., 49  
Ткач В.В., 50, 51, 52, 53,  
54, 320, 321  
Толкунов А.С., 299  
Толкунов В.С., 299  
Толкунов С.В., 299  
Толстов О.Л., 254, 274,  
301, 303, 304  
Томашик В.М., 104  
Томков Т.О., 297  
Третьякова І.М., 183  
Трофимчук І.М., 116, 173  
Труш В.О., 158  
Тупичак М.А., 255,  
Тьортих В.А., 25

## Ф

Фадєєва С.М., 306  
Файнлейб О.М., 266  
Федина Л.О., 108



Федина М.Ф., 108  
Федорчук А.О., 108  
Федосова Н.М., 183  
Федотова О.Б., 305  
Фесенко Т.В., 30  
Філоненко О.В., 185  
Фоманюк С.С., 179  
Фролова І.Б., 118

## Х

Хавунко О.Ю., 171  
Хлопик О.П., 180  
Хома О.Я., 227  
Хора О.В., 120  
Хропот О.С., 287

## Ц

Циганков О.В., 306  
Циганкова В.А., 234  
Цикунков С.С., 307  
Цимбалюк О.В., 211

## Ч

Чала Д.Ю., 86  
Чебанов В.А., 306  
Чеботар А.С., 2588  
Чеботарська І.І., 17  
Черній В.Я., 183  
Черніченко О.В., 187  
Чокан Л.О., 176  
Чопик Н.В., 95  
Чучман М.Р., 112

## Ш

Шандрук Р., 282  
Шапошник А.М., 188  
Шарапов М.І., 189  
Швед О.М., 277  
Шевченко В.В., 261  
Шевченко О.В., 281  
Шевчук К.Р., 236  
Шендрик О.М., 236  
Шепарович Р.Б., 171  
Шийчук О.В., 92

Шишкіна М.О., 308, 309  
Шкварун І., 55  
Шпирка З.М., 148, 322  
Шульга Ю.В., 219  
Шульженко Д.М., 266  
Шумейко О.Є., 312

## Щ

Щеглов О., 108  
Щур Д.В., 120

## Ю

Юр'єва К.А., 229  
Юрченко О.О., 284

## Я

Ягодинець П.І., 50, 51, 52,  
53, 54  
Яцишин М.М., 44  
Яцків Ю.І., 163  
Яцько А.О., 322

**НАУКОВЕ ВИДАННЯ**

**IX ВСЕУКРАЇНСЬКА НАУКОВА КОНФЕРЕНЦІЯ**

**«АКТУАЛЬНІ ЗАДАЧІ ХІМІЇ:  
ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ПЕРСПЕКТИВИ»**

**ЗБІРНИК МАТЕРІАЛІВ КОНФЕРЕНЦІЇ**  
*(українською, англійською та польською мовами)*

*Комп'ютерне верстання*

*В.В.Листван, Н.В.Кусяк*

*Обкладинка*

*Д.Лядов*

**(9 квітня 2025 року)**

Міністерство  
освіти і науки  
України



Житомир  
2025