

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДОНЕЦЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТУСА

МАТЕРІАЛИ

**наукової конференції професорсько-викладацького складу,
наукових працівників і здобувачів наукового ступеня
за підсумками науково-дослідної роботи
за період 2015–2016 рр.
(15–18 травня 2017 р.)**

У двох томах

Том 2

ДонНУ імені Василя Стуса
Вінниця
2017

Редакційна колегія:

Головний редактор – Гринюк Р. Ф., д-р юрид. наук., професор.

Заступник головного редактора – Хаджинов І. В., д-р екон. наук., професор.

Відповідальний секретар – Радіо С. В., канд. хім. наук.

Члени редакційної колегії:

Ветров О. С.; Ніколюк П. К., д-р фіз.-мат. наук, професор; Жильцова С. В., канд. хім. наук, доцент; Велигодська А. К.; Кокорський В. Ф., канд. істор. наук, доцент; Ситар Г. В., канд. філол. наук, доцент; Залужна О. О., канд. філол. наук; Дороніна О. А., д-р екон. наук, професор; Амелічева Л. П., канд. юрид. наук, доцент; Латишев М. В., канд. наук з фіз. виховання і спорту, доцент; Додонов Р. О., д-р філос. наук, професор; Мартинець Л. А., канд. пед. наук, доцент; Нога І. В., канд. фіз.-мат. наук, доцент; Карягіна Н. О.; Алімова Т. В.

Матеріали наукової конференції професорсько-викладацького складу, наукових працівників і здобувачів наукового ступеня за підсумками науково-дослідної роботи за період 2015–2016 рр. (15–18 травня 2017 р.): у 2-х томах. Том 2. – Вінниця: Донецький національний університет імені Василя Стуса, 2017. – 188 с.

До другого тому увійшли матеріали секцій: педагогіка та фізичне виховання, порівняльно-історичне мовознавство, фізика, філологія, філософія, хімія.

<i>Гуржи К. Л.</i> Де/конструювання міського соціального простору: дослідницький потенціал розробок Кевіна Лінча та Коліна Елларда	156
<i>Додонова В. И. М.</i> Хайдеггер о модусах речи и «семантика социальных конфликтов»	157
<i>Додонов Р. О.</i> Про місце війн у російській історії	159
<i>Ковальський Г. Є.</i> Інформаційний інструментарій моделювання реальності в українському соціуму	161
<i>Колінько М. В.</i> Роль жінки у формуванні міжкультурного діалогу. Досвід американського фронтиру	163
<i>Попов В. Ю.</i> Проблема «наукового світогляду» в полеміці А. Деборіна з В. Вернадським.....	165
<i>Родигін К. М.</i> Феномен алхімії у сцієнтистському контексті нового та новітнього часу	167
<i>Скворець В. О.</i> Соціальна еволюція в умовах глобалізації.....	169
<i>Халиков Р. Х.</i> Стены как последняя попытка государств утвердить границы	172

СЕКЦІЯ «ХІМІЯ»

<i>Бахалова Є. А., Беспалько Ю. М., Швед О. М., Ситник Н. С.</i> Регіоселективність реакції розкриття оксиранового циклу епіхлоргідрину бензоат-аніоном	174
<i>Борисова К. В., Каиуба А. І., Шульжук Б. В., Гетьман Є. І.</i> Подвійні силікати рідкісноземельних елементів зі структурою апатиту	175
<i>Гетьман Є. І., Радіо С. В.</i> Прогнозування енергії змішування та температур розпаду твердих розчинів складу $La_{1-x}Ln_xPO_4$	175
<i>Єрошина К.В., Фіткаленко Г. В., Румянцева Ж. О., Марійчак О. Ю., Радіо С. В.</i> Визначення вмісту хлорид-аніонів у питній воді колодязів м. Вінниця	177
<i>Жильцова С. В., Леонова Н. Г.</i> Структура і властивості епоксидно-силоксанових нанокмполімерів ангідридного тверднення.....	179
<i>Зосенко О. О., Гордєєва І. О., Куц О. В.</i> Антиоксидантна активність 3-(гідроксиіміно)пентан-2,4-діону в реакціях з радикалами	180
<i>Калінський О. М., Ютілова К. С., Беспалько Ю. М., Швед О. М.</i> Нуклеофільний каталітичний ацидоліз епіхлоргідрину двоосновними карбоновими кислотами і їх естерами	181
<i>Копил О. Е., Лесишина Ю. О., Цяпало О. С., Кублинська І. А.</i> Якісний і кількісний склад етанольних екстрактів грибів <i>FLAMMULINA VELUTIPE</i>	183
<i>Марійчак О. Ю., Розанцев Г. М., Радіо С. В.</i> Натрію гетерополідекавольфрамоевропіат(III): синтез, ІЧ-спектроскопічний аналіз, мікрморфологія поверхні.....	184
<i>Мельниченко В. І., Манько К. І.</i> Кополімеризація метилметакрилату з фторованими мономерами	185
<i>Розанцев Г. М., Гумерова Н. І., Іванцова Е. С., Усачов О. М., Зюбрицька Ю. І., Радіо С. В.</i> Гетерополігексавольфрамонікелати(II) рідкісноземельних елементів з аніоном структури Андерсона та їх термоліз.....	186
<i>Цяпало О. С., Лесишина Ю. О., Шендрік О. М.</i> Вплив середовища на каталітичну активність лаккази <i>TRAMETES VERSICOLOR</i>	187
<i>Shpan'ko I. V.</i> Combined effects of structure and temperature on kinetics and free activation energy of reactions between trans-2,3-bis(3-bromo-5-nitrophenyl)oxirane and arenesulfonic acids	188

Електрохімічна оцінка антикорозійних властивостей покриттів на поверхні алюмінієвого сплаву Д16 з використанням потенціодинамічного методу аналізу показала, що ефективність антикорозійного захисту поверхні металу становить більше 90 %, при цьому максимальні захисні властивості мають композити з вмістом наповнювача 1 мас.%, отримані при формуванні золю ПСЧ за відсутності епоксидного олігомеру.

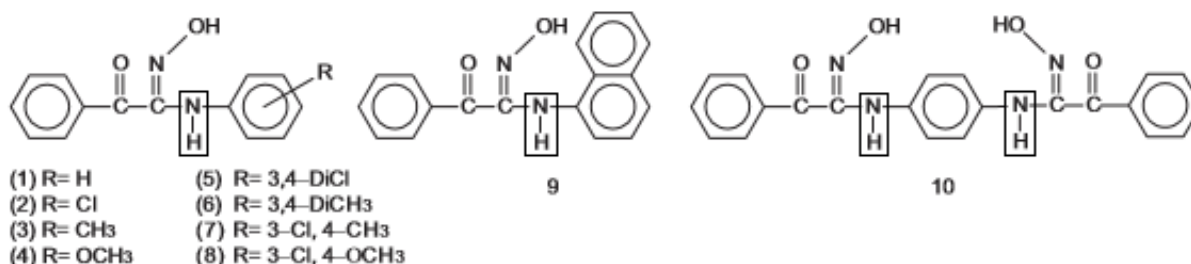
УДК 544.475:66.094.3-926.217:547.(789.12+565.2)

АНТИОКСИДАНТНА АКТИВНІСТЬ 3-(ГІДРОКСИМІНО)ПЕНТАН-2,4-ДІОНУ В РЕАКЦІЯХ З РАДИКАЛАМИ

О. О. Зосенко, І. О. Гордєєва, О. В. Куц

В останні роки активно вивчаються властивості ізонітрозокетонів як антиоксидантів при взаємодії з активними формами кисню (АФК) та металами змінної валентності як бідентантні ліганди. Проте, антиоксидантну дію оксимів і здатність їх участі в радикальних реакціях вивчено недостатньо.

В роботі [1] було встановлено високу антиоксидантну активність ряду аміно-карбонільних оксимів, структура яких наведена нижче:



Всі ці сполуки містять у своєму складі ізонітрозо- та аміногрупи. Від так, важко сказати, яка саме група (>N-OH, чи >N-H) являється пасткою активних радикалів, та надає цим сполукам високу антиоксидантну активність (АОА).

Для відповіді на це запитання нами було синтезовано аліфатичний оксим R₂C=NOH за реакцією нітрузування ацетилацетону, який не містить у своєму складі аміногрупу. Індивідуальність отриманої сполуки підтверджували методами ЯМР- і УФ-спектроскопії.

Антирадикальну активність визначали за реакцією зі стабільним 1,1-дифеніл-2-пікрилгідрозил (\bullet DPPH) радикалом. Для кількісної оцінки АОА використовували стандартний параметр ефективної концентрації EC₅₀ – концентрації субстрату, за якої відбувається знебарвлення вихідного розчину \bullet DPPH на 50 %. В якості стандарту використовували аскорбінову кислоту. EC₅₀ для 3-(гідроксиіміно)пентан-2,4-діону (ГПД) становила $(1.86 \pm 0.05) \times 10^{-2}$ М, що на три порядки менше ніж для сильного антиоксиданта (АО) аскорбінової кислоти (EC₅₀ = 2.025×10^{-5} М) і свідчить про низьку антиоксидантну активність функціональної групи >N-OH.

Порівнюючи результати визначення EC₅₀ для аміно-карбонільних оксимів [1] та ГПД, які суттєво відрізнялися, ми дійшли висновку, що визначаючим фактором АОА аміно-карбонільних оксимів є саме аміногрупа, яка проявляє високу антирадикальну дію, тому всі випробувані в роботі [1] сполуки мають високі показники як АО. Наш

аліфатичний оксим містив лише ізонітрозогрупу і в проведених дослідженнях проявив себе слабким антиоксидантом.

Література

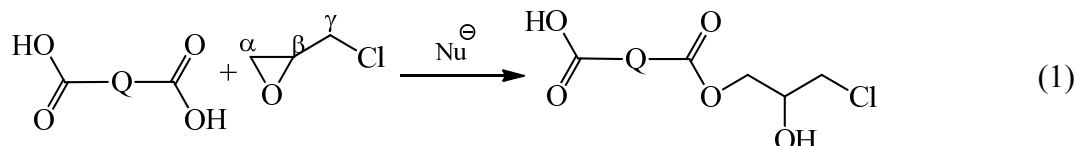
1. *Teyfik Özen, Murat Taş* Screening and evaluation of antioxidant activity of some amido-carbonyl oxime derivatives and their radical scavenging activities// *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry*. – 2009. – Vol. 24(5). – P. 1141–1147

УДК 547-311+544.18

НУКЛЕОФІЛЬНИЙ КАТАЛІТИЧНИЙ АЦИДОЛІЗ ЕПІХЛОРГІДРИНУ ДВОХОСНОВНИМИ КАРБОНОВИМИ КИСЛОТАМИ І ЇХ ЕСТЕРАМИ

О. М. Калінський, К. С. Ютілова, Ю. М. Беспалько, О. М. Швед

Епіхлоргідрин (хлорметилоксиран, ЕХГ) виявляє високу реакційну здатність у реакціях з протонвмісними нуклеофільними реагентами. Його реакція з карбонowymi кислотами, крім широкого практичного застосування, є модельною для вивчення механізму нуклеофільного розкриття оксиранового циклу. Перспективним напрямком дослідження є отримання продуктів ацидолізу ЕХГ полікарбонowymi кислотами, що є розгалуженими мономерами для синтезу полімерних матеріалів з флексибілізуючими властивостями:



Як каталізатори реакції (1) виступають органічні та неорганічні солі, носієм нуклеофільного центру в яких є аніон. Каталітична активність солей в реакції ацидолізу оксиранів традиційно пояснюється з позицій їх дисоціації, зі зростанням ступеня якої збільшується нуклеофільність каталізатору. Однак ряд експериментальних досліджень показує, що дисоціація галогенідів лужних металів і четвертинного амонію в органічних розчинниках, близьких за полярністю до ЕХГ, є незначною і для них є характерним утворення іонних пар. Отже, механізм реакції (1) потребує обґрунтування нових гіпотез, які б враховували електрофільне сприяння катіона у складі іонної пари.

Метою роботи є моделювання поведінки двохосновної карбонОВОЇ кислоти і каталітичної активності бромідів і ацетатів лужних металів у реакції (1). Об'єкти дослідження: оксиран – ЕХГ; протонвмісні нуклеофільні реагенти – пропандіова (маленова) кислота та її метиловий естер; каталізатори – броміди і ацетати Li, Na, K. Методами квантової хімії знайдено рівноважні конфігурації перехідних станів (ПС) на шляху реакції (1). Оптимізацію ПС і розрахунок частот коливального спектру проведено методом DFT у наближенні B3LYP/6-31+G** для вакууму. Розрахунки здійснено у програмному комплексі PC FIREFLY 7.1.G. Належність локалізованих ПС відповідній реакції доведена спусками за процедурою IRC у долини реагентів і продуктів.

Розглянуто тилову атаку відносно α -Карбону, оскільки попередні розрахунки вказують на пріоритетність цього напрямку. Локалізовані рівноважні конфігурації ПС аніонів пропандіОВОЇ кислоти та її метилового естеру з ЕХГ (рис. 1), а також перехідні стани для тилової атаки бромід- та ацетат-аніону на α -атом Карбону.