

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ДОНЕЦЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТУСА
ІНСТИТУТ ФІЗИКО-ОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ І ВУГЛЕХІМІЇ
ІМ. Л. М. ЛИТВИНЕНКА НАН УКРАЇНИ**

ХІМІЧНІ ПРОБЛЕМИ СЬОГОДЕННЯ



**Десята Українська наукова конференція
студентів, аспірантів і молодих учених
з міжнародною участю**

ЗБІРНИК ТЕЗ ДОПОВІДЕЙ

ДО 80-РІЧЧЯ ДОННУ ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТУСА



**27–29 березня 2017 р.
м. Вінниця**

УДК 54(06)
ББК Гя431
Х 46

*Затверджено Вченою радою Донецького національного університету
імені Василя Стуса (протокол № 3 від 23.02.2017 р.)
Посвідчення про реєстрацію УкрІНТЕІ № 104 від 27.02.2017 р.*

Хімічні проблеми сьогодення (ХПС-2017): збірник тез доповідей Десятої Української наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених з міжнародною участю, 27–29 березня 2017 р., м. Вінниця / Донецький національний університет імені Василя Стуса; редколегія: О. М. Шендрик (відп. ред.) [та ін.]. – Вінниця, ТОВ "Нілан-ЛТД", 2017. – 324 с.

З 27 по 29 березня 2017 року в Донецькому національному університеті імені Василя Стуса відбулася Десята Українська наукова конференція студентів, аспірантів і молодих учених з міжнародною участю «Хімічні проблеми сьогодення» (ХПС-2017).

У збірнику опубліковані результати досліджень, які виконані в навчальних закладах та наукових установах України, Республіки Білорусь, Казахстану, Узбекистану, Російської Федерації, Словачії, Естонії, Німеччини, Франції, Сполучених Штатів Америки в галузі аналітичної, квантової, неорганічної, органічної, фізичної, медичної та фармацевтичної хімії, біохімії, хімічної освіти, хімічної інженерії, хімії полімерів і композитів.

Підтримка конференції:

ТОВ «УкрХімАналіз»
Науково-сервісна фірма «ОТАВА»
«Украинские аэрозоли»
ТОВ «Хімлаборреактив»
Приватне підприємство «Інструмент-Сервіс»
«АЛСІ-ХРОМ»
ТОВ «Мікслаб»
ТОВ «НВП «Укроргсинтез»

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

С. В. Жильцова
Й. О. Опейда
С. В. Радіо
Г. М. Розанцев
О. М. Швед

Адреса редколегії: 21021, м. Вінниця, вул. 600-річчя, 21, хімічний факультет Донецького національного університету імені Василя Стуса.

ISBN 978-966-924-470-3

© ДонНУ імені Василя Стуса, 2017
© Колектив авторів, 2017
© О. М. Шендрик (відп. ред.), 2017
© ТОВ «Нілан-ЛТД», 2017

MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF UKRAINE
NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF UKRAINE
VASYL' STUS DONETSK NATIONAL UNIVERSITY
L. M. LITVINENKO INSTITUTE OF PHYSICAL-ORGANIC
CHEMISTRY AND COAL CHEMISTRY

CURRENT CHEMICAL PROBLEMS



**X Ukrainian scientific conference
for students and young scientists
with international participation**

BOOK OF ABSTRACTS

CELEBRATING 80 YEARS OF VASYL' STUS DONNU



**March 27–29, 2017
Vinnytsia**

UDC 54(06)
ББК Гя431
С 95

*Approved by the Academic Council of Vasyl' Stus Donetsk National University
(minutes N 3, 23.02.2017)*

UkrISTEI registration certificate N 104, 27.02.2017

Current chemical problems (CCP-2017): book of abstracts of the X Ukrainian scientific conference for students and young scientists with international participation, March 27–29, 2017, Vinnytsia / Vasyl' Stus Donetsk National University; editorial board: O. M. Shendrik (editor-in-chief) [et al.]. – Vinnytsia, Nilan-LTD, 2017. – 324 p.

X Ukrainian scientific conference for students and young scientists with international participation «Current Chemical Problems» (CCP-2017) was held at the Faculty of Chemistry of Vasyl' Stus Donetsk National University on March 27–29, 2017.

The book of abstracts contains the results of investigations, obtained in the educational and research establishments of Ukraine, Republic of Belarus, Republic of Kazakhstan, Republic of Uzbekistan, Russian Federation, Slovak Republic, Republic of Estonia, Federal Republic of Germany, French Republic, United States of America in the field of analytical, quantum, inorganic, organic, physical, medical and pharmaceutical chemistry, biochemistry, chemical education, chemical engineering, chemistry of polymers and composites.

Conference support:

UkrChemAnalysis Ltd.

Otava Ltd.

"Ukrainian aerosols"

Chemlaborreactive Ltd.

"INSTRUMENT-SERVIS"

"ALSI-Chrom"

"MixLab"

UkrOrgSyntez Ltd.

Editorial board: O. M. Shendrik (ed.-in-ch.)

S. V. Zhyl'tsova

I. O. Opejda

S. V. Radio

G. M. Rozantsev

O. M. Shved

Editorial board address: 21021, Vinnytsia, vul. 600-richchia, 21, the Faculty of Chemistry of Vasyl' Stus Donetsk National University.

© Vasyl' Stus DonNU, 2017

© Authors, 2017

© O. M. Shendrik (ed.-in-ch.), 2017

© LLC "Nilan-LTD", 2017

ISBN 978-966-924-470-3

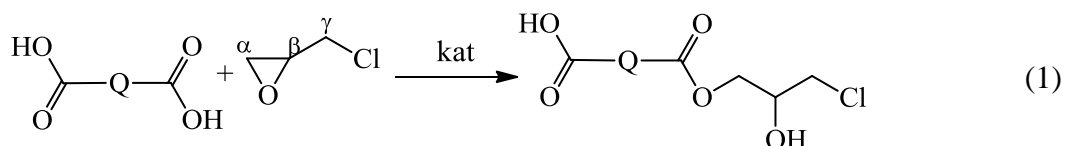
МОДЕЛЮВАННЯ ПОВЕДІНКИ ПРОПАНДІОВОЇ КИСЛОТИ ЯК НУКЛЕОФІЛЬНОГО РЕАГЕНТА В РЕАКЦІЇ З ХЛОРМЕТИЛОКСИРАНОМ

Калінський О. М., Завидовський О. І., Швед О. М., Беспалько Ю. М.

Донецький національний університет імені Василя Стуса

o.kalinskiy@donnu.edu.ua

Оксиран та його похідні характеризуються надзвичайно високою реакційною здатністю. Реакція оксиранів з гідроксилвмісними реагентами використовується в синтезі лікарських препаратів, епоксидних сполук, функціональних полімерних матеріалів, які мають високі експлуатаційні показники та застосовуються як пластифікатори, герметики, гідроізолятори, клеї у електроніці. Особливе значення має реакція хлорметилоксирану (епіхлоргідрин – ЕХГ) з карбоновими кислотами (протоновмісні нуклеофільні реагенти), що, крім широкого практичного застосування, є модельною для вивчення механізму нуклеофільного розкриття оксиранового циклу. Перспективним напрямком дослідження є вивчення ацидолізу ЕХГ полікарбоновими кислотами, продукти взаємодії якого є основою полімерних матеріалів з флексібілізуючими властивостями:



Метою роботи є моделювання поведінки двохосновної карбонової кислоти в реакції (1). Об'єктами дослідження є протоновмісні нуклеофільні реагенти: пропандіова кислота, її метиловий естер та оксиран: хлорметилоксиран. 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 реактантів і продуктів. Знайдено рівноважні конфігурації ПС аніонів пропандіової кислоти (**a**) та її метилового естеру (**б**) з ЕХГ у випадку тилової атаки на α -атом Карбону (рис. 1).

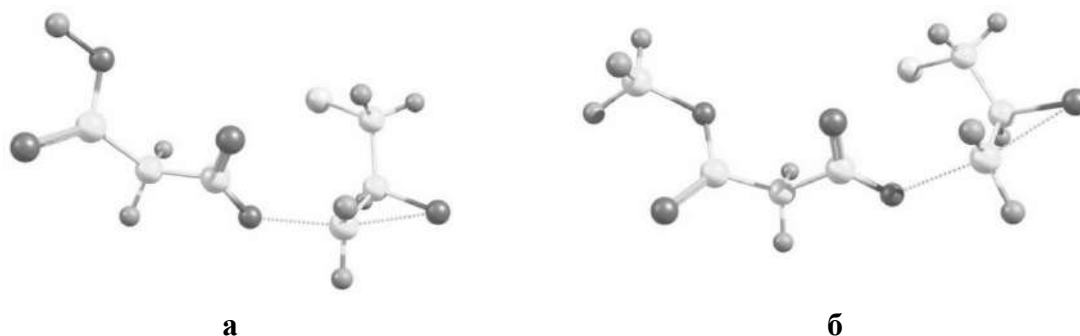


Рис. 1. ПС з аніонів пропандіової кислоти (**a**) та її метилового естеру(**б**) з ЕХГ

Розраховано геометричні та активаційні параметри ПС (**a**) та (**б**). Встановлено, що енергія активації у випадку ПС з аніоном метилового естеру пропандіової кислоти менша, ніж у випадку ПС з аніоном пропандіової кислоти. Це дозволяє припустити, що стадія естерифікації другої карбоксильної групи відбувається швидше, ніж першої. Одержані результати надають можливість прогнозування кінетичних особливостей розкриття оксиранового циклу ЕХГ двохосновними карбоновими кислотами та їх естерами.

Author Index

Ількевич Н. С.	153
Іщенко О. В.	156
Кабирова Л. Р.	15, 16, 17, 29, 30, 39
Каланча В. О.	84
Калашнікова Л. Є.	77
Калініченко Є. О.	157
Калінський О. М.	58
Калішин Є. Ю.	146
Камєнева Т. М.	46
Камишан С. В.	148
Камінський О. М.	88
Камєв М. М.	238
Камєва В. Б.	238
Камєва Н. М.	155
Кандидатова І. Н.	86, 158
Каніболоцька Л. В.	157
Канівець А. В.	260
Капарчук К. В.	125
Капитанов І. В.	59, 126, 159, 160
Кара А. Л.	87
Карандашов О. Г.	261
Карєв А. І.	266
Карлаш В. І.	202
Карпичєв Е. А.	159, 160
Касянчук М. Г.	60
Каулін В. Ю.	197
Кашуба А. І.	89
Кириллов С. А.	163
Киричук М. Ю.	88
Кізь О. В.	74
Кіпріч А. В.	255
Кір'янчук В. Ф.	262
Кітик А. А.	179
Клепко В. В.	256, 281
Клименко Н. С.	281
Клокол П. В.	263
Клочанюк О. Р.	161
Книш Н. В.	98
Кобзар Н. П.	74
Кобзар О. Л.	76
Кобзарь Я. Л.	264
Кобітович О. М.	81
Коваль Т. С.	138
Ковальчук А. І.	264
Когут А. М.	262
Козловская І. Ю.	203
Колбасюк О. О.	116
Колісник С. С.	18
Колотилов С. В.	184
Колотілов С. В.	146
Компанєць М. О.	45, 46, 53

Авторський покажчик

Коновалова С. А.	130
Коновалова С. О.	129
Корж Р. В.	231
Коркуна О. Я.	19
Корнієнко О. А.	162
Косилов В. В.	163
Костів О. І.	19
Кострикин М. Л.	126
Котур Б. Я.	80
Кошова Я. І.	124
Кравченко А. В.	106, 281
Кравченко С. В.	136
Кравченко Т. В.	209
Крамаренко А. В.	229
Крамарьов С. М.	120
Красилов І. В.	127
Красінський В. В.	246
Краснопьорова А. П.	165
Крилова М. М.	173
Крутько І. Г.	289
Крутько І. Г.	197, 252
Крюковська О. А.	207
Кублинська І. А.	52
Кugno Т. В.	194
Куделич А. С.	255
Кузнєцова Л. С.	69
Кузьминых В. Е.	20
Кулішова Ю. О.	21
Куншенко Б. В.	73, 276
Купченко Д. Р.	22
Купчик О. Ю.	8
Кусяк А. П.	97
Кусяк Н. В.	88, 97
Куцик-Савченко Н. В.	62
Кучма А. В.	128
Кушнарєва Т. А.	204
Кушнір О. В.	140, 141
Кущ О. В.	45, 53
Лавриченко І. В.	277
Лагдан І. В.	205
Лагун О. Є.	265
Ларичєва Л. П.	196
Ластєженко К. Ю.	206
Лаховець К. М.	47
Лахтаренко Н. В.	48
Лебедев В. В.	266
Лєванюк А. К.	287
Лєвицький В. О.	93
Лєвішко А. С.	165
Лєонова Н. Г.	36
Лєсишина Ю. О.	47, 51, 52, 149, 175

5-ГІДРОКСИМІНО-4-ІМІНО-1,3-ТІАЗОЛІДИН-2-ОН – НОВИЙ ПЕРСПЕКТИВНИЙ РЕАГЕНТ ДЛЯ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ Rh(III) <i>Шевчук Д. Ю., Ридчук П. В., Тимошук О. С.</i>	42
БІОХІМІЯ / BIOCHEMISTRY	43
ОСОБЛИВОСТІ ЕКСТРАКЦІЇ ВОДОРОЗЧИННИХ КОМПОНЕНТІВ ВІВСЯНОЇ СОЛОМИ <i>Гайова Л. В., Родигіна І. В., Родигін М. Ю.</i>	44
СИНТЕЗ 1,3-ДИГІДРОКСИ-2Н-БЕНЗІМІДАЗОЛ-2-ОНУ ТА ГЕНЕРУВАННЯ НІТРОКСИЛЬНОГО РАДИКАЛА <i>Компанець М. О., Гордєєва І. О., Зосенко О. О., Шендрик О. М., Куш О. В., Опейда Й. О.</i>	45
3-(ГІДРОКСИМІНО)ПЕНТАН-2,4-ДІОН В РАДИКАЛЬНИХ РЕАКЦІЯХ <i>Зосенко О. О., Компанець М. О., Каменєва Т. М., Панаріна Ю. О., Шендрик О. М.</i>	46
КАТАЛІЗОВАНЕ ЛАККАЗОЮ ТРАМЕТЕС VERSICOLOR ОКИСНЕННЯ 7,8-ДИГІДРОКСИ-4-ГІДРОКСИМЕТИЛКУМАРИНУ <i>Лаховець К. М., Цяпало О. С., Лесишина Ю. О., Фрасинюк М. С., Шендрик О. М.</i>	47
ВИРТУАЛЬНИЙ РЕГИСТРАТОР ФОТОМЕТРИЧЕСКИХ ИЗМЕРЕНИЙ В ИЗУЧЕНИИ МЕДЛЕННЫХ РЕАКЦИЙ <i>Лахтаренко Н. В., Богатырева Е. В., Холмовой Ю. П.</i>	48
MOLECULAR SYSTEMS OF BIOTRANSFORMATION AND METAL STORAGE OF BIVALVE MOLLUSK IN THE EXPOSURE TO NANOFORM OF ZINC OXIDE <i>Mykhalska V., Martyniuk V., Kubashok Z., Maletska I., Kharchuk A., Soltys I.</i>	49
ЗНАЧЕННЯ ГІДРОГЕН СУЛЬФІДУ У ФОРМУВАННІ НЕАЛКОГОЛЬНОЇ ЖИРОВОЇ ХВОРОБИ ПЕЧІНКИ, АСОЦІЙОВАНОЇ З ГІПЕРГОМОЦИСТЕЇНЕМІЄЮ <i>Некрут Д. О., Заїчко Н. В.</i>	50
АКТИВНІСТЬ 2,2-АЗИНО-БІС(3-ЕТИЛБЕНЗТІАЗОЛІН-6-СУЛЬФОНОВОЇ) КИСЛОТИ ЯК МЕДІАТОРА ЛАККАЗИ ТРАМЕТЕС VERSICOLOR <i>Плешингер Т. С., Бураков І. М., Цяпало О. С., Лесишина Ю. О., Шендрик О. М.</i>	51
ФЕНОЛЬНІ СПОЛУКИ ЕТАНОЛЬНИХ ЕКСТРАКТІВ ГРИБІВ LENTINUS EDODES <i>Рябошапко О. Л., Лесишина Ю. О., Цяпало О. С., Кублинська І. А.</i>	52
СПОНТАННИЙ РОЗПАД ФТАЛІМІД-Н-ОКСИЛЬНИХ РАДИКАЛІВ РІЗНОЇ СТРУКТУРИ <i>Степаненко Г. М., Андрєєв О. В., Літвінов Ю. С., Компанець М. О., Куш О. В., Опейда Й. О.</i>	53
КВАНТОВА ХІМІЯ / QUANTUM CHEMISTRY	55
ОЦЕНКА КОНФОРМАЦИОННОЙ ЗАСЕЛЕННОСТИ (R)-4-МЕНТЕНОНА <i>Белкина Н. В., Вакулин И. В.</i>	56
CRYSTAL GROWTH MORPHOLOGY AS A CRITERION OF IMPACT SENSITIVITY FOR POLYCRYSTALLINE EXPLOSIVES <i>Bondarchuk S. V.</i>	57
МОДЕЛЮВАННЯ ПОВЕДІНКИ ПРОПАНДІОВОЇ КИСЛОТИ ЯК НУКЛЕОФІЛЬНОГО РЕАГЕНТА В РЕАКЦІЇ З ХЛОРМЕТИЛОКСИРАНОМ <i>Калінський О. М., Завидовський О. І., Швед О. М., Беспалько Ю. М.</i>	58
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ ТЕТРАЭДРИЧЕСКОГО ПРОМЕЖУТОЧНОГО ПРОДУКТА В РЕАКЦИЯХ РАСЩЕПЛЕНИЯ ЭФИРОВ УКСУСНОЙ КИСЛОТЫ 1,3-ДИМЕТИЛ-2-(ГИДРОКСИМИНОМЕТИЛ)-ИМИДАЗОЛИЙ ЙОДИДОМ <i>Михеенко В. М., Сердюк А. А., Капитанов И. В.</i>	59
РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ГЕОМЕТРИИ ДЛЯ ТАУТОМЕРНЫХ ФОРМ АНТРОНА КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ <i>Сердюк А. А., Пастернак Е. Н., Касянчук М. Г.</i>	60