

**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

СПОНТАННИЙ РОЗПАД ФТАЛІМІД-*N*-ОКСИЛЬНИХ РАДИКАЛІВ РІЗНОЇ СТРУКТУРИ

Степаненко Г. М.¹, Андреев О. В.¹, Літвінов Ю. Є.², Компанець М. О.²,
Кущ О. В.³, Опейда Й. О.³

¹Донецький національний університет імені Василя Стуса

²Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України

³Відділення фізико-хімії горючих копалин ІнФОВ ім. Л. М. Литвиненка НАН України
stanmh93@mail.ru

N-гідроксифталімід (NHPI) проявляє високу каталітичну активність та селективність дії в реакціях окиснення субстратів молекулярним киснем. Основним його недоліком, що звужує сферу застосування, є спонтанний розпад фталімід-*N*-оксильних радикалів (PINO), які утворюються *in situ* і є ключовими інтермедіатами у таких процесах. Дослідження реакцій перетворення радикалів PINO є важливим для дизайну структур нових більш ефективних каталізаторів класу *N*-гідроксиімідів та оптимізації окиснювальних процесів за його участю.

Нами синтезовано і досліджено заміщені NHPI з електродонорними і електроакцепторними замісниками в бензольному кільці. Проведено порівняння різних методів генерування PINO шляхом окиснення *N*-гідроксифталіміду такими окисниками як: перманганат калію (у воді), церій (IV) аммоній нітрат, йодбензол діацетат (в ацетонітрилі). Накопичення і витрату радикала фіксували методом УФ-спектроскопії. Для проведення кінетичних досліджень радикали PINO генерували шляхом окиснення відповідних NHPI діацетат йодбензолом PhJ(OAc)₂:

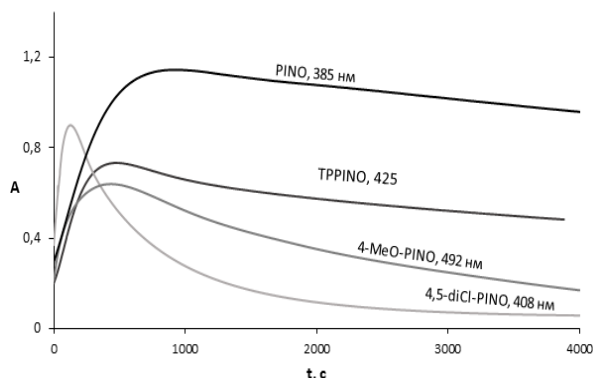
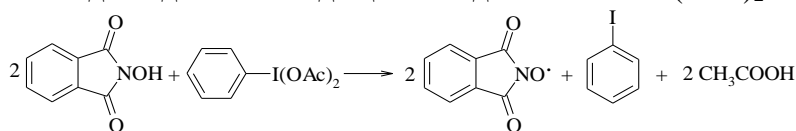


Рис. Кінетичні криві накопичення і витрати радикалів PINO

При додаванні окисника до розчину заміщених NHPI, у видимій області з'являються смуги поглинання нітрокисильних радикалів, що свідчить про накопичення PINO. З часом поглинання зменшується через витрату радикалів в реакції розпаду (див. рис.), кінетика реакції описується рівнянням першого порядку. Для різних за структурою радикалів визначено λ_{max} , розраховано константи швидкості розпаду. Як видно з представленого рисунка, структура

радикала суттєво впливає на швидкості реакцій утворення і розпаду радикалів. Наприклад, 4,5-дихлор-PINO дуже швидко накопичується, але і швидко витрачається в результаті розкладання. Найменші константи швидкості розпаду спостерігаються для незаміщеного PINO і 3,4,5,6-тетрафеніл-PINO. Визначено константи швидкості реакцій розпаду незаміщеного фталімід-*N*-оксильного радикала за різних температур і розраховано активаційні параметри реакції – енергію активації і передекспоненційний множник. Досліджено вплив розчинників на кінетичні параметри реакції розпаду незаміщеного PINO. У розчинниках з високим донорним числом – ацетонітрилі, етилацетаті, оцтовій кислоті, константи реакцій розпаду мають невисокі значення і змінюються у межах похибки. У нітрометані, який має низьке донорне число, швидкість розпаду різко зростає, що буде призводити до суттєвого скорочення часу його дії в процесах рідинно-фазного радикального окиснення молекулярним киснем.

Author Index

Ількевич Н. С.	153
Іщенко О. В.	156
Кабиrowa 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
Камнєв М. М.	238
Камєва В. Б.	238
Камєва Н. М.	155
Кандидатова И. Н.	86, 158
Каніболоцька Л. В.	157
Канівець А. В.	260
Капарчук К. В.	125
Капитанов И. В.	59, 126, 159, 160
Кара А. Л.	87
Карандашов О. Г.	261
Карев А. И.	266
Карлаш В. І.	202
Карпичев 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. И.	264
Когут А. М.	262
Козловская И. Ю.	203
Колбасюк О. О.	116
Колісник С. С.	18
Колотилов С. В.	184
Колотілов С. В.	146
Компанець 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 И. Г.	289
Крутько І. Г.	197, 252
Крюковська О. А.	207
Кублинська І. А.	52
Кугно Т. В.	194
Куделич А. С.	255
Кузнецова 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
Ларичева Л. П.	196
Ластеженко К. Ю.	206
Лаховець К. М.	47
Лахтаренко Н. В.	48
Лебедев В. В.	266
Леванюк А. К.	287
Левицький В. О.	93
Левішко А. С.	165
Леонова Н. Г.	36
Лесишина 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 ВОДРОЗЧИННИХ 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	