

**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

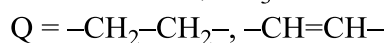
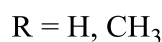
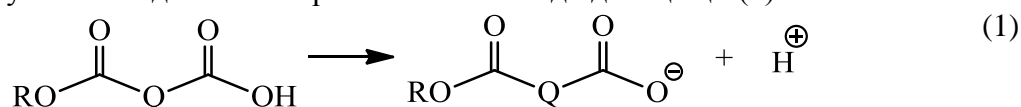
ISBN 978-966-924-470-3

СПОРІДНЕНІСТЬ ДО ЕЛЕКТРОНУ ДВОХОСНОВНИХ КАРБОНОВИХ КИСЛОТ

Якута П. О., Ютілова К. С., Беспалько Ю. М., Швед О. М.
Донецький національний університет імені Василя Стуса
iakuta.p@donnu.edu.ua

Спорідненість до електрону – енергетичне вираження властивості хімічної частинки (молекули, атома, радикала) приєднувати електрон і утворювати аніон (аніон-радикал). Визначення цієї величини проводиться теоретичними розрахунковими методами, зокрема, методами квантової хімії. Прямий розрахунок спорідненості до електрону є можливим у газовій фазі.

Метою роботи є встановлення спорідненості до електрону ряду органічних кислот квантово-хімічними методами. Об'єкти дослідження: малеїнова і бурштинова кислота і їх аніони, монометилкові естери малеїнової і бурштинової кислоти і їх аніони. Вибір об'єктів обґрунтовано здатністю карбонових кислот до дисоціації (1).



Оптимізацію будови кислот і аніонів, а також розрахунок частот коливального спектру проведено методом DFT в наближенні B3LYP/6-31+G** (газова фаза). Спорідненість до електрону (EA) визначали за формулою (2), де $E_{\text{tot}}(\text{M})$ – повна енергія кислоти, кДж/моль; $E_{\text{tot}}(\text{M}^-)$ – повна енергія аніона, кДж/моль. Дані розрахунку наведені у табл. 1. Для кислот визначено першу спорідненість за електроном, тобто для дисоціації за однією карбоксильною групою.

$$\text{EA} = E_{\text{tot}}(\text{M}^-) - E_{\text{tot}}(\text{M}) \quad (2)$$

Таблиця. 1. Термодинамічні параметри та спорідненість до електрону двохосновних кислот і їх аніонів

Назва сполуки	E_{tot} , кДж/моль	ΔH , кДж/моль	ΔG , кДж/моль	ΔS , Дж/моль·К	EA, кДж/моль
Малеїнова кислота	229,479	231,957	120,853	372,645	-35,138
Малеїнат-аніон	194,341	196,820	84,789	110,065	
Метилмалеїнат	301,645	304,124	189,311	385,084	-34,188
Аніон метилмалеїнату	267,457	269,936	143,812	423,020	
Бурштинова кислота	287,315	289,794	178,240	374,153	-37,982
Сукцинат-аніон	249,333	251,812	148,340	347,049	
Метилсукцинат	362,351	364,830	246,221	397,815	-33,233
Аніон метилсукцинату	329,118	331,597	210,347	406,672	

Встановлено, що спорідненість досліджених кислот та їх естерів до електрону досить низька, що свідчить про їх слабкі окислювальні властивості. Значення енергії спорідненості до електрону для двохосновних карбонових кислот та їх естерів дуже близькі, різниця між ними не перевищує 5 кДж/моль. Отже, введення естерної групи не чинить суттєвого впливу на процес дисоціації двохосновної кислоти і легкість утворення аніона.

Author Index

Томін О. О.	177
Томіна В. В.	248
Трепядько Д. О.	231
Третяк С. Ю.	102
Трофимчук И. Н.	178
Трофимчук І. М.	182
Трохименко А. Ю.	38
Труш В. О.	92
Труш М. М.	77
Тульський Г. Г.	131, 191
Туровская М. К.	126
Турченко Ю. А.	284
Усачев О. М.	105
Файзуллина Ю. Г.	30, 39
Фарат О. К.	117
Феденко О. О.	285
Федченко Н. А.	103
Фетісова Ю. С.	278
Филиппов А. С.	289
Флейчук Р. І.	112
Фрасинюк М. С.	47, 113, 175
Фролов Д. А.	142
Хаблетдинова А. И.	39
Хавунко О. Ю.	151
Халавка Ю. Б.	81, 84
Халявка Т. О.	148
Хамула Н. В.	246
Харченко А. Ю.	161, 167, 170, 176
Хвальбота Л. О.	32, 35
Хижан О. І.	240
Хиля В. П.	127
Химишенець И. В.	117
Хмарская Л. А.	232
Хоботова Э. Б.	194
Холмовой Ю. П.	48
Худоярова О. С.	104
Цяпало О. С.	47, 51, 52
Чебанов В. А.	118, 132
Чейпеш Т. А.	161
Чепрасова В. И.	233
Черваков О. В.	280
Черкашина Г. М.	260, 272
Чертихіна Ю. А.	62
Чигвинцева О. П.	283
Чобан А. Ф.	115
Чопик Н.	271
Чорна Г. Т.	41

Авторський покажчик

Чорна О. М.	104
Чотій К. Ю.	153
Чудак Д. М.	106
Чудінович О. В.	183
Шаган Д. В.	234
Шаповал Й. М.	247
Шаповалов Д. О.	286
Шатравка А. В.	287
Швед О. М.	58, 63, 64, 236
Шевкопляс В. М.	222
Шевченко В. В.	264
Шевченко Т.	82
Шевчик В. В.	147
Шевчук Д. Ю.	42
Шевчук О. М.	262
Шекера О. В.	264
Шендрік О. М.	45, 46, 47, 51, 157, 175
Шендрік Т. Г.	222
Шестозуб А. Б.	214
Шибєка Л. А.	103
Шишкіна С. В.	100
Штамбург В. В.	136
Штеменко А. В.	102
Штефан В. В.	219
Штомпель В. И.	258
Шувакін С. І.	63
Шульга А. Б.	107
Шульжук Б. В.	89
Шумейко А. Е.	126
Шупенюк В. І.	143
Щербакова К. М.	179
Щербань Н. Д.	148
Юрженко М. В.	268
Юрценюк Н. С.	147
Юрченко Д. В.	184
Юсупова Л. Р.	288
Ютілова К. С.	63, 64, 138
Юхно Г. Д.	165
Юхно Е. К.	158
Явир Е. Б.	289
Ягодинець П. І.	114, 125
Яицький С. Н.	212
Якимович А. Б.	151
Якута П. О.	64
Янкавець О. О.	18, 230, 241
Яркаєва Ю. А.	15

КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ГОМОЛІЗУ HOONO_2 – КОМПОНЕНТА ФОТОХІМІЧНОГО СМОГУ Пастернак О. М., <i>Сербін В. С.</i>	61
БАР'СРИ ІНВЕРСІЇ АТОМА N В N-ЗАМІЩЕНИХ ФОРМАЛЬДІМАХ: ВЗАЄМОЗВ'ЯЗОК З ГЕОМЕТРИЧНИМИ ТА ЗАРЯДОВИМИ ПАРАМЕТРАМИ <i>Чертихіна Ю. А., Куцик-Савченко Н. В., Ліб О. С., Просяник О. В.</i>	62
ВПЛИВ ПРИРОДИ КАТІОНУ НА ВЗАЄМОДІЮ БРОМІДІВ ЛУЖНИХ МЕТАЛІВ З ЕПІХЛОРИДРИНОМ <i>Ютілова К. С., Шувакін С. І., Беспалько Ю. М., Швед О. М.</i>	63
СПОРІДНЕНІСТЬ ДО ЕЛЕКТРОНУ ДВОХОСНОВНИХ КАРБОНОВИХ КИСЛОТ <i>Якута П. О., Ютілова К. С., Беспалько Ю. М., Швед О. М.</i>	64
МЕДИЧНА ТА ФАРМАЦЕВТИЧНА ХІМІЯ / MEDICAL AND PHARMACEUTICAL CHEMISTRY	65
DEVELOPMENT OF IDENTIFICATION TESTS FOR COMPOUNDED PREPARATIONS CONTAINING FUROSEMIDE <i>Alfred-Ugbenbo D., Taran K. A., Zdoryk O. A.</i>	66
DEVELOPMENT OF QUANTITATIVE DETERMINATION METHOD FOR SPIRONOLACTONE IN COMPOUNDED SYRUPS <i>Alfred-Ugbenbo D., Zdoryk O. A.</i>	67
МЕТОД СИНТЕЗУ ГАДОБУТРОЛУ ДЛЯ ЗАСТОСУВАННЯ У МАГНІТНО-РЕЗОНАНСНІЙ ТОМОГРАФІЇ З КОНТРАСТНИМ ПІДСИЛЕННЯМ <i>Ашууров А. Е.</i>	68
ЗМІШАНІ ПОДВІЙНІ ГІДРОКСИДИ НА ОСНОВІ Mg-Ce ТА Mg-La ЯК ПЕРСПЕКТИВНІ СОРБЕНТИ ДЛЯ ВИЛУЧЕННЯ НАДЛИШКУ ФОСФАТІВ З ОРГАНІЗМУ ЛЮДИНИ <i>Бабак Ю. В., Журавльов І. З., Стрелко В. В., Кузнєцова Л. С.</i>	69
ЗАСТОСУВАННЯ УЛЬТРАЗВУКУ У ФАРМАЦЕВТИЦІ ТА МЕДИЦИНІ <i>Базіло К. В., Заїка В. М., Петрушко Ю. А.</i>	70
ЕКСПРЕС-МЕТОД ВИЗНАЧЕННЯ ТІОЦІОНАТІВ В БІОРІДИНАХ ЯК МАРКЕР ІНТЕНСИВНОСТІ ТІОТІОНОПАЛІННЯ <i>Бохан Ю. В., Бармак І. М.</i>	71
THE MECHANISM OF CYANINE DYE BINDING TO LYSOZYME AMYLOID FIBRILS <i>Tarabara U., Vis K., Ryzhova O., Gorbenko G., Trusova V.</i>	72
СИНТЕЗ ФТОРСОДЕРЖАЩИХ СУЛЬФАМИДНИХ ПРЕПАРАТОВ <i>Гайдаржи І. І., Куншенко Б. В., Мотняк Л. А.</i>	73
ПОШУК ПОТЕНЦІЙНИХ ЗАСОБІВ МЕТАБОЛІЧНОЇ ДІЇ СЕРЕД 2,5-ДИЗАМІЩЕНИХ ПОХІДНИХ 1,3,4-ТІАДІАЗОЛУ <i>Драпак І. В., Перехода Л. О., Таран С. Г., Сич І. А., Кобзар Н. П., Кізь О. В.</i>	74
SYNTHESIS OF N,N'-DISUBSTITUTED THIOUREAS AS INTERMEDIATES FOR SYNTHESIS OF 1,3-THIAZOL-2(3H)-IMINE DERIVATIVES <i>Yeromina N. O., Perekhoda L. O., Yeromina Z. G., Sych I. A., Grinevich L. A.</i>	75
N-БЕНЗИЛТІАЗОЛІЄВІ СОЛІ ЯК ІНГІБІТОРИ АЦЕТИЛХОЛІНЕСТЕРАЗИ І БУТИРИЛХОЛІНЕСТЕРАЗИ <i>Очеретнюк А. Д., Кобзар О. Л., Вовк А. І.</i>	76
ВПЛИВ ЕТИЛСУЛЬФАНІЛЬНОГО ФРАГМЕНТУ В ПОЛОЖЕННІ 5 1,3-ОКСАЗОЛ-4-ІЛТРИФЕНІЛФОСФОНІЄВИХ СОЛЕЙ НА ЇХ АНТИБАКТЕРІАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ <i>Труш М. М., Головченко О. В., Броварець В. С., Калашнікова Л. Є., Метелиця Л. О.</i> .	77
THE STUDY OF HIGH-QUALITY VALUES GEL "LAGODEN" <i>Fazliyev S. A.</i>	78