

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

СТЕРЕОСЕЛЕКТИВНІСТЬ РЕАКЦІЇ РОЗКРИТТЯ ОКСИРАНОВОГО ЦИКЛУ ЕПІХЛОРИДРИНУ БЕНЗОАТ-АНІОНОМ ЗА ПРАВИЛОМ КРАСУСЬКОГО

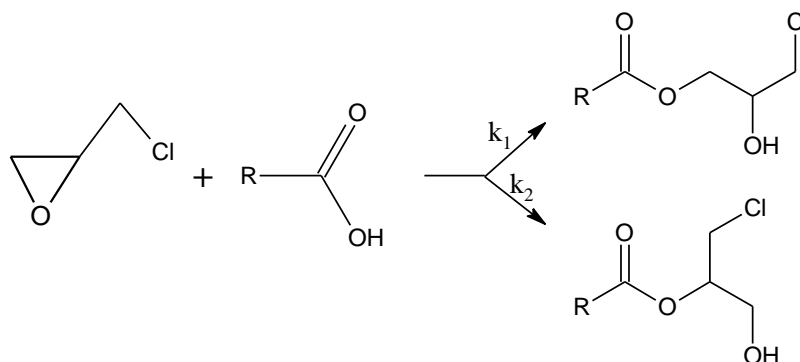
Бахалова Є. А., Беспалько Ю. М., Ситник Н. С.

Донецький національний університет імені Василя Стуса

bahalova.j@yandex.ua

Реакції між карбоновими кислотами і оксиранами, крім значного теоретичного інтересу має широке практичне застосування отриманих продуктів. Гідроксиалкілефіри карбонових кислот використовуються як компоненти фарб і покриттів, фарб для принтерів, лікарських препаратів, твердників піщаних сумішей в металургії, компоненти охолоджуючих агентів для низькотемпературних процесів, розчинники для фарбування композицій, компоненти антикорозійного покриття і цементних модифікаторів. Важливу роль відіграє стереоселективність реакції розкриття оксиранового циклу нуклеофільними реагентами, оскільки є два варіанти атаки на α -атом карбону епіхлорідрину: тилова атака та фронтальна. α -розрив протікає згідно правила Красуського.

Метою даної роботи є вивчення перетворень в системі, де бензоат-аніон здійснює атаку на α -атом карбону епіхлорідрину методами квантової хімії:



Квантово-хімічні розрахунки проведено з використанням програмного комплексу PC FIREFLY 7.1.G. Визначення топологічних структур можливих перехідних станів (ПС) на шляху реакції здійснено в наближенні B3LYP/6-31+G** для вакууму. Належність знайдених ПС відповідній реакції доведено спусками за процедурою IRC в долини реагентів і продуктів. Поріг по градієнту енергії у всіх розрахунках складає 10^{-4} (a.u./bohr.). Масштабуючий множник – 0,96. Локалізовано ПС, в яких атакуючий нуклеофіль знаходиться в площині оксиранового циклу. Знайдені рівноважні конфігурації перехідних станів, які відповідають різним варіантам атаки бензоат-аніоном на α -атом вуглецю 2-(хлорметил)оксирану, їх геометричні характеристики і активаційні параметри відповідних реакцій розкриття оксиранового циклу. Встановлено, що стереоселективність реакції розкриття оксиранового циклу більш сприятлива при тильовій атаці.

Author Index

Авдеенко А. П.	130
Авдеенко А. П.	129
Авдієнко Т. М.	193, 206
Авина С. И.	218
Авраменко В. Л.	260, 261
Азарова Ю. Ю.	245
Акулич Н. Е.	86
Аміруллоєва Н. В.	192
Амірханов В. М.	92, 100
Андрєєв О. В.	53
Андрієвська О. Р.	162, 183
Андрійчук Ю. М.	125
Андрущенко О. О.	215
Антонова П. В.	236
Антонюк В. В.	246
Ашуров А. Е.	68
Бабак Ю. В.	69
Бабіжецький В. С.	80
Базіло К. В.	70
Байрачний Б. І.	229
Балажак Ю. В.	198
Баран Н. М.	247
Баранник К. В.	186
Бармак І. М.	71
Батіг С. М.	250
Баумер В. М.	94
Бахалова Є. А.	111
Беда А. А.	169
Бедльовська Х. М.	274
Безик А. А.	189, 223
Белкина Н. В.	56
Белов В. В.	121
Белоусова И. А.	126
Белякова Л. А.	178
Беспалько О. В.	248
Беспалько Ю. М.	58, 63, 64, 111
Белякова Л. О.	182
Белянська О. Р.	190
Биков О. І.	162
Бикова О. С.	146
Бичко І. Б.	244
Білорус Н. В.	8
Білоус Т. А.	191
Білоусова Н. А.	98
Білявський С. О.	249
Боброва К. І.	112
Бован Л. А.	222
Богатирьова Ж. Д.	162, 183
Богатырева Е. В.	48
Бодня Ю. М.	250
Бойко А. О.	192

Авторський покажчик

Боледзюк В. Б.	147
Бондаренко М. В.	148
Бондаренко Н. В.	113
Бондаренко О. В.	138
Борзых М. М.	86
Борисова К. В.	89
Бородкін Я. С.	138
Бортишевський В. А.	231
Ботвінцева А. Г.	275
Бохан Ю. В.	71
Бочкарев С. В.	20
Брагина Л. Л.	212
Братичак Мих.	271
Броварець В. С.	77, 110
Бугаєва Л. М.	234
Булига О. І.	114
Бураков І. М.	51
Бурмістр М. В.	285
Буря А. И.	257, 284
Бутенко А. Н.	218
Бучковська О. С.	115
Бушуєв А. С.	116
Вакулин И. В.	56, 134, 135
Вакулина А. И.	134, 135
Варениченко С. А.	117
Варлан К. Є.	259, 277
Василенко О. В.	193
Василінич Т. М.	154
Вашкевич О. Ю.	22
Ващенко Ю. М.	253, 265, 275, 280
Ведь В. В.	286
Ведь М. В.	195, 205, 213, 220, 224
Великанова И. А.	152
Велігіна Є. С.	139
Вовк А. І.	76
Войтенко З. В.	113
Войтович С. А.	84
Волкова Л. К.	168
Волнянська О. В.	11, 28, 31
Володченко И. И.	149
Волошин М. Д.	186, 190
Воронов А. С.	262
Воронов С. А.	262
Гавриленко К. С.	146, 184
Гаврилова В. С.	258
Гайдай С. В.	156
Гайдаржи И. И.	73
Гайова Л. В.	44
Галиш В. В.	249, 270
Ганзюк О. В.	172

ПІДВИЩЕННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ ТЕХНІЧНИХ МИЙНИХ ЗАСОБІВ ДЛЯ ОЧИЩЕННЯ ТВЕРДИХ ПОВЕРХОНЬ <i>Прокоф'єва Г. М., Сеннік А. С., Білоусова Н. А., Книш Н. В.</i>	98
ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ АЛХІМІЧНИХ РЕАЛІЙ: «БОЖЕСТВЕННА ВОДА» ЗОСИМИ ПАНОПОЛІТАНСЬКОГО <i>Родигін К. М., Родигін М. Ю.</i>	99
АНІОННІ ТЕТРАКІС-КОМПЛЕКСИ ЛАНТАНОЇДІВ З ДИФЕНІЛ-N-ТРИХЛОРАЦЕТАМІДОФОСФАТОМ <i>Савчук М. О., Ліціс О. О., Шишкіна С. В., Амірханов В. М.</i>	100
СИНТЕЗ ТА КРИСТАЛІЧНА БУДОВА π -КОМПЛЕКСІВ Ag(I) З АЛІЛЬНИМИ ПОХІДНИМИ 1,3,4-ТІАДІАЗОЛУ <i>Сливка Ю. І., Лук'янов М. Ю., Павлюк О. В., Миськів М. Г.</i>	101
ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ транс-Re ₂ (C ₁₀ H ₁₅ COO) ₂ Cl ₄ СО СВОБОДНЫМ 2,2-ДИФЕНИЛ-1-ПИКРИЛГИДРАЗЫЛЬНЫМ РАДИКАЛОМ <i>Третьяк С. Ю., Голиченко А. А., Штеменко А. В.</i>	102
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ОТРАБОТАННЫХ ИОНООБМЕННЫХ СМОЛ ДЛЯ ОЧИСТКИ ПРИРОДНЫХ ВОД ОТ СОЕДИНЕНИЙ ЖЕЛЕЗА <i>Федченко Н. А., Шибека Л. А.</i>	103
ЗАСТОСУВАННЯ ФОСФОРОВІСНИХ ГАЗІВ ДЛЯ ОДЕРЖАННЯ СУЛЬФІДІВ ФОСФОРУ <i>Худоярова О. С., Чорна О. М.</i>	104
ВТОРИЧНАЯ ПЕРИОДИЧНОСТЬ ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИХ ПОЛОС ПОГЛОЩЕНИЯ В ИК-СПЕКТРАХ ГЕТЕРОПОЛИГЕКСАВОЛЬФРАМОНИКЕЛАТОВ(II) ЛАНТАНИДОВ <i>Усачев О. М., Сергеев А. М., Гумерова Н. И., Радио С. В., Розанцев Г. М.</i>	105
СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И СВОЙСТВА НОВОЙ КАТИОН-РАДИКАЛЬНОЙ СОЛИ С ЖЕЛЕЗОКАРБОРАНОВЫМ АНИОНОМ (ET) ₂ [8,8'-Cl ₂ -3,3'-Fe(1,2-C ₂ V ₉ H ₁₀) ₂] <i>Чудак Д. М., Кравченко А. В.</i>	106
ХЕМОСОРБЦИОННО-КАТАЛИТИЧЕСКАЯ ОЧИСТКА ВОЗДУХА ОТ ДИОКСИДА СЕРЫ МОНО- И БИМЕТАЛЛЬНЫМИ КОМПОЗИЦИЯМИ, НАНЕСЕННЫМИ НА ПРИРОДНЫЙ БЕНТОНИТ <i>Голубчик К. О., Шульга А. Б., Сулова Е. М.</i>	107
ОРГАНІЧНА ХІМІЯ / ORGANIC CHEMISTRY.....	109
ВЗАЄМОДІЯ 1-АЦИЛАМІНО-2,2-ДИХЛОРОЕТЕНІЛТРИФЕНІЛФОСФОНІЄВИХ СОЛЕЙ З АМІНОСПИРТАМИ <i>Абдурахманова Е. Р., Головченко О. В., Броварець В. С.</i>	110
СТЕРЕОСЕЛЕКТИВНІСТЬ РЕАКЦІЇ РОЗКРИТТЯ ОКСИРАНОВОГО ЦИКЛУ ЕПІХРОРГІДРИНУ БЕНЗОАТ-АНІОНОМ ЗА ПРАВИЛОМ КРАСУСЬКОГО <i>Бахалова Є. А., Беспалько Ю. М., Ситник Н. С.</i>	111
ОДЕРЖАННЯ ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНИХ СПЛУК НА ОСНОВІ ДИЗАМІЩЕНОГО ОКСЕТАНУ <i>Боброва К. І., Флейчук Р. І., Гевусь О. І.</i>	112
ОСОБЛИВОСТІ ВЗАЄМОДІЇ 3-(2-ГІДРОКСИФЕНІЛ)ЕНАМІНОКЕТОНІВ З 8-ДИМЕТИЛАМІНОМЕТИЛУМБЕЛІФЕРОНОМ <i>Бондаренко Н. В., Войтенко З. В., Мруг Г. П., Фрасинюк М. С.</i>	113
СИНТЕЗ ГЕТЕРОЦИКЛІЧНИХ ПОХІДНИХ НА ОСНОВІ ТІОСЕМІКАРБАЗОНУ 3-(4-АЦЕТИЛФЕНІЛ)-1-МЕТИЛ-2(1H)-ХІНОЛОНУ <i>Руснак О. В., Булига О. І., Скрипська О. В., Ягодинець П. І.</i>	114
СИНТЕЗ ПОЛІАНЛІНУ ОКИСНЮВАЛЬНОЮ ПОЛІМЕРИЗАЦІЄЮ АНЛІНУ <i>Бучковська О. С., Лявинець О. С., Чобан А. Ф.</i>	115