

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
«УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ»
НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ІНСТИТУТ ХІМІЇ ТА ЕКОЛОГІЇ**

ПРОГРАМА І ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

**Підсумкової наукової студентської конференції
ДВНЗ «Ужгородський національний університет»
Секція «Хімічних наук та екології»**

10 травня 2024 р.

УДК 54:502:504
ББК 24:26:28.08

Програма і тези доповідей Підсумкової наукової студентської конференції ДВНЗ «Ужгородський національний університет», секція «Хімічних наук та екології» (10 травня 2024 р.). – Ужгород: вид. «Говерла», 2024. – 80 с.

***Рекомендовано до друку Вченою радою
Навчально-наукового інституту хімії та екології
ДВНЗ «Ужгородський національний університет»,
протокол №10 від 29 квітня 2024 року.***

Збірник містить програму і тези доповідей результатів наукових досліджень студентів Навчально-наукового інституту хімії та екології ДВНЗ «Ужгородський національний університет», які були представлені на Підсумковій науковій студентській конференції 10 травня 2024 року. Наукові дослідження проведені у відповідності із науковими тематиками кафедр Навчально-наукового інституту хімії та екології «Неорганічної хімії», «Аналітичної хімії», «Органічної хімії», «Фізичної та колоїдної хімії», «Екології та охорони навколишнього середовища».

Тези надруковано з авторських оригіналів без істотної редакції.

*Матеріали підготовлені до друку редакційною колегією збірника наукових праць «Науковий вісник Ужгородського університету. Секція Хімія».
Відповідальний за випуск: к.х.н., доц. Глух О.С.*

ПРОГРАМА

Підсумкової наукової студентської конференції ДВНЗ «Ужгородський національний університет», секція «Хімічних наук та екології»
10 травня 2024 року, м. Ужгород, вул. О. Фединця, 53/1

Секція неорганічної хімії

Керівник секції – професор Ігор БАРЧІЙ
Секретар секції – студ. 2 к. ОС Бакалавр Євгенія-Поліна МІШКОВСЬКА

1. **Росоха О.Ю., Стерчо О.О.** Електронна структура сполуки $\text{AgScP}_2\text{Se}_6$.
Наукові керівники: Барчій І.Є., Погодін А.І., Сабов М.Ю.
2. **Марків Д.В.** Використання методу проєктів при вивченні хімії.
Наукові керівники: Зубака О.В., Барчій І.Є.
3. **Мішковська Е-П. І.** Люмінесцентні неорганічні матеріали.
Наукові керівники: Сабов М. Ю., Погодін А. І.
4. **Дербаль Е.М.** Вивчення оптичних властивостей сполук K_2TeI_6 та Rb_2TeBr_6 .
Наукові керівники: Барчій І.Є., Зубака О.В., Погодін А.І.
5. **Цірик Л.П.** Динаміка навчальних досягнень учнів при вивченні хімії у школі.
Наукові керівники: Кохан О.П., Погодін А.І.
6. **Фіглар А.Ю.** Забезпечення реалізації концепції НУШ при викладанні хімії у 7 класі ЗЗСО.
Науковий керівник: Сабов М.Ю.

Секція аналітичної хімії

Керівник секції – доцент Ярослав СТУДЕНЯК

Секретар секції – студ. 2 курсу ОС Бакалавр Мирослава БРИНЗЕЙ

1. **Бринзей М.М.** Скрінінг катіонних барвників щодо осадження та екстракції перфтороктаноату.
Науковий керівник: Студеняк Я.І.
2. **Голодняк О.І.** Визначення показників якості косметичних засобів для дітей.
Науковий керівник: Сухарева О.Ю.
3. **Куштан Є.С.** Фотометричне визначення гепарину за реакцією специфічної агрегації з катіонним барвником.
Науковий керівник: Студеняк Я.І.
4. **Метничук Х.Д.** Використання природних реагентів в аналітичній хімії.
Науковий керівник: Фершал М.В.
5. **Рахівська Н.Д.** Підбір ефективних підходів викладання на уроках хімії.
Науковий керівник: Русин В.М.
6. **Руснак В. М.** Аналітичні реагенти для модифікації поверхні магнітних наночастинок.
Науковий керівник: Фершал М.В.
7. **Магада Є.Ю., Чонтош Т.О.** Розробка безекстракційної методики визначення нікелю новим реагентом 8-гідроксихінолін-азо-фенілборонатом.
Науковий керівник: Фершал М.В.
8. **Фогорощі І.В., Фогорощі Г.В.** Сфери використання поверхнево-активних речовин.
Науковий керівник: Русин В.М.
9. **Чубар Р.І.** Спектрофотометричне визначення додецилбензенсульфонату натрію з використанням базакрил брильянтового червоного.
Науковий керівник: Русин В.М.

Секція органічної хімії

Керівник секції – професор Михайло ОНИСЬКО

Секретар секції – студ. 1 курсу ОС Магістр Вікторія БЕСТРІЦЬКА

1. **Галега О.В.** Галогенотетрациклізація алкеніл(алкініл)тіобензотіазолів.
Науковий керівник: Онисько М.Ю.
2. **Куля Д.Ю.** Гетероциклізація 3-аліл-2-аліл(металіл)тіохіназолін-4(3н)-ону
Наукові керівники: Кут Д.Ж., Кут М.М., Онисько М.Ю., Лендел В.Г.
3. **Дудла А.В.** Галогенотетрациклізація термінальних 2-алкеніл(алкініл)тіохінолін-3-карбальдегідів.
Наукові керівники: Сабо Т.Ш., Онисько М.Ю.
4. **Календіна С.В.** Синтез та галогенування п-аліл-5,6-диметил-2-(тіофен-2-іл)тієно[2,3-d]піримідин-4-аміну
Наукові керівники: Кут Д.Ж., Кут М.М., Онисько М.Ю., Лендел В.Г.
5. **Лабатій Т.В., Бестріцька В.О.** Моніторинг ефективності навчання хімії в школі за програмою «інтелект України».
Наукові керівники: Король Н.І., Сливка М.В.
6. **Ленд'єл О. В.** Електрофільна гетероциклізація метил 1-пентінілпіразол-4-карбоксилату
Наукові керівники: Повідайчик М. В., Онисько М.Ю.

Секція фізичної та колоїдної хімії

Керівник секції - доцент Неля ГОЛУБ

Секретар секції - студ. IV курсу ОС Бакалавр Вікторія ГРИЦАН.

1. **Дужар М.Ю.** Формування понять про хімічні реакції в учнів з особливими освітніми потребами.
Науковий керівник: доц. Козьма А.А.
2. **Геряк В.Р.** Ефективність оцінювання різних форм контролю знань учнів середньої школи.
Науковий керівник: доц. Дзямко В.М.
3. **Кічурка І.В.** Термоперетворення манган(II)фосфатного каталізатора.
Науковий керівник: доц. Козьма А.А.
4. **Савко В.М.** Одержання фосфатних каталізаторів та їх практичне використання.
Науковий керівник: доц. Голуб Н.П.
5. **Сірко А.М.** Термодинамічні та пружні властивості алюмінійфосфатного каталізатора.
Науковий керівник: доц. Козьма А.А.
6. **Стегней М.В.** Сучасні методи навчання та контролю знань учнів при вивченні шкільного курсу з хімії.
Науковий керівник: доц. Голуб Н.П.
7. **Фриган А.І.** Каталітичне окиснення пропану на складних оксидних каталізаторах.
Науковий керівник: доц. Дзямко В.М.
8. **Куцина І.В.** Використання компетентнісного підходу до навчання та активізації навчальної діяльності учнів з курсу «Хімії».
Науковий керівник: доц. Голуб Н.П.
9. **Кирица Д.В, Дужар М.Ю.** Деякі особливості використання тестового контролю засвоєних знань при вивченні хімії.
Науковий керівник: доц. Козьма А.А.
10. **Грицан В.В.** Комплексний підхід щодо вдосконалення методики навчання хімії при вивченні тем шкільного курсу для учнів 9 класу.
Науковий керівник: доц. Голуб Н.П.

Секція екології та охорони навколишнього середовища

Керівник секції – професор Сергій СУХАРЕВ

Секретар секції – студ. 4 курсу ОС Бакалавр Анастасія ДОРОШЕНКО

1. **Гамаль К.С.** Стан повітря в історичній частині міста Мукачево.
Науковий керівник: Сухарев С.М.
2. **Данча С.С.** Вивчення екологічних проблем складової Карпатського біосферного заповідника «Долина нарцисів».
Науковий керівник: Сухарев С.М.
3. **Дорошенко А.Ю.** Якість води у озері с. Мигія Миколаївської області.
Науковий керівник: Галла-Бобик С.В.
4. **Дьордій А.Є.** Збереження ландшафтного та біологічного різноманіття Черкаської області.
Науковий керівник: Роман Л.Ю.
5. **Заяць Я.Р.** Оцінка екологічного стану підземних водних тіл Закарпатської області.
Науковий керівник: Трапезнікова Л.В.
6. **Кут Ю.М.** Сучасні екологічні проблеми лісових екосистем України
Науковий керівник: Роман Л.Ю.
7. **Назаренко Б.О.** Можливість використання цеолітів для адсорбції формальдегіду з повітря приміщень.
Науковий керівник: Мільович С.С.
8. **Піпаш В.В.** Розрахунок NBR індексу для Ужгородської і Чопської ОТГ.
Науковий керівник: Глух О.С.
9. **Кондріч К.А.** Моніторинг впливу автотранспорту на якість повітря м. Ужгород.
Наукові керівники: Роман Л.Ю., Чундак С.Ю.
10. **Широкова С.О.** Забруднення ґрунтів важкими металами внаслідок використання боєприпасів.
Науковий керівник: Мільович С.С.
11. **Ярош О.А.** Просторова структура змішаних деревостанів з участю дуба скельного та бука лісового в умовах Ужанського національного природного парку.
Науковий керівник: Мільович С.С.
12. **Панько А.В.** Дистанційні методи моніторингу лісових пожеж.
Науковий керівник: Сухарев С.М.

ЕЛЕКТРОННА СТРУКТУРА СПОЛУКИ $\text{AgScP}_2\text{Se}_6$

Росоха О.Ю., Стерчо О.О., Барчій І.Є., Погодін А.І., СабовМ.Ю.

Кафедра неорганічної хімії

e-mail: rosokha.olha@student.uzhnu.edu.ua

Гексаселенодифосфат, що містить срібло та скандій, $\text{AgScP}_2\text{Se}_6$ є представником цікавої групи шаруватих сполук спільною формулою $\text{M}^{\text{I}}\text{M}^{\text{III}}\text{P}_2\text{Se}_6$, де M^{I} лужний метал K^+ , Rb^+ та Cs^+ , або псевдолужні іони Cu^+ , Ag^+ і Tl^+ , тоді як M^{III} – тривалентний іон Sb^{3+} , Bi^{3+} , In^{3+} , Sc^{3+} , які мають аніонні каркаси $[\text{P}_2\text{Se}_6]^{4-}$. У гексаселенодифосфатах $\text{M}^{\text{I}}\text{M}^{\text{III}}\text{P}_2\text{Se}_6$ характер взаємодії лужних (псевдолужних) атомів з ковалентно-зв'язаними аніонними каркасами $[\text{M}^{\text{III}}\text{P}_2\text{Se}_6]^{1-}$ є принципово електростатичним. Сполуки $\text{M}^{\text{I}}\text{M}^{\text{III}}\text{P}_2\text{Se}_6$ структурно пов'язані з гексаселенодифосфатом $\text{Fe}_2\text{P}_2\text{Se}_6$, членом досить широкої родини $\text{M}^{\text{II}}\text{P}_2\text{X}_6$, де M^{II} є аніоном 3d-металу, наприклад V^{2+} , Mn^{2+} , Fe^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , або іншим двовалентним аніоном, таким як Mg^{2+} , Cd^{2+} , Sn^{2+} , Pb^{2+} , Hg^{2+} , а X – атом халькогену S або Se. Гексаселенодифосфати $\text{M}^{\text{I}}\text{M}^{\text{III}}\text{P}_2\text{Se}_6$ кристалізуються у двовимірних (2D) структурних типах CdI_2 або CdCl_2 . 2D-подібні структури гексаселенодифосфатів $\text{M}^{\text{I}}\text{M}^{\text{III}}\text{P}_2\text{Se}_6$ проявляють високоанізотропні електрофізичні властивості, зокрема високу фотоелектричну реакцію, виражену сегнетоелектричну поведінку з сильною спонтанною поляризацією, значну генерацію другої гармоніки та високі значення оптичного коефіцієнту.

Для з'ясування електричних (участь електронів у міжзонних переходах) та оптичних (вміст фононної провідності) процесів нами вивчено зонну структуру сполуки $\text{AgScP}_2\text{Se}_6$.

Аргентум(I),скандій(III)гексаселенодифосфат – термодинамічно стійка кристалічна речовина коричневого кольору. Одержується шляхом сплавлення стехіометричних кількостей чистих елементів у вакуумованих кварцових ампулах при 923 K протягом 408 годин. Кристалізується у тригональній (ромбоєдричній) сингонії, просторова група $P\text{-}3_1c$ (SGN 163), параметри комірки $a=6.4632(2) \text{ \AA}$, $c=13.3492(4) \text{ \AA}$, $V=482.93 \text{ \AA}^3$, $Z=2$, $\rho_{\text{рентг}} = 4.74 \text{ г/см}^3$ (Рис.1).

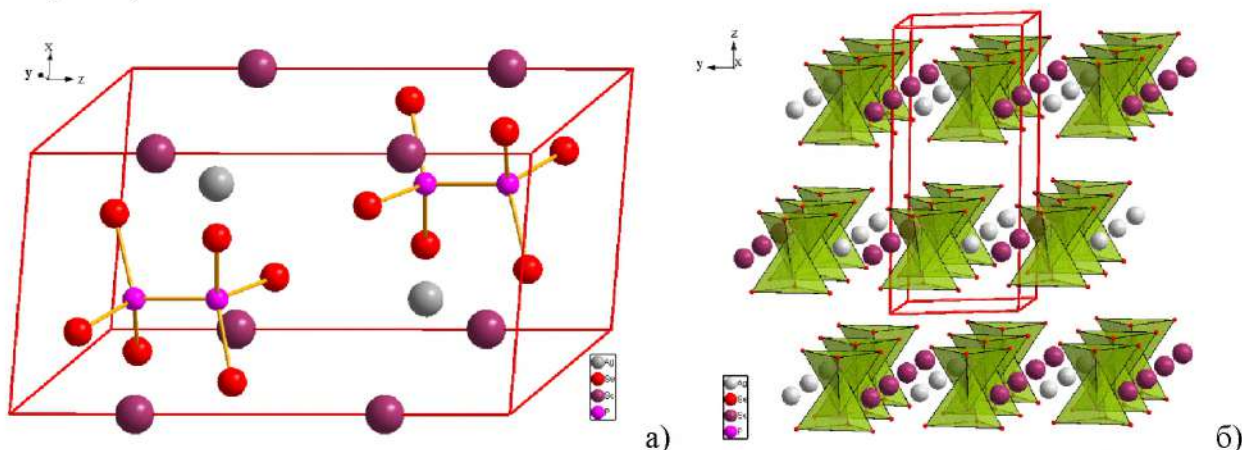


Рис.1. Будова елементарної комірки (а) та укладання аніонної групи $[\text{P}_2\text{Se}_6]^{4-}$ (б) у структурі сполуки $\text{AgScP}_2\text{Se}_6$

Будова кристалічної ґратки сполуки $\text{AgScP}_2\text{Se}_6$ (Рис.1) утворюється із шарів аніонної групи $[\text{P}_2\text{Se}_6]^{4-}$ (два зрощених тетраедри PSe_3) вздовж осі Z, між якими у тетраєдричних пустотах асиметрично розташовуються катіони Ag^+ та Sc^{3+} . Шари утримуються між собою Ван-дер-Ваальсовими зв'язками Se-Se довжиною $\approx 3.6 \text{ \AA}$ (Рис.1). У міжшаровому просторі відсутні катіони. У кристалічній ґратці існують дві нееквівалентні позиції, які займають катіони Ag^+ (2d) та Sc^{3+} (2a). У першій Ag зв'язаний у 6-координатній геометрії з шістьма еквівалентними атомами Se^{2-} (міжатомні відстані зв'язків Ag-Se складають 2.889 \AA) (Рис.2). У другій позиції Sc зв'язаний у 6-координатній геометрії з шістьма еквівалентними атомами

Se^{2-} (міжатомні відстані зв'язків Ag–Se складають 2.710 Å) (Рис.3). У аніонній групі $[\text{P}_2\text{Se}_6]^{4-}$ відстань P–P складає 2.205 Å, P–Se 2.192 Å (Рис.4).

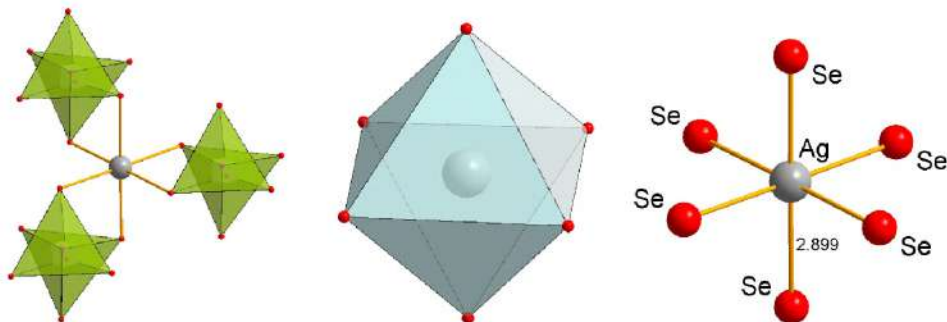


Рис.2. Перше координаційне оточення атомів Ag та міжатомні відстані Ag–Se у кристалічній ґратці сполуки $\text{AgScP}_2\text{Se}_6$

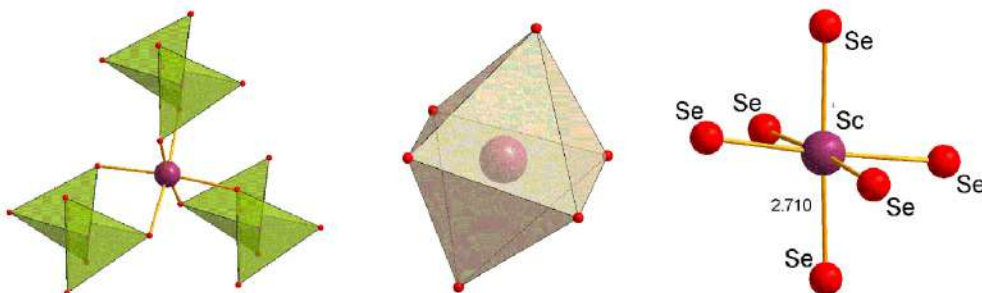


Рис.3. Перше координаційне оточення атомів Sc та міжатомні відстані Sc–Se у кристалічній ґратці сполуки $\text{AgScP}_2\text{Se}_6$

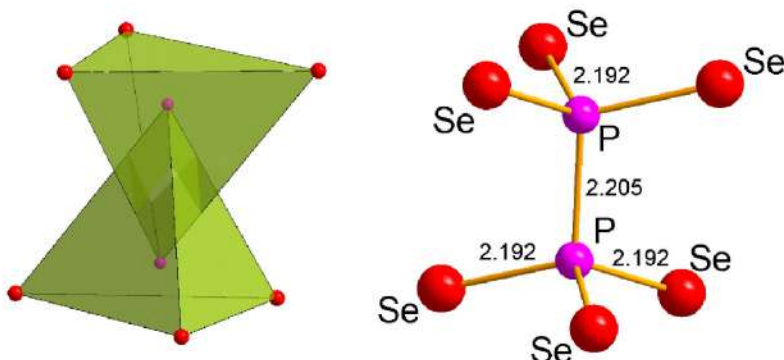


Рис.4. Будова аніонної групи $[\text{P}_2\text{Se}_6]^{4-}$, міжатомні відстані P–Se та Se–Se у кристалічній ґратці сполуки $\text{AgScP}_2\text{Se}_6$

Квантово-хімічним методом теорії функціоналу густини (DFT) вивчено зонну структуру $\text{AgScP}_2\text{Se}_6$ з використанням програмного пакету Quantum ESPRESSO для *ab initio* базових розрахунків електронної структури та моделювання матеріалів, який базується на базисних наборах плоских хвиль і псевдопотенціалах, що забезпечуються компонентом PWscf (самоузгодженого поля плоских хвиль).

Квантово-хімічні розрахунки проводили для кристалічної структури $\text{AgScP}_2\text{Se}_6$ $P-3_1c$ (163). Геометричну оптимізацію структури здійснювали ітераційним методом самоузгодженого поля (SCF) на основі алгоритму Брюдена – Флетчера – Гольдфарба – Шанно (BFGS). Зонну структуру Ag_2Se розраховували вздовж ліній, які зв'язують точки високої симетрії першої зони Бріллюена $\Gamma\text{-M-K-}\Gamma\text{-A-L-H-A} \mid \text{L-M} \mid \text{K-H}$.

На основі теоретичних розрахунків зонної структури, загальної густини станів (DOS) (Рис.5) визначені криві розподілу енергії електронних станів у валентній зоні (ВЗ) та зоні провідності (ЗП) (Рис.6).

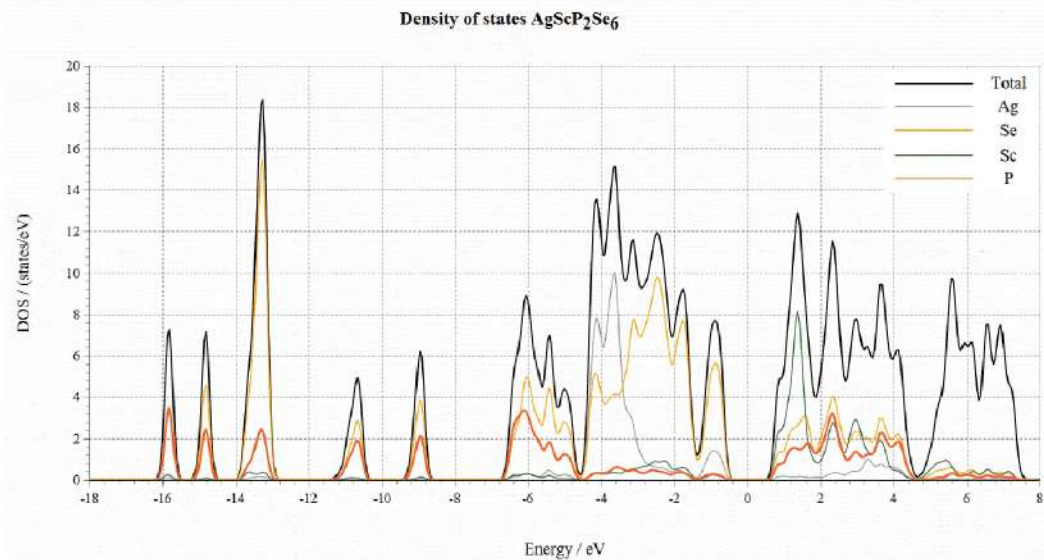


Рис.5. Загальна густина станів (DOS) сполуки $\text{AgScP}_2\text{Se}_6$.

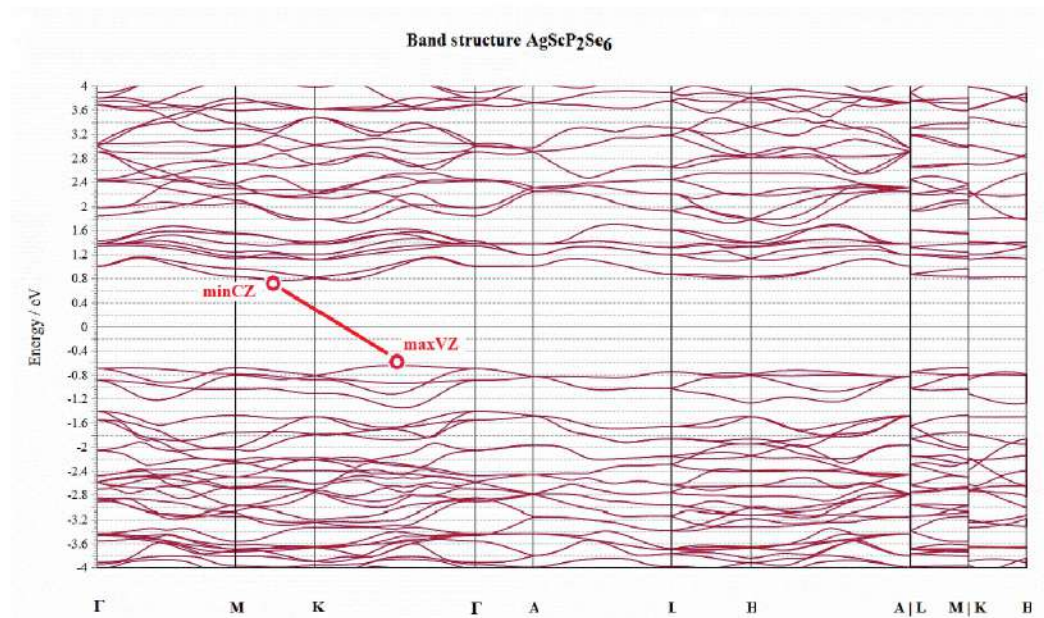


Рис.6. Зонна структура $\text{AgScP}_2\text{Se}_6$.

За результатами DFT розрахунків встановлено, що $\text{AgScP}_2\text{Se}_6$ відноситься до непрямозонних напівпровідників з незначною шириною забороненої зони 1,57 eV, енергія кристалічної комірки $E_{\text{total}} = -8934,5176$ eV, енергія на один атом $E_{\text{atom}} = -446.759$ eV, енергія Фермі $E_{\text{Fermi}} = 6.5707$ eV, максимум валентної зони -0.75 eV, мінімум зони провідності 0.62 eV.

Низькоенергетичні стани валентної зони (ВЗ) формують Se 4s-рівні (-14.0 ÷ -12.8 eV). В області енергій -4.4 ÷ -2.0 eV розташовані Ag 4d-рівні. Високоенергетичні стани валентної зони -2.5 ÷ -0.75 eV формують Se 4p-рівні. Дно зони провідності (ЗП) (0.62 ÷ 1.9 eV) утворюють Sc 3d-рівні. Оптична ширина забороненої зони ($E_g = 1.57$ eV) сполуки $\text{AgScP}_2\text{Se}_6$ формується переходами електронів Se 4p → Sc 3d. Максимум валентної зони та мінімум зони провідності знаходяться в різних зонах Бріллюена М-К та К-Г (Рис.6), що вказує на непрямозонний тип провідності $\text{AgScP}_2\text{Se}_6$.

ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДУ ПРОЄКТІВ ПРИ ВИВЧЕННІ ХІМІЇ

Марків Д.В., Зубака О.В., Барчій І.Є.

Кафедра неорганічної хімії

e-mail: markiv.dmytro@student.uzhmu.edu.ua

Хімія – це природнича наука, яка є цікавою, пізнавальною, творчою, і зацікавити її вивчення – це вмело організувати навчальний процес з поєднанням експериментальної роботи, що включає в себе об'єднання дослідницьких, пошукових, проблемних методів.

Дослідження показали, що на уроках хімії найбільш ефективні є наступні проєкти:

- **Дослідницькі проєкти** – вимагають добре продуманої структури, актуальності предмета дослідження, відповідних експериментальних і дослідницьких робіт, методів обробки інформації. Цей тип проєктів пов'язаний з аргументацією актуальності теми, формулюванням проблеми дослідження, зазначенням джерел інформації, висуванням гіпотез і обговоренням отриманих даних, оформленням результатів досліджень. До дослідницьких проєктів відноситься значна частина наукових досліджень.
- **Ігрові проєкти** – учасники виконують визначені ролі, які обумовлені характером і змістом проєкту. Ступінь творчості тут досить високий, пропонується робота для окремих груп, які виконують певні завдання з однієї теми, з метою аналізу, узагальнення, висновків і досягнення кінцевого продукту спільної діяльності.
- **Інформаційні проєкти** – це проєкти, які спрямовані на збір інформації про певний об'єкт, явище, їх аналіз і узагальнення фактів. При вивченні хімії цьому виду проєктів надають перевагу учні гуманітарного профілю.
- **Прикладні проєкти** – відрізняються чітко продуманим результатом діяльності учнів, орієнтованим на їх соціальні інтереси (логічне пояснення структури періодичної системи, пояснення явища радіоактивності, значення окисно-відновних реакцій).
- **STEM-проєкти** – це більш сучасний підхід, що допомагає підвищити якість освіти. Це один з нових трендів в світовій освіті, що розрахований на природничо-науковий цикл, а саме математики, фізики, хімії, біології, інформатики та мистецтва. Особливістю цього методу є те, що усі дисципліни взаємопов'язані. Припустимо, що потрібно дослідити переробку побутових відходів, зробити аналіз ґрунту, зробити аналіз повітря, води, перевірити якість їжі. Зрозуміло, що без широких знань в різних галузях це зробити складно. І тому цей метод об'єднує їх в єдину систему навчання. У такому освітньому середовищі є можливість отримати знання і вмело використовувати їх на практиці. Цю методику викладання застосовують не тільки у школах, а й у закладах вищої освіти.

Проаналізувавши впровадження методу проєктів у сучасних умовах, можна відзначити, що з його використанням ефективність процесу навчання та виховання зростає, реалізовується ряд найважливіших теоретичних положень, що відкриває нові можливості у програмуванні освітнього процесу. За допомогою цього методу встановлюються міжпредметні зв'язки та здобуваються знання через взаємодію учасників освітнього процесу, що є дуже важливим для формування інтелектуальних здібностей, особливо в умовах профільного навчання. Отже, метою проєктної роботи є працювати самостійно, застосовувати знання на практиці та взаємодіяти в команді.

ЛЮМІНЕСЦЕНТНІ НЕОРГАНІЧНІ МАТЕРІАЛИ

Мішковська Е.П. І., Сабов М. Ю., Погодін А. І.

Кафедра неорганічної хімії

e-mail: mishkovska.evheniia-polina@student.uzhmu.edu.ua

Явище люмінесценції знаходить широке практичне застосування у різноманітних галузях, зокрема: світлодіоди, що випромінюють світло під впливом електричного струму та використовують для освітлення; сцинтиляційні матеріали, люмінофори, які випромінюють світло під час опромінення високоенергетичним електромагнітним випромінюванням або частинками; лазерні матеріал; термолюмінесцентні дозиметри, що випромінюють при термічному збудженні; тощо.

Враховуючи наведене, метою даного дослідження було: ознайомитися із теоретичними основами явища люмінесценції, класифікацією люмінесцентних матеріалів та апробувати синтез люмінесцентного матеріалу.

Люмінесценція - це спонтанне випромінювання під впливом електронного або коливного збудження, яке не знаходиться в тепловій рівновазі з навколишнім середовищем [1]. Тобто на відміну від теплового випромінювання у процесі якого об'єкт випромінює світло лише після нагрівання [2], люмінесцентний об'єкт випромінює «холодне світло». Як правило, випромінювання світла відбувається внаслідок переходу електронів між різними енергетичними рівнями після зовнішнього збудження.

В медицині для діагностики (флуоресцентні барвники застосовуються для візуалізації певних частин тіла або біологічних процесів під час діагностичних процедур без руйнування клітин) та лікування (фотодинамічна терапія використовує світло для активації фоточутливих препаратів, які руйнують ракові клітини, а також лазерна хірургія, що використовує світло для точного розрізання та припікання тканин).

Люмінесценцію найчастіше класифікують відповідно до режиму збудження, зокрема:

1. Фотолюмінесценція, що включає збудження як за допомогою ультрафіолетового (УФ) так і випромінювання видимого світла. Це найпоширеніший метод, який використовується в люмінесцентних лампах, маркувальних знаках, що світяться в темряві, та в деяких медичних діагностичних процедурах. УФ-випромінювання збуджує електрони в атомах або молекулах речовини, змушуючи їх переходити на більш високі енергетичні рівні. Коли електрони повертаються на свої основні рівні, вони випромінюють світло. Деякі речовини можуть люмінесцювати під дією видимого світла. Цей метод використовується в деяких типах лазерів та світлодіодів.

2. Хемілюмінесценція, що ґрунтується на хімічній реакції, яка вивільняє енергію у вигляді світла. Хімічні реакції можуть збуджувати електрони в атомах або молекулах, змушуючи їх переходити на більш високі енергетичні рівні. Коли електрони повертаються на свої основні рівні, вони випромінюють світло. Хемілюмінесценція використовується в світлячках, хімічних світильниках та деяких медичних діагностичних процедурах.

3. Електролюмінесценція, яка виникає під дією електричного струму. Електричний струм збуджує електрони в атомах або молекулах речовини, змушуючи їх переходити на більш високі енергетичні рівні. Коли електрони повертаються на свої основні рівні, вони випромінюють світло. Електролюмінесценція використовується в LED-лампах, дисплеях та підсвітці клавіатур.

4. Катодолюмінесценція - виникає, коли потік електронів бомбардує речовину. Електрони збуджують атоми або молекули речовини, змушуючи їх випромінювати світло.

5. Термолюмінесценція, що виникає при нагріванні та збуджує електрони в атомах або молекулах речовини, змушуючи їх переходити на більш високі енергетичні рівні. Коли електрони повертаються на свої основні рівні, вони випромінюють світло. Термолюмінесценція використовується в дозиметрії для вимірювання рівня радіаційного опромінення.

За часом післясвітіння розрізняють флуоресценцію (короткочасну люмінесценцію) і фосфоресценцію (тривалу люмінесценцію). Цей розподіл по суті застарів, бо не відображає механізму процесу і є вельми умовним. Так, фосфоресценція триває іноді годинами чи кілька діб, а іноді – кілька мікросекунд. Часом терміни "флуоресценція" і "фосфоресценція" використовують, щоб відрізнити люмінесценцію, яка відбувається при переходах із синглетних рівнів, від переходів, що відбуваються із метастабільних триплетних станів.

Флуоресценція – короткочасна люмінесценція з часом загасання $\tau \sim 10^{-8}$ – 10^{-9} с. Величина τ , експоненційний закон загасання, характер поляризації вказують на те, що флуоресценція є спонтанним випромінюванням.

Фосфоресценція – це люмінесценція, що зазвичай триває досить довго після вимкнення збудження (на відміну від флуоресценції). Фосфоресценція кристалофосфорів виникає при рекомбінації електронів і дірок, попередньо розділених під час збудження. Затягування післясвітіння в цьому випадку пов'язане із захопленням електронів і дірок "пастками", із яких вони можуть звільнитися, лише отримавши додаткову енергію, що визначається глибиною "пастки".

Для апробації методики синтезу неорганічного кристалічного люмінофора нами обрано калій алюміній сульфат додекагідрат легований рідкісноземельними елементами. Вибір калій алюмінієвого галуна в якості матричної структури обумовлений різними причинами. Зокрема, інтерес до подвійних сульфатів невпинно зростає через їх цікаву структуру, низько вартісну процедуру синтезу, цікаві фізичні властивості та можливість їх застосування в широкому діапазоні галузей, таких як накопичення енергії, дозиметрія та медицина [4]. Окрім цього калій алюмінієвий галун характеризується широкою областю пропускання, тому може бути використаний в якості матричної структури люмінесцентного матеріалу у видимій області спектру.

Вирощування кристалів калій алюміній додекагідрату легованого рідкісноземельним елементом здійснювали із насичених за кімнатної температури водних розчинів. Насичений розчин готувався із 10 г готової подвійної солі та 80 мл дистильованої води. В якості леуючої добавки використовували розчин хлориду гадолінію та європію, що попередньо отримували шляхом розчинення гадоліній (III)/європій (III) оксиду у соляній кислоті. Маса оксидів РЗЕ становила 100 мг. Розчин хлориду РЗЕ добавляли до розчину калій алюміній сульфату і перемішували і після цього готові розчини, що містилися у стаканах залишали в лабоарторії протягом 4 тижнів. В результаті із розчинів викристалізувалися кристали розміром від 0.3x0.3x0.3 мм до 12x12x0.5 мм. Одержані кристали досліджувалися методами диференційного термічного та рентгенівського фазового аналізу.

Література

1. Chemistry (IUPAC), The International Union of Pure and Applied. "IUPAC - luminescence (L03641)". goldbook.iupac.org. Retrieved 2023-12-03.
2. Valeur, Bernard; Berberan-Santos, Mário N. (2011-06-01). "A Brief History of Fluorescence and Phosphorescence before the Emergence of Quantum Theory". *Journal of Chemical Education*. 88 (6): 731–738.
3. Braslavsky, S. E. et al.; Glossary of Terms used in Photochemistry, 3rd edition (IUPAC recommendations 2006), *Pure Appl. Chem.* 2007, 79, 293465.
4. Ahmed Souemti, Islem Labidi, Adel Megriche Spectroscopic properties and conduction mechanism of $KAl(SO_4)_2 \cdot xSm$: A multifunctional materials for optical and electrochemical applications. *Ceramics International*. 2022, 48(15), 21552-21560.

ВИВЧЕННЯ ОПТИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ СПОЛУК K_2TeI_6 Та Rb_2TeBr_6

Дербаль Е.М., Барчій І.Є., Зубака О.В., Погодін А.І., Гаврильцо Г.Ю., Росоха І.В.
Кафедра неорганічної хімії
e-mail: derbal.elvira@student.uzhnu.edu.ua

Серед функціональних неорганічних матеріалів значна увага приділяється складним галогенідним сполукам, які володіють перспективними для напівпровідникових елементів люмінесцентними, оптичними та іншими властивостями. Встановлення напрямків можливого практичного використання перовскітних сполук K_2TeI_6 та Rb_2TeBr_6 визначається вивченням їх кристалічної структури та оптоелектричних властивостей.

Кристалохімічний аналіз показав, що сполука K_2TeI_6 кристалізується у моноклінній сингонії, ПГ P_12_1/C_1 , $a=7.985 \text{ \AA}$, $b=8.171 \text{ \AA}$, $c=13.928 \text{ \AA}$, $\beta=124.5^\circ$; $V=748.93 \text{ \AA}^3$ (структурний тип $Itm-K_2SnCl_6$) Чотири координаційні октаедри аніонних груп $[TeI_6]^{2-}$ розташовуються у вершинах скошеного паралелепіпеду, два знаходяться в середині на осі симетрії, між якими розташовані чотири катіони K^+ (рис.1). Координаційні октаедри $[TeI_6]^{2-}$ утворені шістьма іонами/атомами I, які оточують іони/атом Te^{4+} і розташовані у вершинах дещо спотворених (деформованих) тетрагональних біпірамід. В аніоні $[TeI_6]^{2-}$ зв'язки мають різну довжину Te–I, яка коливається в межах 2.923-2.937 \AA . Катіони K^+ координують 12 зв'язками K–I навколо себе аніонні підгрупи. Довжина зв'язків K–I коливається в межах 3.626-5.173 \AA .

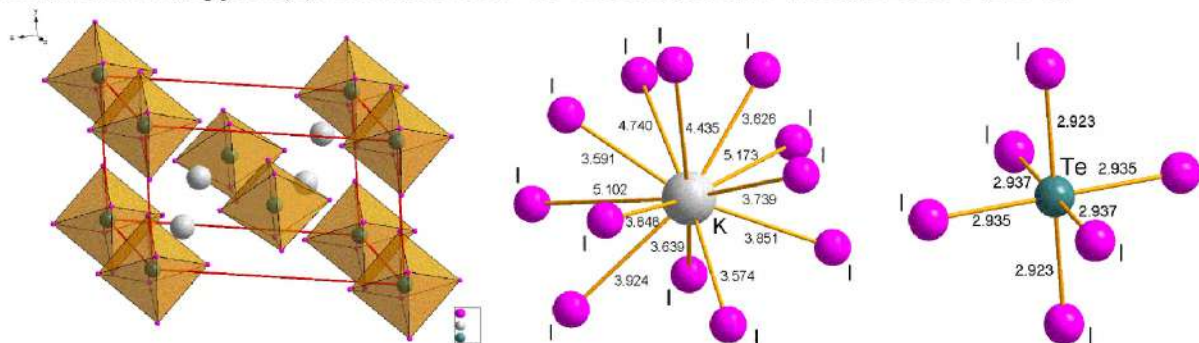


Рис.1. Укладання аніонних груп $[TeI_6]^{2-}$, координаційне оточення атомів Te та K у будові сполуки K_2TeI_6

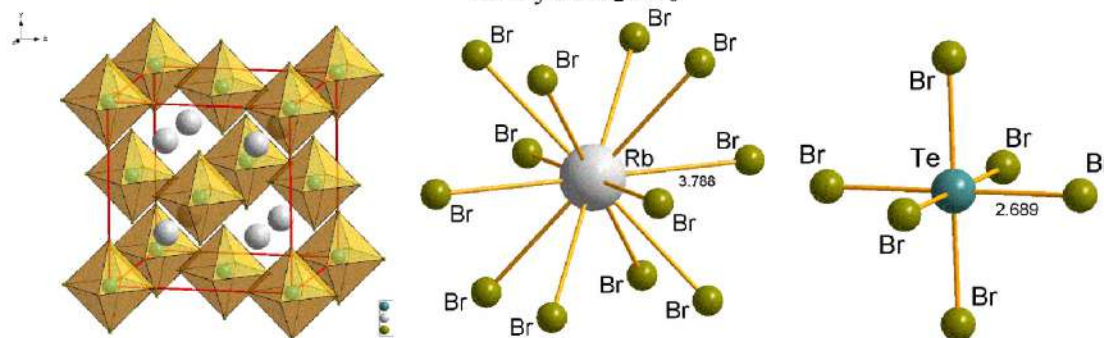


Рис.2. Укладання аніонних груп $[TeBr_6]^{2-}$, координаційне оточення атомів Te та Rb у будові сполуки Rb_2TeBr_6

Сполука Rb_2TeBr_6 кристалізується у кубічній сингонії, ПГ $Fm-3m$, $a=10.66 \text{ \AA}$; $V=1212.2 \text{ \AA}^3$ (структурний тип K_2PtCl_6). У структурі сполуки Rb_2TeBr_6 координаційні октаедри $[TeBr_6]^{2-}$ розташовуються у вершинах та центрах сторін великого куба, між ними розміщені іони/атоми Rb^+ (рис.2). Координаційні октаедри $[TeBr_6]^{2-}$ утворені шістьма іонами/атомами Br^- , які оточують іони/атом Te^{4+} і розташовані у вершинах правильних тетрагональних біпірамід, довжина Te–Br становить 2.689 \AA Іони/атоми Rb^+ статистично займають позиції $8c$

(рис.3.9) та знаходяться у 12-координатній геометрії з 12 еквівалентними іонами/атомами Br_6 . Всі зв'язки $\text{Rb}-\text{Br}$ мають однакову довжину 3.778 Å.

При зменшенні співвідношення іонних радіусів катіона до аніона від $r(\text{Rb})/r(\text{Br})=0.75$ до $r(\text{K})/r(\text{I})=0.60$ спостерігається перехід від кубічної до моноклінної структури (рис.3).

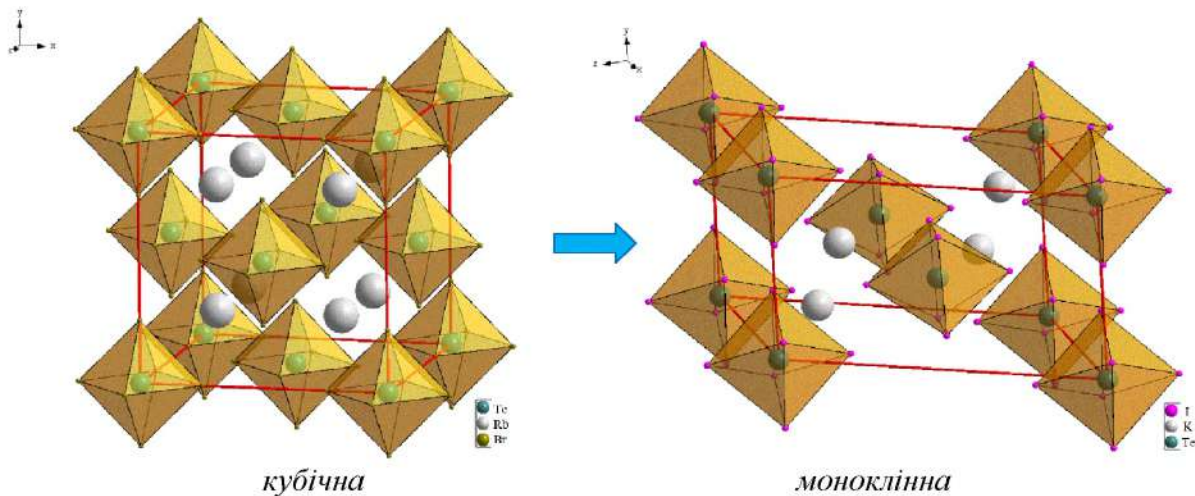


Рис.3. Перехід від кубічної Rb_2TeBr_6 до моноклінної структури K_2TeI_6

Аналіз міжатомних відстаней у сполуках K_2TeI_6 та Rb_2TeBr_6 показав, що при заміні $\text{K} \rightarrow \text{Rb}$ відбувається зростання міжатомних відстаней $\text{K}(\text{Rb})-\text{Br}(\text{I})$, що свідчить про збільшення ступеня іонності хімічного зв'язку в цьому напрямку. За рахунок зростання ковалентних радіусів при замінах $\text{Br} \rightarrow \text{I}$ спостерігається збільшення міжатомних відстаней $\text{Te}-\text{Br}(\text{I})$ та зменшення ступеня іонності хімічних зв'язків. Дані сполуки можна розглядати як «острівкові» іонні сполуки, де роль катіона відіграють елементи $\text{K}(\text{Rb})$, роль аніонів – стабільний комплексний іон $[\text{TeBr}_6(\text{I}_6)]^{2-}$. Збільшення іонності зв'язку $\text{K}(\text{Rb})-\text{Br}(\text{I})$ при заміні $\text{K} \rightarrow \text{Rb}$ у зовнішній сфері, завдяки транс-впливу у системах зв'язків $\text{K}(\text{Rb})-\text{Te}-\text{Br}(\text{I})$, призводить до незначного зростання ступеня ковалентності зв'язку у внутрішній сфері комплексного іону $[\text{TeX}_6]^{2-}$.

Основним параметром енергетичного спектра напівпровідників є ширина забороненої зони E_g – енергетична відстань між вершиною валентної зони (ВЗ) та дном зони провідності (ЗП). Експериментальні дослідження оптичних спектрів в області поглинання дають інформацію щодо енергетичного спектру електронів поблизу країв зони провідності і забороненої зони.

Графічні залежності оптичних спектрів пропускання від довжини хвилі $T = f(\lambda)$ сполук K_2TeI_6 та Rb_2TeBr_6 представлені на рис.4. На графіках присутні по два прямолінійних відрізка: перший, для малих довжин хвиль λ і великих значень E , характеризує міжзонні переходи (ВЗ \rightarrow ЗП) електронів з випромінюванням фононів, другий, при великих λ і малих E , описує процеси поглинання фононів. Перетин першого відрізка з віссю довжин хвиль λ дає значення $E_g + E_{\text{phonon}}$ (для сполуки K_2TeI_6 $\lambda = 679$ нм, $E = 1.85$ еВ, для сполуки Rb_2TeBr_6 $\lambda = 563$ нм, $E = 2.20$ еВ), перетин другого характеризує $E_g - E_{\text{phonon}}$ (для сполуки K_2TeI_6 $\lambda = 775$ нм, $E = 1.61$ еВ, для сполуки Rb_2TeBr_6 $\lambda = 569$ нм, $E = 2.18$ еВ). Довжина відрізка між точками перетину обох прямих з віссю довжин хвиль λ відповідає подвоєній енергії фононів, які взаємодіють з електроном $2E_{\text{phonon}}$ (для сполуки K_2TeI_6 0.24 еВ, для сполуки Rb_2TeBr_6 0.02 еВ). Середина цього відрізка відповідає енергії фононів, рівній ширині забороненої зони непрямозонного напівпровідника E_g . Експериментальні розрахунки показали, що для сполуки K_2TeI_6 $E_g = 1.73$ еВ, $E_{\text{phonon}} = 0.12$ еВ, для сполуки Rb_2TeBr_6 $E_g = 2.19$ еВ, $E_{\text{phonon}} = 0.01$ еВ.

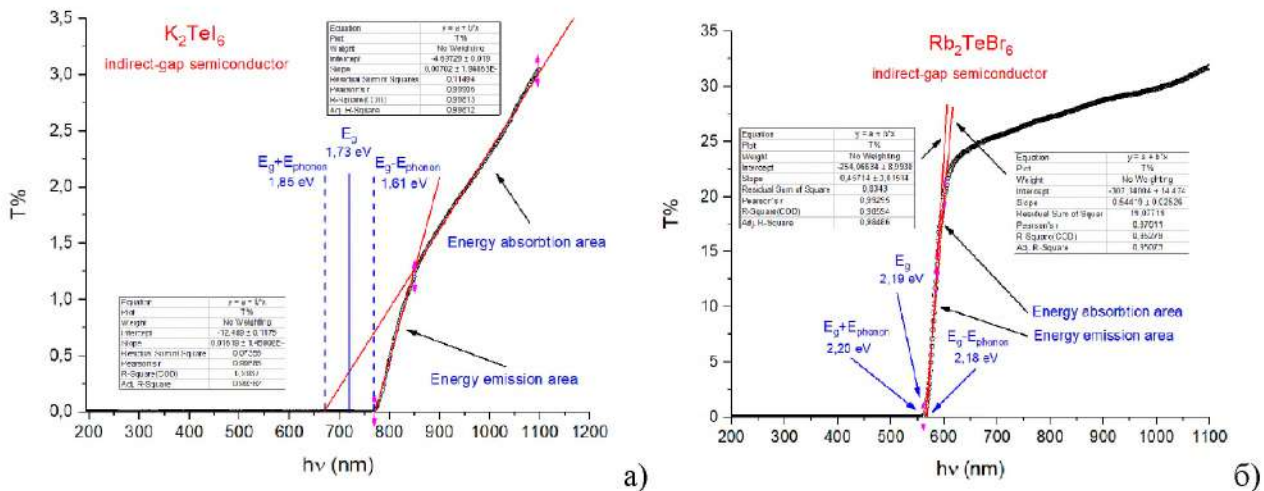


Рис.4. Спектри пропускання $T = f(\lambda)$ сполук K_2TeI_6 (а) та Rb_2TeBr_6 (б)

Ab initio квантово-хімічні розрахунки електронної структури сполук K_2TeBr_6 та Rb_2TeI_6 проводили DFT-методом (теорія функціоналу густини) з використанням програмного пакету Quantum Espresso. Геометричну оптимізацію кристалічних структур сполук здійснювали із залученням ітераційного методу самоузгодженого поля (SCF) на основі алгоритму Брюдена–Флетчера–Гольдфарба–Шанно (BFGS). Результати DFT розрахунків представлені в таблиці.

Таблиця. Характеристики електронної структури сполук K_2TeI_6 та Rb_2TeBr_6 .

Сполука	Тип провідності	$E_{кр}$, eV	$E/атом$, eV	$E_{Фермі}$, eV	VZ_{max} , eV	ZP_{min} , eV	E_g , eV
K_2TeI_6	непрямозонний	-4252.72	-236.22	2.54	-1.07	0.68	1.75
Rb_2TeBr_6	непрямозонний	-4020.66	-111.69	3.13	-1.04	1.05	2.09

Для характеристики походження енергетичних рівнів розраховано загальну та парціальна густину станів атомів (DOS) сполук K_2TeI_6 та Rb_2TeBr_6 (рис.5-6). Верх валентної зони утворена $4p$ станами Броду (або $5p$ Йоду), а нижня частина зони провідності утворена $5p$ станами Te і $5s$ станами Br (або $6s$ стани I). Оптична ширина забороненої зони утворюється переходами електронів $Br(I) 4p(5p) \rightarrow Te 5p$.

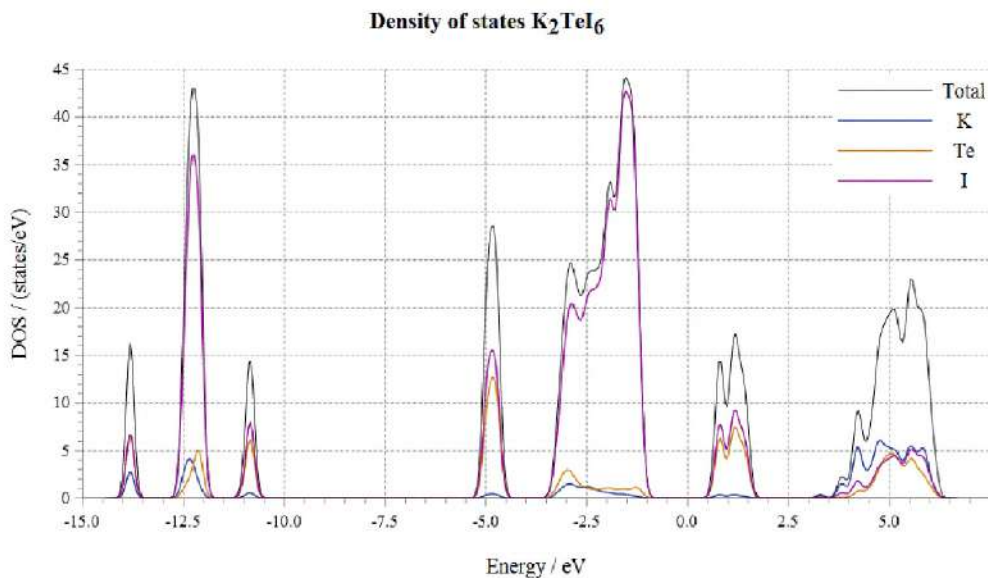


Рис. 5. Загальна та парціальна DOS сполуки та K_2TeI_6

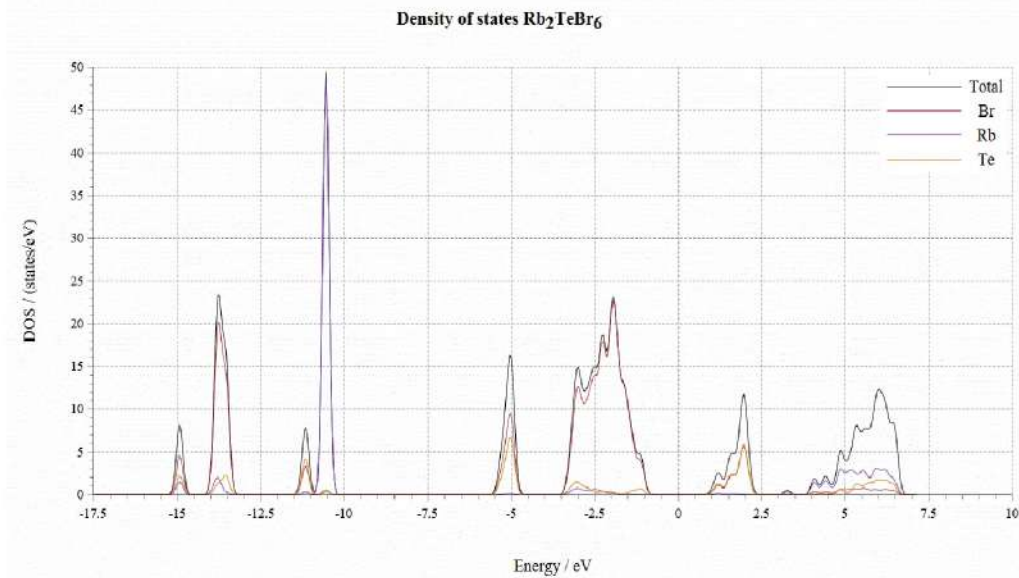


Рис. 6. Загальна та парціальна DOS сполуки та Rb_2TeBr_6

У сполуці K_2TeI_6 стани $4s$ калію розташовані при -12.1 eV, $4p$ при -12.0 eV, -2.5 eV, $5s$ при 4.5 eV, 4.9 eV, $5p$ при 5.3 eV, 6.1 eV. Рівні $5s$ телуру становлять -13.6 eV, -11.9 eV, -10.6 eV, $5p$ при -4.5 eV, 1.0 eV, 1.5 eV, $4d$ при 5.85 eV. Рівні $4p$ йоду -4.6 eV, серія піків $-2.7 \div -1.3$ eV, $3d$ 5.85 eV.

У сполуці Rb_2TeBr_6 стани $5s$ рубідію розташовані при -26.6 eV, $5p$ при -10.7 eV. Рівні атома Телуру становлять -15.1 eV ($4s$), -11.3 eV ($4s$), -11.2 eV ($4p$), -5.2 eV ($4p$), серія піків $1.0 \div 1.7$ eV ($5p$), -13.7 eV ($3d$), -3.2 eV ($3d$), серія піків $4.6 \div 6.1$ eV ($4d$) Рівні атому галогену Br $4s$ -15.1 eV, -13.9 eV, Br $4p$ -5.2 eV, -3.2 eV, серія піків $-2.4 \div -1.1$ eV, 1.8 eV.

Розрахована ширина забороненої зони складає $E_g = 1.75$ eV для K_2TeI_6 , $E_g = 2.09$ eV для Rb_2TeBr_6 , що добре узгоджується з даними досліджень оптичних спектрів пропускання. При переходах $\text{K} \rightarrow \text{Rb}$ значення ширини забороненої зони зростає, що пояснюється збільшенням іонної складової хімічного зв'язку. Також значення енергії Фермі ($E_{\text{Фермі}}$) для Rb-вмісних сполук вище, ніж для K-вмісних сполук.

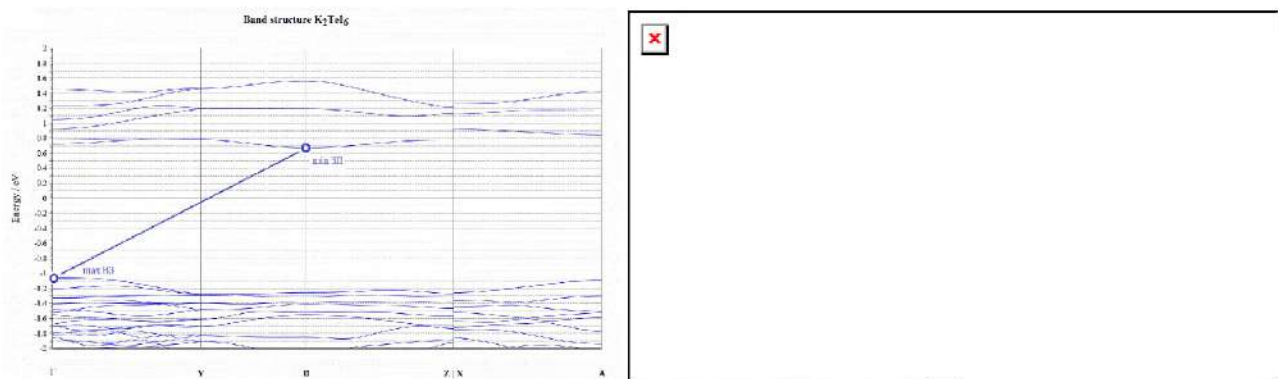


Рис. 7. Зонна структура сполук K_2TeI_6 , Rb_2TeBr_6

Максимум валентної зони ($B3_{\text{max}}$) і мінімум зони провідності ($3P_{\text{min}}$) сполук із структурою перовскіту розташовані в різних точках високої симетрії першої зони Бріллюена (БЗ) (рис. 7), що вказує на непрямозонний тип провідності сполук K_2TeI_6 та Rb_2TeBr_6 .

ДИНАМІКА НАВЧАЛЬНИХ ДОСЯГНЕНЬ УЧНІВ ПРИ ВИВЧЕННІ ХІМІЇ У ШКОЛІ

Цірик Л.П., Кохан О.П., Погодін А.І.
Кафедра неорганічної хімії
e-mail: tsiryk.liliya@student.uzhnu.edu.ua

Питання оцінювання навчально-пізнавальної діяльності учнів на принципах гуманізму – наукове коло досліджень таких учених, як: Б. Бович, Н. Софій, О. Щербак [1], І. Бургун [2], Т. Канівець [3]. Контроль навчальної діяльності учнів з хімії є обов'язковим і певною мірою визначальним компонентом навчального процесу, оскільки дозволяє виявити рівень сформованості як предметних, так і загально-навчальних компетентностей учнів та одночасно виконує цілий ряд функцій, що мають великий вплив на організацію навчання з предмету та самоорганізацію школяра до вивчення цього предмету. На жаль, не завжди офлайн-навчання доступне всім учням, які навчаються в школі в силу різних обставин (спочатку у зв'язку з пандемією COVID 19, а пізніше – повномасштабне вторгнення сусідньої держави, та і не у всіх школах є достатньо місць у сховищі для всіх учнів одночасно під час повітряної тривоги тощо). У такому випадку навчальний заклад змушений вести навчання змішано або повністю переходити на онлайн-навчання за допомогою дистанційних технологій [4].

Метою даного дослідження було прослідкувати динаміку навчальних досягнень учнів з хімії впродовж вивчення даного предмету при різних формах навчання.

Експериментальні дослідження проводились у Широколузькому ліцеї Нересницької сільської ради Тячівського району протягом 2019-2023 років ЗГІДНО календарно-тематичних планувань для 7-11 класів, що відповідають «Програмі для загальноосвітніх навчальних закладів. Хімія (рівень стандарту) 7-9 класи (затверджена наказом МОН від 07.06.2017 № 804)» [5] та «Програмі для загальноосвітніх навчальних закладів. Хімія (рівень стандарту) 10-11 класи (затверджена наказом МОН від 23.10.2017 № 1407)» [6]. Дані навчальні програми реалізовані з використанням підручників з хімії, що рекомендовані МОН України [7-11]. Щоб дослідити динаміку вивчення хімії учнями в період з 2019/2020 н.р. по 2023/2024 н.р. нами було вибрано паралелі А і Б класів, які в цей час вчилися з 7 класу по І семестр 11 класу. Проаналізовано річні оцінки (р.о.) та семестрову оцінку в 11 класі, в даних класах навчалось по 18 учнів.

Нами були розраховані такі моніторингові характеристики знань учнів як середній бал (СБ) та відсоток відмінників (ВВ). Ці показники дають можливість аналізувати рівень навченості учнів, вносити необхідні зміни у навчально-виховний процес, відслідковувати динаміку змін у рівнях навчальних досягнень учнів. Результати представлено в Таблиці 1-2.

Таблиця 1. Середній бал та відсоток відмінників 7-11 (А класу)

	7-А 2019/2020 н.р. річна оцінка	8-А 2020/2021 н.р. річна оцінка	9-А 2021/2022 н.р. річна оцінка	10-А 2022/2023 н.р. річна оцінка	11-А 2023/2024 н.р. І сем
СБ	8,06	7,39	7,44	7,22	7,21
ВВ	22	6	6	11	11

Таблиця 2. Середній бал та відсоток відмінників 7-11 (Б класу)

	7-Б 2019/2020 н.р. річна оцінка	8-Б 2020/2021 н.р. річна оцінка	9-Б 2021/2022 н.р. річна оцінка	10-Б 2022/2023 н.р. річна оцінка	11-Б 2023/2024 н.р. І сем
СБ	7,50	7,06	6,89	6,61	6,61
ВВ	11	11	6	6	6

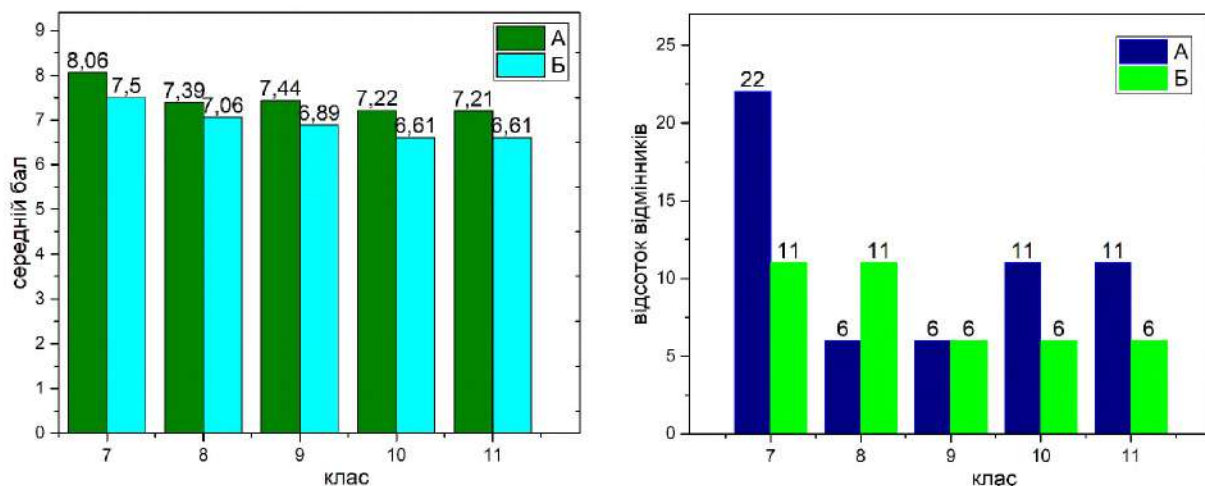


Рис. 1. Середній бал та відсоток відмінників у 7-11 класах.

Аналіз одержаних результатів (рис.1) вказує на те, що як у А, так і у Б класі показники навчання спадають з 7 до 11 класу, при чому вони нижчі у Б класі \approx на 0,6 (0,7) балів якщо мова йде про середній бал на протязі всього навчання і у два рази менший відсоток відмінників за винятком 8 класу (навпаки) та 9 класу (однаковий). При чому, зважаючи на невелику кількість учнів у класах, кількісно відмінники складають в основному 1 (Б клас) або 2 (А клас) учні, за винятком 2019-2020 н.р. для 7-А класу.

Таблиця 3. Рівні навчальних досягнень учнів 7-11 (А класу)

Рівні навчальних досягнень	7-А 2019/2020 н.р. р. о.	8-А 2020/2021 н.р. р. о.	9-А 2021/2022 н.р. р. о.	10-А 2022/2023 н.р. р. о.	11-А 2023/2024 н.р. I сем.
«низький» (1-3)	0	0	0	0	0
«середній» (4-6)	3	7	4	5	6
«достатній» (7-9)	11	10	13	11	10
«високий» (10-12)	4	1	1	2	2

Таблиця 4. Рівні навчальних досягнень учнів 7-11 (Б класу)

Рівні навчальних досягнень	7-Б 2019/2020 н.р. р. о.	8-Б 2020/2021 н.р. р. о.	9-Б 2021/2022 н.р. р. о.	10-Б 2022/2023 н.р. р. о.	11-Б 2023/2024 н.р. I сем.
«низький» (1-3)	0	0	0	0	0
«середній» (4-6)	6	10	10	10	10
«достатній» (7-9)	10	7	7	7	7
«високий» (10-12)	2	2	1	1	1

Проаналізувавши кількість оцінок «достатнього» та «середнього» рівня (Таблиці 3-4) бачимо, що тенденція впродовж досліджуваних років також іде до збільшення оцінок 5 і 6 починаючи з 8 класу, оцінок 7-9 – за рахунок зменшення відмінників. Особливо це прослідковується у А класі, у порівнянні з 2019-2020 навчальним роком, що узгоджується з даними Таблиці 1.

Причинами такого погіршення динаміки навчальних досягнень учнів, особливо у порівнянні з 7 класом, може бути частково дистанційний формат навчання, коли учні змушені організувати своє навчання самостійно, без очної присутності вчителя, особливо починаючи з 2021 року для Б класу, де рівень навчання знаходиться на одному рівні. Другою причиною може бути психологічний стан учнів у зв'язку з військовим станом, коли майже 2-3 рази на тиждень вони змушені переривати уроки через повітряну тривогу. Також можливими причинами виявлених недоліків у навчальних досягненнях учнів є недостатній інтерес до навчального предмету в учнів та відсутність системи при виконанні домашніх завдань.

Література

1. Щербак О.І., Софій Н.З., Бович Б.Ю. Теорія і практика оцінювання навчальних досягнень: навчально-методичний посібник. Івано-Франківськ : *Лілея НВ*, 2014. С. 136.
2. Бургун І. В. Підготовка компетентного випускника як реалізація гуманістичної місії середньої освіти. [Електронний ресурс]. Режим доступу: https://www.narodnaosvita.kiev.ua/?page_id=2589.
3. Канівець Т.М. Основи педагогічного оцінювання: навчально-методичний посібник. Ніжин: *ПП Лисенко М. М.*, 2012. С. 102.
4. Воротнікова І.П. Дистанційне та змішане навчання в школі. Путівник. Київ: *ун-т ім. Б. Грінченка*, 2020. С. 48.
5. Програма для загальноосвітніх навчальних закладів. *Хімія (рівень стандарту) 7-9 класи* (затверджена наказом МОН від 07.06.2017 № 804). Київ: *Перун*, 2017. [Електронний ресурс]. Режим доступу: <https://goo.gl/GDh9gC>
6. Програма для загальноосвітніх навчальних закладів. *Хімія (рівень стандарту) 10-11 класи* (затверджена наказом МОН від 23.10.2017 № 1407). Київ: *Перун*, 2017. [Електронний ресурс]. Режим доступу: <https://goo.gl/fwh2BR>.
7. Буринська Н.М. Хімія: підручник для 7 класу загальноосвітніх навчальних закладів. Київ: *Педагогічна думка*, 2017. С. 112.
8. Буринська Н.М. Хімія: підручник для 8 класу загальноосвітніх навчальних закладів. Київ: *Педагогічна думка*, 2016. С. 144.
9. Буринська Н.М., Величко Л.П. Хімія: підручник для 9 класу загальноосвітніх навчальних закладів. Київ: *Педагогічна думка*, 2017. С. 152.
10. Ярошенко О.Г. Хімія: підручник для 10 класу загальноосвітніх навчальних закладів. Київ: *УОВЦ «Оріон»*, 2018. С. 208.
11. Ярошенко О.Г. Хімія: підручник для 11 класу загальноосвітніх навчальних закладів. Київ: *УОВЦ «Оріон»*, 2019. С. 208.

ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ РЕАЛІЗАЦІЇ КОНЦЕПЦІЇ НУШ ПРИ ВИКЛАДАННІ ХІМІЇ У 7 КЛАСІ ЗСОО

Фіглар А.Ю., Сабов М.Ю.
Кафедра неорганічної хімії
e-mail: fihlar.alina@student.uzhnu.edu.ua

Нова українська школа (НУШ) є ключовою реформою Міністерства освіти і науки України. Її головна мета, змінити умови навчання таким чином, щоб в комфортних умовах навчання учні набули не тільки знання, а й уміння застосовувати їх у повсякденному житті. Сама реформа НУШ розрахована на роки і започатковувалась вона поетапно від початкових класів. Зокрема, у вересні 2017 року було ухвалено новий Закон “Про освіту”, який регулює основні засади нової освітньої системи, а у лютому 2018 року Кабінет Міністрів затвердив новий Державний стандарт початкової освіти. З 2018/2019 навчального року за цим стандартом розпочали навчання першокласники по всій Україні. Основні засади реформи шкільної освіти та орієнтовний графік впровадження реформи викладено в Концепції Нової української школи [1]. Серед найважливіших складових і нагальних проблем модернізації освіти є її компетентизація. Зважаючи на це, визначальним ключовим компонентом серед зазначених у концепції НУШ є новий зміст освіти, заснований на формуванні компетентностей, потрібних для успішної самореалізації в суспільстві.

В даній роботі проведено порівняння підручників попередніх років з хімії, та підручника складений за модельною програмою НУШ з хімії [2]. Для порівняння взято підручники авторства Павла Попеля і Людмили Крикля – «Підручник з Хімії для 7 класу» (2024 рік) [3], та підручник цих же авторів 2020 року [4].

Перша відмінність двох підручників – це обсяг. В підручнику 2020 року 33 параграфи, а в підручнику 2024 року – 22. Пов’язано це із відмінностями програм. В модельній програмі НУШ на хімію в 7 класі виділено 35 годин, за старою програмою було - 50. За новою програмою було випущено такі теми як «Маркування небезпечних речовин», «Поширеність хімічних елементів», «Маса атома, відносна маса атома», «Валентність хімічних елементів», «Відносна молекулярна маса» та два розділи присвячені вивченню кисню та води. Скорочена кількість практичних завдань.

Варто зауважити, що щодо змістовного навантаження підручників 2020 та 2024 року суттєвих змін не спостерігається. Наявні у підручнику 2024 року теми фактично дублюють аналогічні підручника 2020 року. Рисунки практично ідентичні, нові за змістом завдання фактично відсутні за невеликим виключенням, теоретичний матеріал викладений у параграфах за змістом ідентичний (у переважній більшості випадків просто перефразований). Єдиним нововведенням є наявність для деяких тем QR кодів за якими учні через інтернет ресурси можуть ознайомитись з певними поняттями, це узгоджується з однією із складових концепції НУШ щодо ширшого залучення інформаційно комп’ютерних технологій при вивченні відповідних дисциплін.

Попередній аналіз підручників рекомендованих МОН України для 7 класу з хімії за попередньою та модельною згідно концепції НУШ програмами вказує на те, що фактично оновлення змісту не прослідковується.

Література

1. Нова українська школа. Концептуальні засади реформування. Київ: *МОН України*, 2016, 40.
2. Модельна навчальна програма «Хімія. 7–9 класи» для закладів загальної середньої освіти (автор Григорович О. В.) – Міністерство науки та освіти України (2023 рік); «Хімія 7–9 класи» - Навчальна програма для загальноосвітніх навчальних закладів, Величко Л.П., Дубовик О.А., Бобкова О.С., Баланенко В.В., Пугач С.В., Рогожнікова О.В. (2017);
3. П. Попель, Л. Крикля. Підручник «Хімія 7 клас». Київ : *ВЦ «Академія»*, 2024, 152.
4. П. Попель, Л.Крикля. Підручник «Хімія 7 клас». Київ : *ВЦ «Академія»*, 2020, 216.

СКРІНІНГ КАТІОННИХ БАРВНИКІВ ЩОДО ОСАДЖЕННЯ ТА ЕКСТРАКЦІЇ ПЕРФТОРОКТАНОАТУ

Бринзей М.М., Студеняк Я.І.

Кафедра аналітичної хімії

ДВНЗ «Ужгородський національний університет»

e-mail: brynzei.myroslava@student.uzhnu.edu.ua

Перфтор- (поліфтор-) органічні речовини (ПФОР/PFOS) група органічних речовин, які містять багато атомів фтору, пов'язаних із аліфатичним ланцюгом. База даних PubChem містить понад 6 мільйонів унікальних сполук цієї групи. ПФОР почали використовувати у технології з середини минулого століття для виготовлення фторполімерного покриття та продуктів, що проявляють високу стійкість до температури, масел, жиру та води. Такі сполуки використовують для виготовлення водонепроникної одяжі, меблів, клеїв, харчової упаковки, жаростійких антипригарних поверхонь посуду для приготування їжі, електроізоляції, а також у ролі поверхнево-активних речовин, наприклад, при гасінні пожеж нафтопродуктів та ін. У свій час ПФОР відіграли ключову роль в економічному зростанні фірм DuPont, 3M, W. L. Gore & Associates, які виробляють широко відомі матеріали під брендами Teflon та Gore-Tex. Серед поширених ПФОР чітко виділяються два представники: перфтороктансульфонова (PFOS) та перфтороктанова (PFOA) кислоти, які викликають значне занепокоєння людської спільноти у зв'язку з їх надзвичайно високою стійкістю у довкіллі, і які характеризують як - персистентні органічні забруднювачі навколишнього середовища, що здатні до біоаккумуляції та прояву негативного впливу на здоров'я. Міжнародна організація з досліджень раку (IARC) відносить PFOA до групи канцерогенних для людини, а PFOS - до групи імовірно канцерогенних.

Останнє десятиліття характеризується посиленою увагою у світі до методів визначення таких речовин у різноманітних об'єктах довкілля, що пов'язано із потребою їх детектування при концентрації на рівні нг/л чи нг/кг. Єдиним загальноприйнятним стандартним методом визначення ПФОР є рідинна хроматографія з декілька кратним мас-спектрометричним детектуванням (LC/MS/MS...), однак, відповідне обладнання є коштовним і малодоступним для багатьох лабораторій, і тому, зараз продовжується активний пошук, направлений на розробку експресних тест-методів виявлення, визначення та й вилучення ПФОР із ґрунтів та вод. У науковій літературі описано чисельні дослідження, пов'язані з розробкою тест-методів, і в їх числі з використанням окремих катіонних барвників. Використання саме катіонних барвників пов'язано з можливостями утворення та міжфазним розподілом їх іонних асоціатів із аніонами PFOA та аналогами. Проте, систематичні дослідження таких систем не описані, що викликає неабиякий інтерес, і послужило метою нашої роботи.

На першому етапі нами було проведено скрінінгові дослідження ефектів взаємодії більше 20 представників катіонних барвників наступних груп: азинових (нейтральний червоний, сафранін Т, червоний Магдала), тіазинових (метиленовий голубий та Азур 1), оксазинових (Нільський синій), акридинових (акридиновий оранжевий та жовтий), родамінових (родамін С, бутилродамін С, родамін 6Ж), трифенілметанових (кристалічний фіалковий, діамантовий зелений, метиловий зелений, метиловий фіалковий, Вікторія голуба Р), ціанінових (астрафлосин Ф, дііндодикарбоціанін, дибензоіндокарбоціанін, астразоновий фіалковий ЗР, астразоновий червоний ЗЖ, катіонний рожевий 2С) та інших класів (катіонний синій О), в т. ч. синтезованих на кафедрі (ІМП-Кор).

Встановлено, що здатністю до осадження мікрокількостей ІА PFOA із кислих середовищ відзначається тільки деякі ціанінові барвники, і особливо ІМП-Кор, що відрізняє ці асоціати від ІА нефторованих аналогів. Скрінінгові дослідження були здійснені і для вилучення ІА неполярними екстрагентами (CCl₄ та гексан), виявлені найбільш ефективні в екстракційному плані барвники. Для більшості сполук спостерігається тільки флотація асоціатів, і тільки для деяких вдалось одержати значний ефект із можливістю концентрування та наступного флуорисцентного визначення.

ВИЗНАЧЕННЯ ПОКАЗНИКІВ ЯКОСТІ КОСМЕТИЧНИХ ЗАСОБІВ ДЛЯ ДІТЕЙ

Голодняк О.І., Сухарева О.Ю.

Кафедра аналітичної хімії

e-mail: kolesnyk.oleksandra@student.uzhmu.edu.ua

Косметичні засоби відносять до товарів щоденного використання. З розвитком людства набуває популярності і косметика для дітей. Надзвичайно важливим критерієм косметики є гіпоалергенність та безпека, адже дитяча шкіра не має захисного шару як у дорослих. Агресивні речовини, такі як штучні ароматизатори, парабени та сульфати майже відсутні у дитячій косметиці [1]. Окрім токсикологічного профілю та потенціалу подразнення шкіри та слизових оболонок, важливими критеріями відбору є особливо мікробіологічна якість та чистота сировини. Сировина має бути перевірена на низку можливих забруднень, таких як важкі метали або залишки пестицидів. Такі види небажаних речовин можна допускати лише в надзвичайно низьких нетоксичних слідових концентраціях. Постійний і ретельний аналіз сировини має важливе значення для забезпечення постійної високої якості готової продукції [2].

Значення рН шкіри дитини до 3-х років – 6,5–7,2, у віці 7–10 років – 5,0–6,0, в 14 років рН може знижуватись до 4,3. Гідроліпідна плівка дитячої шкіри тонша, зчеплення між корнеоцитами менше, роговий шар більш крихкий, дерма завтовшки в 3 рази менша, ніж у дорослої людини. Отже шкіра дитини більш чутлива, суха і потребує спеціального догляду, тому необхідно звернути увагу на засоби для догляду за дитячою шкірою, а саме піномийні засоби (гелі, шампуні тощо). Безпеку готового продукту оцінюють на основі токсикологічної оцінки сировини.

Окрім запаху, колір є одним із найважливіших чуттєвих сприйняття. Як і аромати, кольори можуть допомогти передати різну інформацію. Використання барвників у дитячій косметиці виробники звели до мінімуму. За умови дотримання індивідуальних обмежень щодо використання, визначених законодавством щодо косметики, і критеріїв чистоти, ці барвники також безпечні для використання в продуктах для немовлят і маленьких дітей. Барвники в косметичних продуктах майже не впливають на можливі сенсibiliзуючі або алергенні ефекти.

Поверхнево-активні речовини (мийні речовини) — це сполуки, які знижують поверхневий натяг рідин. Ця властивість дозволяє їм розчиняти жири та домішки, а також стабілізувати емульсії. Використання мюючих засобів, що містять ПАР, частково видаляє ліпіди з поверхні шкіри. Завдяки своїм поверхнево-активним властивостям багато чистих ПАР подразнюють шкіру та слизові оболонки. Завдяки вмілому поєднанню різних поверхнево-активних речовин ефект подразнення шкіри деяких речовин можна значно зменшити. Продукти для очищення шкіри та волосся для немовлят і маленьких дітей складаються з особливо м'яких комбінацій поверхнево-активних речовин. Крім того, до косметичних засобів для очищення шкіри та волосся додають зволожуючі та ліпідозміщувальні речовини, що дозволяють швидко відновити природний біологічний баланс поверхні шкіри після очищення [2].

Література

1. Петровська Л.С., Руда Т.Г., Сіра О.Б. Результати пошуку натуральної сировини для розробки та виробництва косметичних продуктів для дитячої шкіри. *Менеджмент та маркетинг у складі сучасної економіки, науки, освіти, практики: матеріали VIII міжнар. наук.-практ. дистанц. конф., м. Харків, 19 берез. 2020 р.* – Харків : НФаУ, 2020. С. 202-209.
2. https://safetyassessor.info/wp-content/uploads/2021/09/2004-10_SOFW_IKW_Childrens_and_Baby_Cosmetics.pdf

ФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ГЕПАРИНУ ЗА РЕАКЦІЄЮ СПЕЦИФІЧНОЇ АГРЕГАЦІЇ З КАТІОННИМ БАРВНИКОМ

Куштан Є.С., Студеняк Я.І.

Кафедра аналітичної хімії

ДВНЗ «Ужгородський національний університет»

e-mail: kushtan.yevhen@student.uzhmu.edu.ua

Гепарин належить до групи сульфатованих глікозаміногліканів змішаної полісахаридної природи, є природним антикоагулянтном крові та антитромботичним препаратом, який широко застосовується у лікарській практиці. Особливістю його лікарських форм є вузькі терапевтичні вікна та різноманітні джерела виділення у різних виробників, що потребує проведення аналітичного контролю. Найбільш часто використовуваними методами є активований частковий тромбoplastиновий час (АЧТЧ) і специфічний аналіз на анти-фактор X_a з використанням або методу згортання крові, або методу хромогенного субстрату. Серед інструментальних хімічних методів для визначення гепарину використовують наступні: РХ-МС, ЯМР, ВЕРХ з іоннообмінниками, фотометричні та люмінесцентні з барвниками чи наночастинками. Більшість із згаданих методів та реагентів є малодоступними для рядових лабораторій, тому існує потреба у розробці простих методик визначення гепарину, в т.ч. з використанням оптичних молекулярних зондів на основі катіонних барвників.

В роботі використано синтезований ціаніновий барвник на основі імідазо[1,2a]піридину, який проявив здатність до утворення специфічних агрегатів із деякими органічними сульфатами, в т.ч. із гепарином. Так, при контактуванні водних розчинів барвника із гепарином спостерігається гіпсохромний зсув максимуму світлопоглинання від 612 до 470 нм, а також значне звуження смуги світлопоглинання ($\Delta\lambda_{1/2}$ від ~ 140 до 60 нм). З'ясовано вплив різних факторів на специфічну агрегацію іонного асоціату, який утворюється у системі, і показано, що оптимальне значення рН взаємодії лежить у межах від рН 2 до 5,5, при цьому певну роль на аналітичний відіграє і природа буферного розчину. Так, серед досліджених буферних і рН-регулюючих розчинів на основі цитрату, тартрату, фосфату, оцтової, хлоридної кислот, малонату та малеїнату – останній виявився найбільш придатним для стабілізації отриманої аналітичної форми. Цікавим виявився той факт, що вимірювання аналітичного сигналу можна проводити при двох різних довжинах хвиль (470 та 612 нм), при цьому, кутовий коефіцієнт лінійної залежності від концентрації гепарину майже однаковий (але із протилежним знаком) у діапазоні активності гепарину від 0 до 4 МО/мл, а межа виявлення розрахована за 3S критерієм із даних п'яти фонових дослідів для вимірювань при 470 та 612 нм складає 0,018 та 0,1 МО/мл відповідно. Лінійна залежність також спостерігається і для залежності оптичної густини розчинів від концентрації барвника (до 10^{-4} М), при сталій концентрації гепарину. Остання залежність має вигляд двох, майже прямолінійних ділянок з доволі різким зломом, що свідчить про високу стійкість утвореної сполуки. Обговорюється імовірний склад асоціатів, які утворюються у водних розчинах.

З використанням дослідженої системи розроблено просту спектрофотометричну методику визначення гепарину у лікарських засобах для ін'єкцій, а також у гель-кремі. Визначення гепарину у гелях виявилось найбільш проблематичним, у зв'язку із наявністю у гелі вищих спиртів та їх сульфатованих похідних. Серед більш із п'яти випробуваних способів прободготовки, яка передбачала руйнування емульсії та відокремлення матриці, найкращі результати отримано при застосуванні екстракції сторонніх компонентів аміловим чи ізоаміловим спиртами із наступним центрифугуванням системи протягом 15 хвилин при 6000 об./хв. На відміну від високої правильності визначення гепарину в ін'єкціях, перевірка правильності визначення гепарину у гелях за методами добавок та зміни кратності обсягів проби показала можливість прояву відхилень результатів від заявлених виробником у межах 10%.

ВИКОРИСТАННЯ ПРИРОДНИХ РЕАГЕНТІВ В АНАЛІТИЧНІЙ ХІМІЇ

Метничук Х.Д., Фершал М.В.

Кафедра аналітичної хімії

e-mail: metnychuk.khrystyna@student.uzhnu.edu.ua

В останні роки хіміки та науковці в галузі хімічної промисловості зацікавились «Зеленою хімією». З точки зору аналітичної хімії це полягає у розробці та впровадженні у практику «зелених» аналітичних методів та методик аналізу. Такі методики передбачають заміну токсичних реагентів та розчинників на більш безпечні для людини та навколишнього середовища. Одним із способів досягнення такої мети полягає у використанні неочищених природних реагентів, що є малодослідженим тому залишається актуальним завданням аналітичної хімії. Термін «Зелена аналітична хімія» (ЗАХ) виник як похідне від «Зеленої хімії» і включає в себе напрямок наукових досліджень у галузі аналізу, спрямованих на розробку екологічно безпечних методик. Проводяться дослідження у напрямку зменшення негативного впливу на довкілля відповідних методик та вироблення нових принципів їх розвитку. Основною проблемою такого розвитку залишається компроміс між вимогами до якості отриманих аналітичних даних та забезпеченням екологічної привабливості [1].

Використання природних реагентів отриманих із поновлюваних джерел є одним з останніх напрямків у розвитку ЗАХ. До таких джерел відносять рослини, тварини та мікроорганізми, екстракти яких знаходять використання як рН чи Ред-Окс індикатори, реагенти для спектрофотометрії, флуориметрії та інших. Безпечність таких природних сполук відповідає 12 принципам ЗАХ [2]. Під терміном «природні реагенти» слід розуміти хімічні сполуки чи їх суміші отримані у вигляді екстрактів органів рослин чи тварин із незначною їх очисткою чи модифікацією, використані у розчинній формі чи сорбованому на носії. Велику частку природних сполук, що використовуються для розробки аналітичних методик складають забарвлені сполуки – пігменти. Прикладом є бетанін - природний пігмент, який використовують як харчовий барвник і отримують із соку буряка [3].

Основним недоліком барвника буряка є нестійкість в часі, що обмежує його використання. Бетанін є глікозидом, що містить 1,2 та 1,3 діольні групи здатні до утворення естерів з H_3BO_3 . Відомо, що H_3BO_3 збільшує стійкість аскорбінової к-ти до окиснення, тому нами було проведено дослідження впливу H_3BO_3 та $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ на стійкість барвника. Показано, що на фоні H_3BO_3 забарвлення залишається стабільним протягом тижня, при зберіганні на світлі, в темноті чи на холоді. На фоні $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ проходить гідроксилювання, а водні розчини стабільні лише 2-3 дні. З використанням універсальної буферної суміші встановлено, що оптимальне рН існування забарвленої форми лежить у межах 4-6. З використанням знайдених умов проведено скрінінгове дослідження показало, що катіони Ca^{2+} , Cu^{2+} , Cd^{2+} , Zn^{2+} — зменшують інтенсивність забарвлення в часі, що може бути використане для розробки «зелених кінетичних аналітичних методик» їх визначення.

Література

1. Grudpan K., Hartwell, S. K., Lapanantnoppakhun, S., McKelvie, I. The case for the use of unrefined natural reagents in analytical chemistry—a green chemical perspective. *Analytical Methods*. 2010, 2(11), 1651-1661.
2. Gałuszka A., Migaszewski Z., Namieśnik J. The 12 principles of green analytical chemistry and the SIGNIFICANCE mnemonic of green analytical practices. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 2013, 50, 78-84.
3. Letícia Christina Pires Gonçalves a , Marco Aurélio de Souza Trassi a , Nathana Barbosa Lopes a , Felipe Augusto Dörr b , Monica Teixeira dos Santos a , Wilhelm Josef Baader c , Vani Xavier Oliveira Jr. a , Erick Leite Bastos. A comparative study of the purification of betanin. *Food Chemistry*. 2012, 130, 231–238.

ПІДБІР ЕФЕКТИВНИХ ПІДХОДІВ ВИКЛАДАННЯ НА УРОКАХ ХІМІЇ

Рахівська Н.Д., Русин. В.М.
Кафедра аналітичної хімії
[e-mail: vasilina.lavra@uzhnu.edu.ua](mailto:vasilina.lavra@uzhnu.edu.ua)

Системно-структурний підхід, який використовується для вивчення методики навчання хімії, базується на розумінні цієї науки як комплексної системи. В цьому підході визнається, що навчання хімії в середній школі повинно виконувати три основні функції: освітню, виховну і розвивальну.

1. Освітня функція (Дидактика) - це аспект методики вивчається через дидактику, яка досліджує педагогічні аспекти навчання та передачу знань. Основною метою є забезпечення ефективного сприйняття теоретичного матеріалу з хімії учнями.

2. Виховна функція (Теорія виховання) - це аспект методики вивчається через теорію виховання, що вивчає психолого-педагогічні аспекти формування особистісних якостей та цінностей учнів під час навчання хімії.

3. Розвивальна функція (Психологія). Психологія вивчається як система, що досліджує процеси психічного розвитку учнів під час вивчення хімії.

Аналіз сучасних суспільних потреб та підвищених вимог до якості вищої освіти вказує на необхідність оптимізації підготовки майбутніх учителів хімії та біології в університетській системі освіти. Головною метою є формування особистості вчителя, здатної до творчого розвитку та самореалізації. Така підготовка вимагає розвитку активності, самостійності, ініціативи, та розвитку творчого потенціалу [1].

Важливість розвитку творчого потенціалу майбутніх учителів хімії та біології обумовлена різними аспектами: соціальним, науковим та практичним. Цей розвиток стає важливою передумовою для їхньої успішної професійної діяльності, сприяючи гуманізації освіти та розвитку креативності в суспільстві.

Сучасний навчально-виховний процес, зокрема з хімії, не можливо уявити без застосування інформаційно-комунікаційних технологій, а особливо часто учасники цього процесу, як вчителі, так і учні, використовують ресурси мережі Інтернет. Різноманіття таких ресурсів постійно зростає, але відсутній єдиний підхід до їх створення та використання в навчанні хімії. Виникає протиріччя між наявністю великої кількості ресурсів у мережі та недостатньою розробленістю методики їх застосування в навчальному процесі, а також відсутністю класифікації та впорядкованості цих ресурсів.

Термін "контент" використовується у сфері інформаційних та медіа технологій і означає будь-яку інформацію, розміщену на певному ресурсі. Термін "хімічний контент" відноситься до вмісту веб-сторінок, які містять інформацію про хімію, призначену для навчання та вивчення хімії, поглиблення знань та обміну інформацією [2].

Використання інформаційно-комунікаційних технологій (ІКТ) в освіті, зокрема викладанні хімії, відзначається як важливий аспект сучасного суспільства, спрямований на побудову інформаційного суспільства. Запровадження ІКТ в освітній процес є стратегічним завданням, і ця тенденція визначена як частина глобального розвитку. Україна також регулює використання ІКТ у сфері загальнодержавного значення, включаючи освіту, згідно із законами про національну інформатизацію та основні засади розвитку інформаційного суспільства [3].

Використання ІКТ у сучасній освіті спрямоване на формування та розвиток інтелектуального потенціалу нації, удосконалення навчального процесу та впровадження комп'ютерних методів навчання та тестування. Інформатизація освіти ставить перед собою завдання активно впроваджувати ІКТ в навчальний процес, що дозволяє ефективно вирішувати завдання освіти на вищому рівні з урахуванням світових вимог.

Зокрема, у викладанні хімії використання ІКТ надає можливість розв'язувати дидактичні завдання, такі як вивчення явищ та процесів у мікро- та макросвіті, використання засобів комп'ютерної графіки та моделювання для розуміння складних технічних і біологічних систем. У час діджиталізації, перед вчителем постає завдання як же краще донести матеріал уроку до учнів.

Розроблені методики по кращому вивченні хімії у вигляді наприклад гри – суттєво покращують здобуття нових знань і навичок. Також такий підхід дозволяє вчителю у невимушеній обстановці закріпити знання в учнів. Тобто, за відповідями учнів вчитель може одразу оцінити рівень знань з певної теми, яка проходиться на уроці без додаткового усного опитування. Це дозволяє зняти бар'єр, який зараз присутній у молоді – адже часто вони не можуть сформулювати та виразити свою думку, саме через те, що їм зручніше користуватися гаджетами, в яких часто замість слів вони використовують юнікоди (смайли). Так до прикладу «Kahoot» - це навчальна платформа, за допомогою якої можна проводити інтерактивні заняття та перевірку знань учнів за допомогою онлайн-тестування, гра, яка розвиває у дитини бажання вчитися. Зокрема цю платформу можна використовувати і для дистанційного навчання, що є доречним та актуальним в наш час. Таких платформ у сучасному світі є достатня кількість, тому їх точно треба використовувати у навчальному процесі, адже навчання з цікавістю обов'язково призведе до кращого результату.

Література

1. Методика навчання хімії : Навч.-метод. комплект. Чернігів : Нац. ун-т «Черніг. колегіум» ім. Т. Г. Шевченка, 2020. 320 с.
2. Самойленко П. В. Методика навчання хімії : навч. посіб. Чернігів : Вид-во «Десна Поліграф», 2020. 320 с.
3. Когнітивна психологія. Київ : Київ. політехн. ін-т ім. Ігоря Сікорського, 2017. 44 с.

АНАЛІТИЧНІ РЕАГЕНТИ ДЛЯ МОДИФІКАЦІЇ ПОВЕРХНІ МАГНІТНИХ НАНОЧАСТИНОК

Руснак В. М., Фершал М. В.

кафедра аналітичної хімії

e-mail: rusnak.valentyna1@student.uzhnu.edu.ua

Наночастинки (НЧ) та їхні незвичайні властивості привертають увагу наукової спільноти вже протягом десятиліть і досі залишаються сферою досліджень, що активно розвивається [1]. Широкий спектр НЧ використовується в промисловості та в споживчих продуктах, включаючи косметику та сонцезахисні креми, волокна та тканини, барвники, наповнювачі, фарби тощо. Хорошим прикладом є застосування магнітних наночастинок (МНЧ) в біомедичних цілях, включаючи сучасні фармацевтичні препарати для лікування раку із адресною доставкою з допомогою МНЧ [2], генну терапію, виділення та очищення біологічних молекул і клітин, флуоресцентні біологічні мітки, контрастні агенти для візуалізації, тканинну інженерію, ДНК-зонди та біочіпи нанометрового масштабу, а також мікрохірургічні технології.

Магнітні наночастинки також знайшли численні застосування в аналітичній хімії у напрямку підвищення селективності та покращення межі детектування, зменшення співвідношення сигнал/шум та інш. Модифіковані МНЧ використовуються для так званої магнітної твердофазної екстракції, яка базується на їх застосуванні для селективного відділення цільового аналіту від матриці зразка за допомогою магнітного поля з подальшим його вивільненням у розчин та наступним аналізом відповідним методом.

Методи модифікації МНЧ базуються на реакціях між поверхневими групами МНЧ та функціональними групами модифікаторів: спиртів, 1,2-діолів, фенолів, 1,2-дифенолів, сполук, що містять СООН-групу тощо. Однак більшість із цих сполук мають ряд недоліків, таких як обмежена розчинність у водному середовищі, чутливість до гідролізу, чутливість до рН тощо. Зазвичай, потрібні запобіжні операції та додаткові етапи, щоб забезпечити стабільність зв'язків, що утворюються між МНЧ та молекулами модифікатора, що є витратним за часом та ресурсами процесом. Таким чином, пошук та дослідження, синтез та використання нових сполук, придатних для модифікації МНЧ, залишаються сферою активних досліджень науковців у багатьох галузях.

Нами проводиться дослідження нового біфункціонального модифікатора, що характеризується змінною кислотністю, за рахунок утворення естерів по фенілбороновому заміснику, та містять реакційні центри, здатні утворювати як ковалентні, так і координаційні зв'язки із поверхнею магнетиту.

Згаданий реагент містить у своїй структурі фрагменти 8-гідроксихіноліну та фенілборної кислоти, що здатні утворювати як ковалентні, так і координаційні зв'язки. Нами знайдено лише декілька прикладів наукових робіт, пов'язаних з модифікованими 8-гідроксихіноліном наночастинками. Їх досліджували як потенційні наносенсиори для виявлення вибухових речовин [3], визначення гібридизації ДНК [4], надчутливого та селективного визначення Al(III) [5,6]. Модифіковані 8-гідроксихіноліном магнітні наночастинки на основі використовувались для видалення U(IV) з вод [7].

Другою активною функціональною групою потенційного модифікатора є фенілборна кислота. Відомо, що вона реагує з цукрами та спорідненими сполуками у водних середовищах, що призводить до швидкого та оборотного утворення циклічних боратних естерів [8]. Синтез похідного 8-гідроксихіноліну та фенілборної кислоти є відносно простим і здійснюється шляхом діазотування амінофенілборних кислот з подальшим азосполученням з 8-гідроксихіноліном в лужному середовищі. Синтезовану сполуку охарактеризовано за допомогою мас-спектрометрії, ІЧ-спектроскопії та спектрофотометрії.

Синтез наночастинок магнетиту було проведено згідно методики [9]. Він базується на осадженні магнетиту або з аміачного водного розчину іонів Fe²⁺ та Fe³⁺ при температурі 80 °C

С та інтенсивному перемішуванні. Досліджено процеси сорбції реагенту на отриманий магнетит при різному рН середовища створеним буферами різної природи. Показано, що у кислому середовищі переважає хемісорбція реагенту, а у лужному – фізична сорбція. Побудовано відповідні ізотерми сорбції та знайдено ємність магнетиту як сорбенту. Отримано ІЧ спектри модифікованого магнетиту, на якому присутні зсуви та зникнення полос поглинання які вказують на участь у процесі сорбції на магнетит 8-оксихінолінового фрагменту барвника. Досліджено кінетику сорбції (8-ГХФБ) на магнетит у кислому середовищі.

Література

1. Parupudi., Arun., Sri Hari Raju Mulagapati., and J. Anand Subramony. Nanoparticle technologies: Recent state of the art and emerging opportunities. *Nanoparticle Therapeutics*. 2022, 3-46.
2. Li, Xiaokun., et al. The development and progress of nanomedicine for esophageal cancer diagnosis and treatment. *Seminars in cancer biology*. 2022, 86, 873-885.
3. Feng, Lijuan., et al. 8-Hydroxyquinoline functionalized ZnS nanoparticles capped with amine groups: a fluorescent nanosensor for the facile and sensitive detection of TNT through fluorescence resonance energy transfer. *Dyes and Pigments*. 2013, 97(1), 84-91.
4. Shamsipur, Mojtaba., et al. Highly sensitive gold nanoparticles-based optical sensing of DNA hybridization using bis (8-hydroxyquinoline-5-solphonate) cerium (III) chloride as a novel fluorescence probe. *Journal of pharmaceutical and biomedical analysis*. 2016, 118, 356-362.
5. Shang, Yan., et al. Silver nanoparticles capped with 8-hydroxyquinoline-5-sulfonate for the determination of trace aluminum in water samples and for intracellular fluorescence imaging. *Microchimica Acta*. 2013, 180(13), 1317-1324.
6. El-Wakil., Mohamed M., et al. Synthesis of Fe₃O₄ nanobead-functionalized 8-hydroxyquinoline sulfonic acid supported by an ion-imprinted biopolymer as a recognition site for Al³⁺ ions: estimation in human serum and water samples. *New Journal of Chemistry*. 2018, 42(12), 9828-9836.
7. Tan., Lichao., et al. Facile preparation of oxine functionalized magnetic Fe₃O₄ particles for enhanced uranium (VI) adsorption. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*. 2015, 466, 85-91.
8. Li., Meng., et al. Electrochemical sensing using boronic acids. *Chemical Communications*. 2015, 51(78), 14562-14573.
9. Cîrcu, M., Radu, T., Porav, A. S., & Turcu, R. Surface functionalization of Fe₃O₄@ SiO₂ core-shell nanoparticles with vinylimidazole-rare earth complexes: Synthesis, physico-chemical properties and protein interaction effects. *Applied Surface Science*, 2018, 453, 457-463.

РОЗРОБКА БЕЗЕКСТРАКЦІЙНОЇ МЕТОДИКИ ВИЗНАЧЕННЯ НІКЕЛЮ НОВИМ РЕАГЕНТОМ 8-ГІДРОКСИХІНОЛІН-АЗО- ФЕНІЛБОРОНАТОМ

Магада Є.Ю., Чонтош Т.О., Фершал М.В.
Кафедра аналітичної хімії
e-mail: mahada.yevheniia@student.uzhmu.edu.ua

Молекулярні хімічні сенсори є одним з перспективних напрямків у сучасній аналітичній хімії. Такі молекули знаходять застосування в медицині для діагностики захворювань, у сфері охорони навколишнього середовища, промисловості, а також в хімічному та фармацевтичному аналізі та інших галузях. Для досягнення бажаних хіміко-аналітичних характеристик у молекулярних сенсорах використовують поєднання декількох різних за природою та цільовими аналітами функціональних груп, що дозволяє одержати реагенти, які відповідають сучасним вимогам аналізу та є простими у застосуванні *in vivo* [1].

Нами досліджено нову перспективну біфункціональну молекулу 8-гідроксихінолін-азо-фенілборонат (8-ГХФБ), яка одержана реакцією азосполучення 8-гідроксихіноліну - відомого гравіметричного реагенту та 3-амінофенілборонової кислоти, що здатна взаємодіяти з поліолами [2,3], активними формами кисню та іншими окисниками [4,5]. Структуру отриманої сполуки підтверджено за допомогою фізичних та фізико-хімічних методів хромато-маспектрометрії, ІЧ-, ЯМР- та XPS - спектроскопії.

Методом спектрофотометрії досліджено протолітичні властивості реагенту та запропоновано існування у водних розчинах принаймні чотирьох форм (Див. Рис. 1)

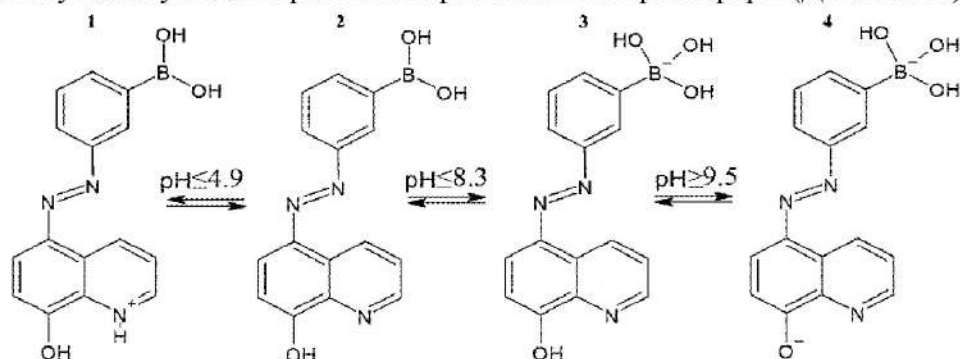


Рис. 1. Імовірна схема протолітичних перетворень у водних розчинах 8-ГХФБ

Показано вплив природи використаної буферної суміші на спектрофотометричні властивості 8-ГХФБ. Так, використання цитратного буферу не дозволяє досліджувати протолітичні рівноваги за рахунок утворення комплексу з переносом заряду по оксихіноліновому фрагменту [6], та можливого утворення естерів по фенілборонової кислоті [7]. Така властивість може бути використана для регулювання характеристик молекулярного сенсора хімічним шляхом. Показано, що молекулярний сенсор вступає в реакцію із рядом катіонів, зокрема Ag^+ , Fe^{3+} , Co^{2+} , Zn^{2+} та Ni^{2+} , з утворенням забарвлених сполук, а їх стійкість залежить від рН середовища. Проведено дослідження аналітичного використання реагенту для без екстракційного визначення нікелю у формі комплексної сполуки червоного кольору, яку вдається стабілізувати у вигляді колоїдного розчину з допомогою ПВС, дія якого швидше за все спричинена здатністю до утворення естерів із фенілбороновим замісником молекули. Показано, що після отримання забарвлення у оптимальних умовах зміщення рН у область рН 2 дозволяє зменшити вплив багатьох інтерферентів, окрім Co^{2+} , Fe^{3+} та Cu^{2+} , що показано на Рис. 2. Вивчено також вплив маскуючих агентів для усунення заважаючого впливу згаданих катіонів. Деякі метрологічні характеристики методики при різних умовах отримання комплексу приведено у таблиці 1.

Дослідний варіант методики безекстракційного визначення нікелю у водах включає наступні стадії: до 1 мл досліджуваної води додавали 2 мл ацетатно-аміачного буферу, 1 мл ПВС та 1мл барвника при перемішуванні. Отриману суміш інтенсивно струшували на Vortex протягом 30 с. Далі рН досліджуваного розчину зміщували до рН 2 додаванням 0,02 мл НСІ і вимірювали оптичну густина при 530 нм із l=1

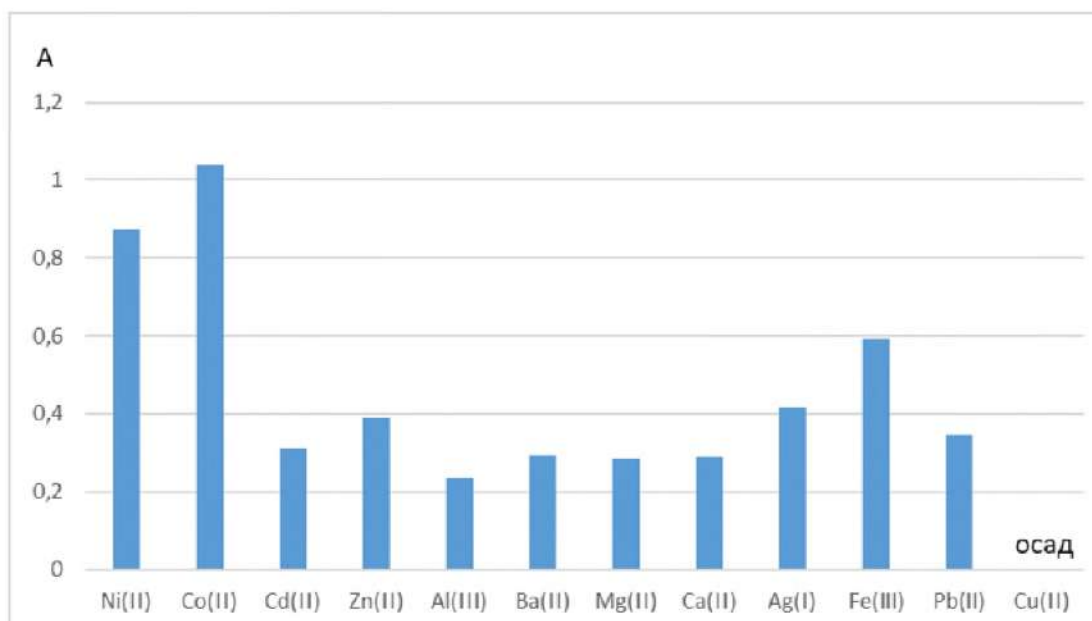


Рис.2. Відносний заважаючий вплив десятикратного надлишку катіонів металів як інтерферентів при підкисленні до рН 2.

Таблиця 1. Метрологічні характеристики методики безекстракційного визначення нікелю із 8-ГХФБ (n=7, P=0,95)

Умови отримання аналітичної форми	LOQ, мкг/мл	LOD, мкг/мл	Межі лінійності, мкг/мл
рН 4,5, $\lambda=485$ нм, l=1см	0,035±0,015	0,118 ±0,015	0,02 - 1,2
рН 2 (підкислено від рН 4,5), $\lambda=485$ нм, l=1см	0,0090 ± 0,0002	0,0290 ±0,0002	0,02 - 1,2
рН 2 (підкислено з рН 4,5), $\lambda=530$ нм, l=1см	0,010 ± 0,003	0,033 ± 0,003	0,02 - 1,2
рН 3,5, $\lambda=485$ нм, l=1см	0,015 ± 0,002	0,050 ± 0,002	0,02 - 1,2
рН 2 (підкислено з рН 3,5), $\lambda=485$ нм, l=1см	0,010 ± 0,003	0,067 ± 0,003	0,02 - 1,2
рН 2 (підкислено від рН 3,5), $\lambda=530$ нм, l=1см	0,0050 ± 0,0006	0,0340 ± 0,0006	0,02 - 1,2

Дослідний варіант методики безекстракційного визначення нікелю у водах включає наступні стадії: до 1 мл досліджуваної води додавали 2 мл ацетатно-аміачного буферу, 1 мл ПВС та 1мл барвника при перемішуванні. Отриману суміш інтенсивно струшували на Vortex протягом 30 с. Далі рН досліджуваного розчину зміщували до рН 2 додаванням 0,02 мл НСІ і вимірювали оптичну густина при 530 нм із l=1

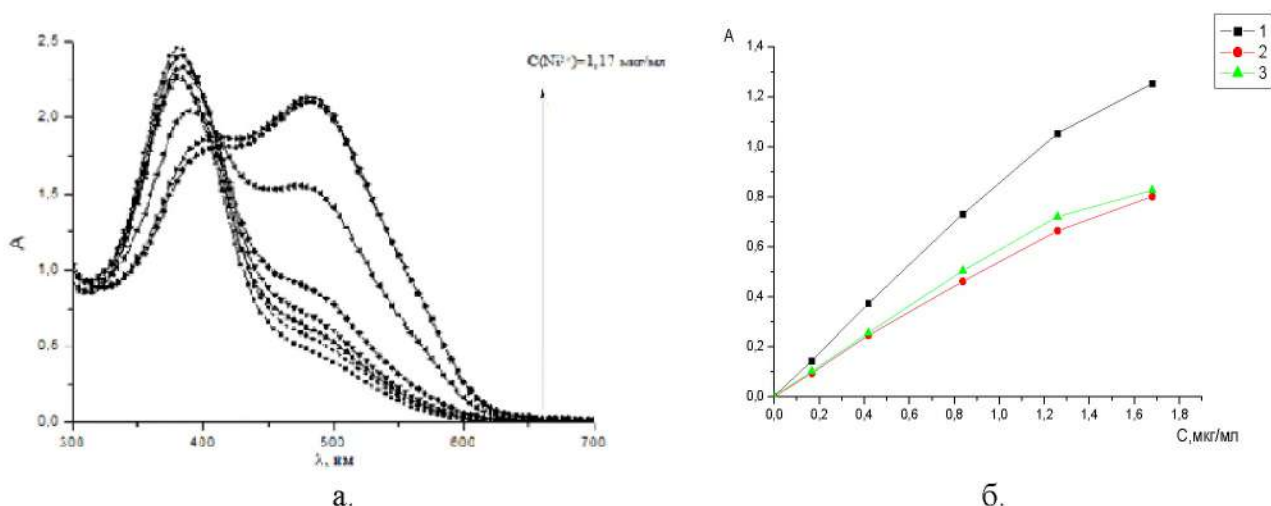


Рис. 3. Спектри світлопоглинання 8-ГХФБ при різній концентрації Ni²⁺ (а). (C_{8-ГХФБ}=2×10⁻⁴ моль/л), та градувальні залежності отримані за різних умов (б).
1-рН 4,5, λ=485 нм; 2 – рН 2, λ=485 нм; 3 – рН 2, λ=530 нм

Література

1. Xu, Xin, et al. A new asymmetric salamo-based chemical sensor for dual channel detection of Cu²⁺ and B4O7²⁻. *Inorganica Chimica Acta*, 2020, 513: 119945.
2. Kur, K., Przybył, M., & Miller, E. Study of 3-amino phenylboronic acid interactions with selected sugars by optical methods. *Journal of Luminescence*, 2017, 183: 486-493.
3. Trejo-Huizar, K. E., Jiménez-Sánchez, A., Martínez-Aguirre, M. A., & Yatsimirsky, A. K. Fluorescence ratiometric sensing of polyols by phenylboronic acid complexes with ligands exhibiting excited-state intramolecular proton transfer in aqueous micellar media. *Journal of Luminescence*, 2016, 179: 393-401.
4. Bi, Xueyuan, et al. A mitochondrial-targetable dual functional near-infrared fluorescent probe to monitor pH and H₂O₂ in living cells and mice. *RSC advances*, 2020, 10.45: 26874-26879.
5. Lim, Dae Sung, et al. Fluorometric analysis of peracetic acid by the oxidative hydroxylation of a phenylboronic acid containing dye. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2019, 298: 126824.
6. Jado, D., Siraj, K., & Meka, N. Electron donor-acceptor interaction of 8-hydroxyquinoline with citric acid in different solvents: spectroscopic studies. *Journal of Applied Chemistry*, 2014, 1-7.
7. Bromba, C., Carrie, P., Chui, J. K., & Fyles, T. M. Phenyl boronic acid complexes of diols and hydroxyacids. *Supramolecular Chemistry*, 2009, 21(1-2), 81-88.

СФЕРИ ВИКОРИСТАННЯ ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНИХ РЕЧОВИН

Фогорощі І.В., Фогорощі Г.В., Русин В.М.

Кафедра аналітичної хімії

e-mail: vasilina.lavra@uzhnu.edu.ua

Поверхнево-активні речовини (ПАР) - це речовини, які мають здатність знижувати поверхневий натяг рідини, що є ключовою властивістю для їхнього використання у багатьох промислових та побутових продуктах. Завдяки своїм унікальним властивостям поверхнево-активні речовини широко використовують у виробництві паперу, харчових продуктів, лакофарбових матеріалів, а також у металургійній, агрохімічній, фармацевтичній, гірничодобувній, текстильній, будівельній промисловості.

Ці сполуки використовують, наприклад, як інгредієнти в миючих засобах, косметичці, включаючи засоби особистої гігієни, такі як рідке мило, гелі для душу, шампуні або зубна паста.

Використання поверхнево-активних речовин у харчовій промисловості відомо протягом багатьох століть. Природні поверхнево-активні речовини, такі як лецитин із яєчного жовтка та різноманітні білки з молока, використовуються для приготування багатьох харчових продуктів, таких як майонез, креми для салатів, заправки, десерти тощо. Пізніше полярні ліпіди, такі як моногліцериди, були представлені як емульгатори для харчових продуктів. Зовсім недавно синтетичні поверхнево-активні речовини, такі як ефіри сорбітану та їх етоксилати та ефіри сахарози, використовувалися в харчових емульсіях. Наприклад, складні ефіри моностеарату або моноолеату з органічними карбоновими кислотами, напр. лимонна кислота використовується як засіб проти розбризкування в маргарині для смаження.

Поверхнево-активні речовини роблять можливим виробництво певних типів харчових продуктів і гарантують, що готові продукти та інгредієнти зберігають свою емульсію під час транспортування та зберігання. Емульгатори часто додають до харчових продуктів з метою створення та стабілізації емульсії та інших харчових дисперсних систем. Емульгатори визначають консистенцію харчового продукту, його пластичні властивості, в'язкість та ін.

У промисловості фармацевтичних препаратів поверхнево-активні речовини відіграють вирішальну роль як допоміжні речовини. Встановлено, що поверхнево-активні речовини широко поширені в біологічних продуктах. Кілька біологічних препаратів, таких як вакцини, моноклональні антитіла, терапевтичні засоби мРНК і продукти, пов'язані з генною терапією, демонструють підвищену стабільність у присутності поверхнево-активних речовин. У фармації використовують фосфоліпід лецитин, жовчні солі, деякі жирні кислоти та їх похідні, вони стали незамінними, оскільки вони забезпечують унікальну ефективність і ефективний механізм переносу ліків шляхом розчинення препаратів жирового походження.

Поверхнево-активні білки є невеликими гідрофобними білками легеневого сурфактанту, який необхідний для функції легенів. Біосурфактанти пропонують можливість заміни хімічних ПАР. Вони корисні в боротьбі з багатьма хворобами і діють як терапевтичні засоби завдяки їх антибактеріальній, протигрибковій та противірусній активності. Катіонні ПАР є здатні виявляти антибактеріальні властивості, руйнуючи мембрани бактеріальних клітин.

Найбільш поширеною і корисною основною характеристикою поверхнево-активних речовин є їх миюча та дезінфікуюча дія, яка може «огортати» різні види бруду та змивати їх шляхом адсорбції, змочування, проникнення, емульгування та диспергування. Здатність видаляти бруд полягає в його здатності змочувати поверхню плями та емульгувати її, тобто «огортати» масло, дати йому емульгуватись у воді та змити.

Численні засоби для догляду за шкірою та за волоссям містять різні види поверхнево-активних речовин. Поверхнево-активні речовини використовуються в різних очищувальних косметичних засобах, таких як мило, шампуні, гелі для душу, кондиціонерів для волосся, зубні пасти, миючих засобів для обличчя тощо.

Наша шкіра та волосся покриті дуже тонким захисним шаром шкіри, а поверхнево-активні речовини допомагають воді та маслу змішувати, що дозволяє очищати косметичні продукти, щоб видалити весь бруд з шкіри або волосся. В результаті, всі шампуні, гелі для душу, зубні пастки, рідкі мила та інші засоби особистого догляду за допомогою чистих властивостей, містять якийсь поверхнево-активний агент. Крім того, поверхнево-активні речовини можуть бути використані як емульгатори та загусники в кремах, тонерів, лосьйонах, кондиціонерів та масках, а також інших засобів для догляду за волоссям.

Залежно від їх походження, поверхнево-активні речовини, що використовуються в косметичних продуктах, можуть бути природними (похідними від сировинних рослин), мінеральні (отримані з нафти або газу) або синтетичні (синтезовані штучно). Аніонні поверхнево-активні речовини є найбільш поширеними поверхнево-активними речовинами, що використовуються в косметичних продуктах, оскільки вони є дешевими і мають хороші піноутворюючі та миючі засоби. Їх основний недолік полягає в тому, що аніонні поверхнево-активні речовини можуть бути занадто агресивними до шкіри.

Маємо зауважити що ПАР мають не лише позитивні характеристики але й негативні. Широке використання засобів на основі ПАР призводить до постійного впливу цих речовин на організм людини, що може привести до порушення обмінних процесів в організмі. Збільшення відсотка концентрації ПАР у засобах здатне викликати деякі алергічні реакції: від легкого роздратування шкіри до дерматиту. Також цей клас сполук, або продукти їх трансформації, що є шкідливими для нашого організму можуть потрапляти через шкіру у внутрішні органи організму, наприклад печінку, нирки, слизові.

Таким чином, поверхнево-активні речовини стали безцінною частиною сучасного виробництва широкого спектру продуктів. Властивості поверхневої активності роблять їх одним із найважливіших і універсальних класів хімічних продуктів, які використовуються в різноманітних цілях.

Література

1. https://link.springer.com/referenceworkentry/10.1007/978-3-642-20665-8_94
2. <https://www.pacmoore.com/blog/natural-surfactants-food/>
3. Rakesh K. Sharma* Surfactants: Basics and Versatility in Food Industries
Applied Chemistry Department, Faculty of Technology & Engineering, The M. S. University of Baroda, Kalabhavan, Vadodara, Gujarat, India. *raksharman@yahoo.com, rksharmamsu@gmail.com
4. <https://www.degruyter.com/document/doi/10.1515/9783110487282-015/html>
5. Bhupinder Singh Sekhon Surfactants: Pharmaceutical and Medicinal Aspects
PCTE Institute of Pharmacy, PCTE Group of Institutes, Ludhiana, Punjab, INDIA Email: sekhon224@yahoo.com
6. Dr. Pradeep Kumar Bolla Applications of Surfactants in Pharmaceutical Formulation/Drug Product Development School of Pharmacy, The University of Texas at El Paso, 1101 N Campbell St., El Paso, TX 79902, USA.
7. <https://enrichbodycare.com/overview-of-surfactants-in-cosmetics/>
8. <https://organic-store.name/beauty/1068-common-surfactants-in-cosmetic-products-types-and-uses.html>

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ДОДЕЦИЛБЕНЗЕНСУЛЬФОНАТУ НАТРІЮ З ВИКОРИСТАННЯМ БАЗАКРИЛ БРИЛЬЯНТОВОГО ЧЕРВОНОГО

Чубар Р.І., Русин В.М.
Кафедра аналітичної хімії
e-mail: chubar.radmila@student.uzhnu.edu.ua

Зараз важко назвати сферу людської діяльності, де б не використовувалися поверхнево-активні речовини. Їхня присутність потрібна і в харчовій промисловості — для покращення якості та подовження термінів зберігання продуктів, і в сільському господарстві — для отримання захисних пін, гранульованих добрив, для прискорення проростання насіння; у гірничо-збагачувальній промисловості - для флотаційного збагачення корисних копалин; у металообробній — для виробництва мастильно-охолоджуючих рідин.

Поверхнево-активні речовини (ПАР) – це речовини, які при додаванні до рідини зменшують її поверхневий натяг, тим самим підвищуючи її властивості розподілу та змочування. ПАР складаються з водовідштовхувальної та водовідтягуючої частин, вони дозволяють воді та маслу змішуватися, а також можуть утворювати піну та полегшувати відшарування бруду. ПАР використовують у виробництві миючих засобів та косметики; вони є компонентами ліків та використовуються як харчові добавки. Наприклад, ПАР у миючих засобах допомагають ефективно відмивати сильно забруднені поверхні за допомогою циклів миття при низьких температурах, а ось у косметиці їх можуть використовувати для збереження вологи та покращення текстури продукту.

За хімічною ознакою ПАР ділять на аніоноактивні, катіоноактивні і нейоногенні. За колоїдно-структурною ознакою їх ділять на речовини, що знаходяться в дійсному розчині, а тому не володіють миючою дією, і на миючі речовини, які створюють міцелярні або навіть гелеподібні структури. Миючими речовинами, або детергентами, можуть бути речовини будь-якого з трьох класів, тобто аніоноактивні, катіоноактивні і нейоногенні.

ПАР використовуються у, понад, 30 галузях, розпочинаючи від чорної металургії і закінчуючи харчовою галуззю. Однак не завжди результати використання цих речовин приносять користь. При збільшенні ПАР на поверхні води вони утворюють плівку, яка перешкоджає газообміну між водою й атмосферою, що знижує ступінь насиченості води киснем.

Додецилбензенсульфонат натрію (ДДБСо) належить до групи алкілбензенсульфонатів, які використовуються в миючих засобах. Продукти, що містять додецилбензенсульфонат натрію, дуже добре піняться. Утворюють високі і стійкі піни. Властивості піноутворення можна контролювати за допомогою натрієвого мила та піногасників. ДДБСо дуже добре розчинний у воді (частково розчинний у спирті) і ефективний при низьких концентраціях.

Додецилбензенсульфонат натрію має властивості зволоження, емульгування, диспергування та очищення, а також діє як поверхнево-активна речовина, яка сприяє формуванню міцел, таким чином беручи участь у механізмі видалення бруду. Ця речовина виявляє синергічний ефект з неіонними продуктами під час процесу прання. Він добре поєднується з іншими інгредієнтами миючого засобу, такими як EDTA, ферменти, карбонат натрію та наповнювачі. Легко змивається з поверхні матеріалу (у випадку з миючими засобами) і не залишає неприємних слідів. Доступний у вигляді напіврідкої пасти, яка відшаровується (відшарування не вплине на ефективність продукту). Його колір

коливається від білого до кремового. Стійкий до гідролізу в лужному середовищі (сильно лужні миючі засоби можна готувати для професійного використання). Додецилбензенсульфонат натрію вважається безпечною речовиною. Дозволено до продажу та використання в миючих засобах з гранично допустимою концентрацією.

Як і інші поверхнево-активні речовини, його подразнюючі властивості посилюються зі збільшенням концентрації та рН. У випадку препаратів, що містять додecilбензенсульфонат натрію, призначених для контакту зі шкірою, продукт повинен бути в такій формі, щоб мінімізувати подразнення. Також було визнано, що додecilбензенсульфонат натрію в середовищі з рН приблизно дев'ять може потенційно подразнювати очі.

В нашій роботі був використаний новий барвник торгової марки «Базакрил», який в аналітичній практиці раніше мало використовувався, а саме брильянтовий червоний. Основні спектрофотометричні та протолітичні характеристики водних розчинів даного барвника вже були досліджені попередньо. Нами досліджено вплив кислотності середовища на стан барвника, умови утворення іонного асоціату даного барвника з додecilбензенсульфонатом натрію, вплив розчинників на ступінь вилучення цього іонного асоціату та деякі кінетичні фактори. В перспективі розробка нової ефективної методики по визначенню даного представника аніонних ПАР у засобі дезінфікуючої дії.

Література

1. Kurt Kosswig "Surfactants" in Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, Wiley-VCH, 2005, Weinheim. doi:10.1002/14356007.a25_747
2. <https://www.products.pcc.eu/uk/inci-27/sodium-dodecylbenzene-sulfonate/>
3. Лавра В.М., к.х.н.; викл.; Панкулич В.В., студ. Спектрофотометричне визначення додecilбензосульфону натрію з використанням астрафлосину FF. *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Хімія*, 2016, 36.
4. Yamamoto, K.; Oka, M.; Murakami, H. Spectrophotometric Determination of Trace Ionic and Non-Ionic Surfactants Based on a Collection on a Membrane Filter as the Ion Associate of the Surfactant with Erythrosine B. *Anal. Chim. Acta* 2002, 455, 83–92. DOI: 10.1016/S0003-2670(01)01560-4.
5. Reich, Hans J. (2012). "Bordwell pKa Table (Acidity in DMSO)". University of Wisconsin. Archived from the original on 27 December 2012. Retrieved 2 April 2013.
6. Bordes, Romain; Holmberg, Krister (28 March 2015). "Amino acid-based surfactants – do they deserve more attention?". *Advances in Colloid and Interface Science*. 222: 79–91. doi:10.1016/j.cis.2014.10.013.
7. Лавра В.М., Гнида М.П., Базель Я.Р. Екстракційно-фотометричне визначення додecilсульфату натрію із використанням поліметинового барвника. *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Хімія*. 2011, 25(1), 42–46.
8. Лавра В.М., Речло М., Базель Я.Р. Хіміко-аналітичні властивості основних барвників торговельної марки «Базакрил». *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Хімія*. 2013, 1 (29), 46-49.

ГАЛОГЕНОГЕТЕРОЦИКЛІЗАЦІЯ АЛКЕНІЛ(АЛКІНІЛ)ТІОБЕНЗОТІАЗОЛІВ

Галега О.В., Онисько М.Ю.
кафедра органічної хімії
e-mail: haleha.olha@student.uzhnu.edu.ua

Азаанельовані бензотіазоли проявляють високу біологічну активність. Анелювання додаткового нітрогеновмісного гетероциклу до бензотіазолу можна здійснювати методом електрофільної гетероциклізації алкілненасичених тіоетерів бензотіазолу. Напрямок електрофільної циклізації алкенільних та алкінільних тіоетерів бензотіазолу залежить від довжини алкенільного чи алкінільного фрагменту та природи замісників в ньому. Тому дослідження напрямку гетероциклізації алкенільних(алкінільних) тіоетерів бензотіазолу є актуальним.

Метою даної роботи є дослідження напрямку галогеноциклізації цинамільного, пренільного, бутенільного, пентенільного, пропаргільного, бутінільного, пентінільного тіоетерів бензотіазолу, які синтезовані за методикою [1]. Електрофільну гетероциклізацію тіоетерів проводили дією галогенів (бром, йод) у хлороформі, броміду та хлориду йоду в оцтовій кислоті. В результаті синтезовано цілий ряд азаанельованих солей бензотіазолію, склад і будова яких доведена елементним аналізом, ЯМР спектроскопією (^1H , ^{13}C , гомо- та гетероядерні кореляції), хроматомас-спектрометрією, рентгено-структурним дослідженням.

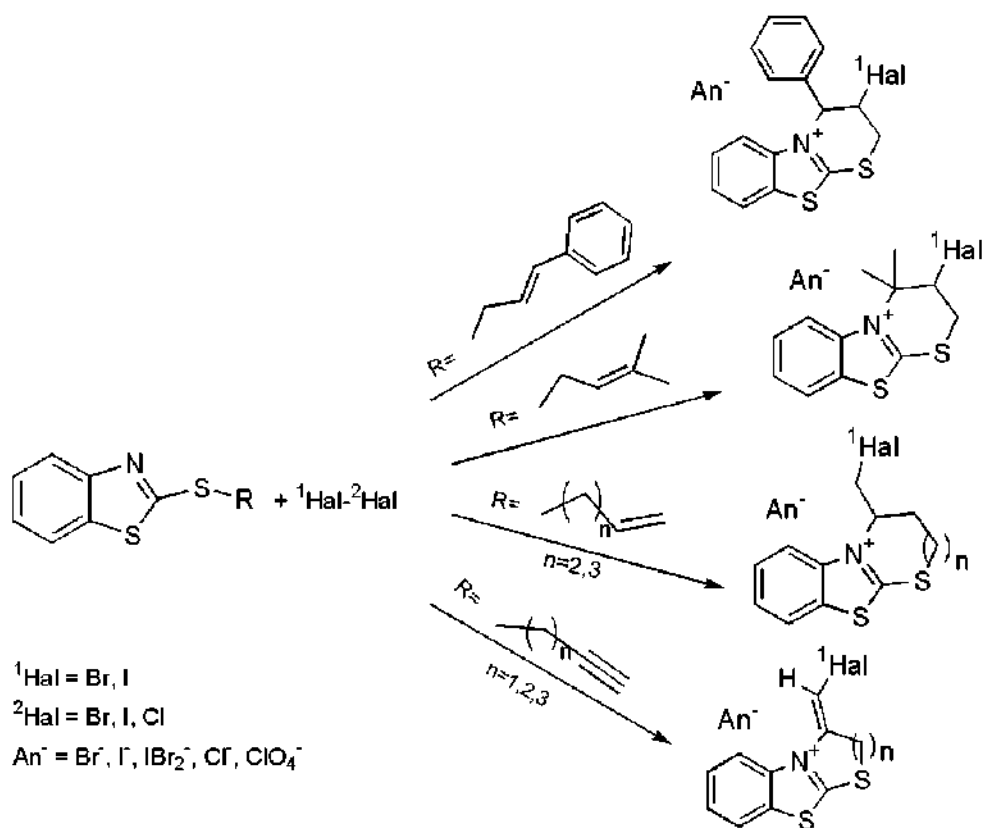


Рис.1. Схема синтезу солей тіазоло(тіазино, тіазепіно)бензотіазолію

Аналіз фізико-хімічних даних свідчить, що при галоциклізації цинамільного, пренільного, бутенільного та бутінільного тіоетерів відбувається анелювання тіазинового циклу до бензотіазолу, при циклізації пропаргільного тіоетеру – тіазольного циклу, а пентенільного та пентінільного тіоетерів – тіазепінового циклу. Слід відмітити, що вид

аніону в солях бензотіазолію залежить від природи електрофільного реагенту. Так, при циклізації молекулярними галогенами утворюються тригалогеніди, а при циклізації гібридними галогенами виділено йододиброміди та хлориди тіазоло(тіазино, тіазепіно)бензотіазолію, що доведено елементним аналізом та рентгено-структурним дослідженням.

Також нами доведена стереоселективність галоциклізації акінільних тіоетерів бензотіазолу, Так, при галогенуванні пропаргільного, бутінільного та пентінільного тіоетерів бензотіазолу у хлороформі утворюються галогенометилідензаміщені солі тіазоло-, тіазино- та тіазепінобензотіазолію виключно у вигляді *E*-ізомеру, що доведено гомоядерними кореляційними дослідженнями (ядерний ефект Оверхаузера). Натомість, при зміні полярності розчинника (оцтова кислота) стереоселективність галоциклізації пентінільного тіоетеру зменшується, що приводить до утворення суміші конфігураційних ізомерів.

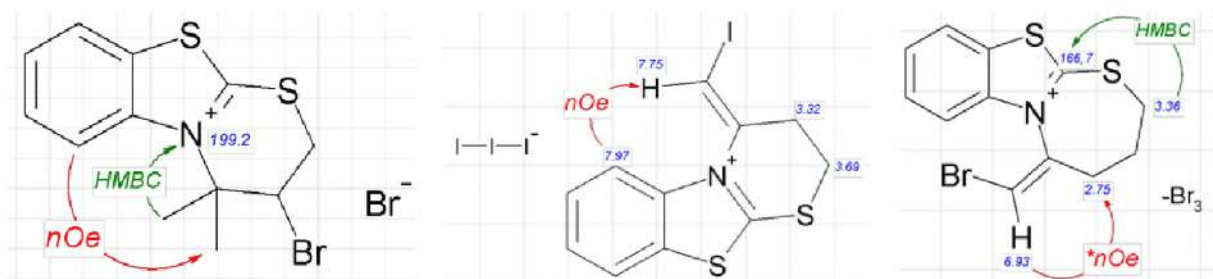


Рис. 2. Гомо- та гетероядерні кореляції солей тіазино(тіазепіно)бензотіазолію

Нами вивчені хімічні властивості синтезованих солей бензотіазолію. Так, тригалогеніди бензотіазолію дією ацетону (триброміди), натрій сульфїту чи калій йодиду (трийодиди) переведені у відповідні моногалогеніди. З монобромідів тіазоло(тіазино, тіазепіно)бензотіазолію реакцією йонного обміну синтезовано перхлорати та йодиди дією натрій перхлорату в метанолі чи калій йодиду в ацетоні. Слід зазначити, що структура органічного катіону зберігається, що доведено спектрально та рентгено-структурним дослідженням.

Таким чином, доведена регіоселективність галогенування алкенільних та алкінільних тіотетерів бензотіазолу, яка залежить від довжини алкілненасиченого замісника та положення кратного зв'язку. Проведені первинні скринінгові дослідження бактерицидної активності азаанельованих солей бензотіазолію, які вказують на перспективу їх використання як зовнішніх дезінфекторів.

Література

1. O.V. Haleha, M.V. Povidaichyk, O.V. Svalyavin, E.M. Ostapchuk, M.Yu. Onysko. *Vopr. him. him. tehnol.*, 2023, 2, 61-66.

ГЕТЕРОЦИКЛІЗАЦІЯ 3-АЛІЛ-2-АЛІЛ(МЕТАЛІЛ)ТІОХІНАЗОЛІН-4(3H)-ОНУ

Куля Д.Ю., Кут Д.Ж., Кут М.М., Онисько М.Ю., Лендел В.Г.

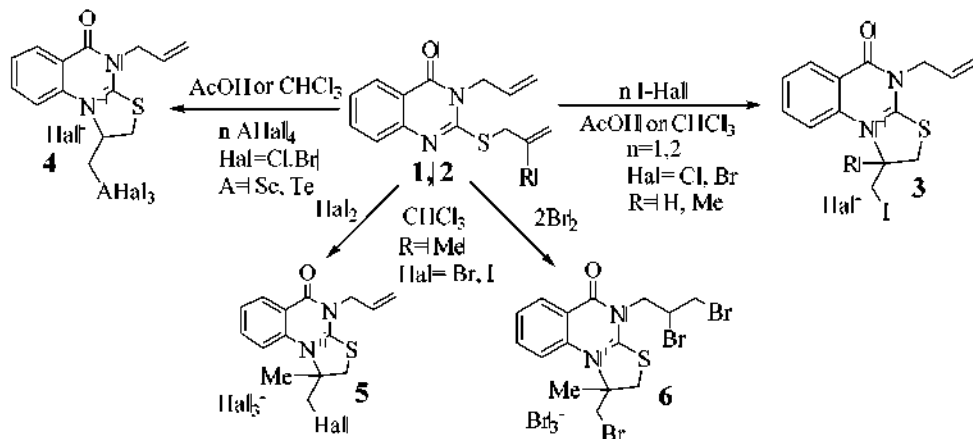
Кафедра органічної хімії

e-mail: diana.kut@uzhnu.edu.ua

Реакції електрофільної внутрішньомолекулярної гетероциклізації займають важливе місце в синтезі гетероциклічних сполук. До основних факторів, які впливають на перебіг реакцій електрофільної гетероциклізації є поляризація кратного зв'язку, природа нуклеофільного центру, стеричні ефекти, природа електрофільного реагенту та полярність розчинника в якому проводять реакцію. Даний метод широко використовується для синтезу біоперспективних конденсованих похідних хіназоліну, які володіють різноманітними біомедичними властивостями. Тому метою нашого дослідження є вивчення регіоселективності та регіонапрямленості реакції електрофільної гетероциклізації 3-аліл-2-аліл(металіл)тіохіназолін-4(3H)-ону під дією галогено- та халькогеновмісних електрофільних реагентів.

Об'єктом вивчення регіохімії процесу електрофільної гетероциклізації слугували диалкенілзаміщені тіоетери **1**, **2**. Досліджувані тіоетери **1**, **2** цікавий тим, що вони містять в своїй структурі два алкенільні фрагменти з кратними зв'язками та два реакційні нуклеофільні центри — атом нітрогену N в положенні 1 хіназоліну та атом оксигену карбонільної групи, які можуть брати участь в аелюванні додаткового циклу.

Встановлено, що взаємодія 3-алкеніл-2-алкенілтіохіназолін-4(3H)-онів **1**, **2** з гібридними галогенами чи тетрагалогенідами халькогенідів не залежно від співвідношення реагентів в хлороформі або льодяній оцтовій кислоті відбувається регіоселективно за участю N¹ атома хіназоліну з утворенням ангулярних моногалогенідних солей **3**, **4**. У випадку дії бром (1:1), йоду (1:1, 1:2) на металільний тіоетер **2** утворюються ангулярні тригалогеніди **5**, натомість, використання двократного надлишку бром приводить до циклізації тіоалільного фрагмента та приєднання електрофілу до кратного С=C зв'язку алільного фрагменту біля N³ атома хіназоліну. Будову отриманих сполук **1-6** доведено спектрами ЯМР ¹H та ¹³C, а склад елементним аналізом.



Таким чином, у даному дослідженні встановлені закономірності перебігу електрофільної гетероциклізації 3-аліл-2-аліл(металіл)тіохіназолін-4(3H)-ону під дією різних за природою електрофільних агентів і розроблено керований метод аелювання тіазольного циклу до остову хіназоліну.

ГАЛОГЕНОЦИКЛІЗАЦІЯ ТЕРМІНАЛЬНИХ 2-АЛКЕНІЛ(АЛКІНІЛ)ТІО-ХІНОЛІН-3-КАРБАЛЬДЕГІДІВ

Дудла А.В., Сабо Т.Ш., Онисько М.Ю.
Кафедра органічної хімії
pokovba.andriana@student.uzhnu.edu.ua

Функціональні хіноліни привертають увагу як реагенти для синтезу поліциклічних гетероциклів та володіють високою біологічною активністю. Такі гетероцикли представляють значний інтерес для дослідників медичної та фармацевтичної хімії та можуть бути використані в сільському господарстві як фунгіциди. Так, функціоналізовані хіноліни проявляють протиракову активність, можуть бути використані як антипроліферативні та антиковідні засоби. Галогено- та халькогеновмісні хіноліни виявляють антимікробну активність, що робить їх потенційними дезінфекторами. Тому, синтез нових поліциклічних галогеновмісних похідних хінолінів є актуальною проблемою.

Для вирішення поставленого завдання проведено синтез вихідних 2-алкілзаміщених хінолін-3-карбальдегідів **1-4**, отриманих нуклеофільним заміщенням 2-хлорохінолін-3-карбальдегіду ненасиченими алкілгалогенідами чи алкілметансульфатами. Реакції проводили в присутності калій карбонату в диметилформаміді. В результаті з високими виходами отримано 2-бутеніл(бутеніл-, пентеніл-, пентніл-)хінолін-3-карбальдегіди **1-4**.

Галогеноциклізацію тіоетерів хінолінкарбальдегіду **1-4** проводили дією бромю, йоду та гібридними галогенами – бромідом та хлоридом йоду. Встановлено, що при галоциклізації тіоетерів **1-4** відбувається регіоселективно. Так, при галогенуванні 2-бутеніл(бутеніл-)хінолін-3-карбальдегідів **1,3** відбувається ателювання тіазинового циклу, а 2-пентеніл(пентніл-)хінолін-3-карбальдегідів **2, 4** – тіазепінового циклу. Слід зазначити, що полярність розчинника (дихлорометан, хлороформ, оцтова кислота) не впливає на регіохімію процесу. В результаті отримано солі тіазино(тіазепіно)хінолінію у вигляді три- та моногалогенідів.

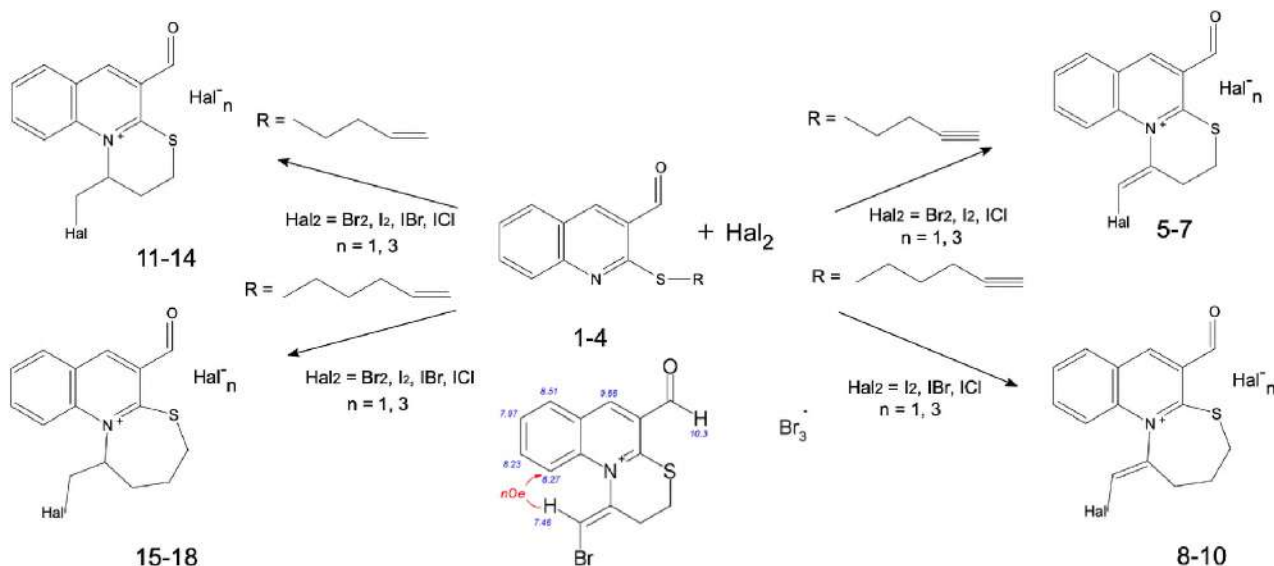


Рис. 1. Схема синтезу тіазино(тіазепіно)хіноліній галогенідів

Для визначення стереоселективності процесу галоциклізації алкінільних тіоетерів хінолінкарбальдегіду проведено гомоядерні кореляційні дослідження ядерного ефекту Оверхаузера для бромометиліден заміщеного тіазинохіноліній триброміду **5**, які вказують на утворення одного конфігураційного ізомеру – *E*-конфігурації.

Отже, знайдено, що галогеноциклізація термінальних алкенільних та алкінільних тіоетерів хінолін-3-карбальдегіду відбувається регіо- та стереоселективно.