

Хімічний факультет



СТУДЕНТСЬКА НАУКОВА КОНФЕРЕНЦІЯ
хімічного факультету

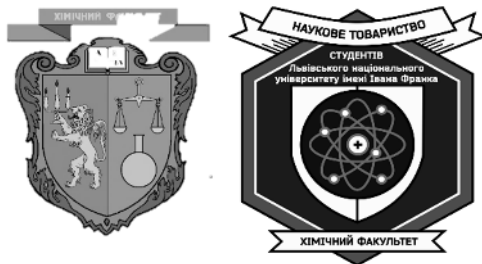
Тези доповідей



травень 2022 року
Львів

Міністерство освіти і науки України
Львівський національний університет імені Івана Франка

Хімічний факультет



СТУДЕНТСЬКА НАУКОВА КОНФЕРЕНЦІЯ
хімічного факультету

Тези доповідей



травень 2022 року

Львів

Рекомендовано до друку

Вченою радою хімічного факультету
(протокол №11 від 27 червня 2022 р.)

УДК 543+544+546+547

Студентська наукова конференція. Пленарне засідання: програма та тези доповідей. Львів, травень 2022 року / М. Кіц, Б. Коротошин, Р. Піта, С. Івах. (ред.). – Львів: Малий видавничий центр хімічного та фізичного факультетів ЛНУ імені Івана Франка, 2022. – 32 с.

У збірнику опубліковані тези доповідей учасників пленарного засідання звітної студентської наукової конференції хімічного факультету Львівського національного університету імені Івана Франка 2022 року.

Відповідальні за випуск:

Студенти хімічного факультету: Максим Кіц, Богдан Коротошин, Роман Піта, Софія Івах.

В авторській редакції.

© Львівський національний університет
імені Івана Франка, 2022

КАФЕДРА АНАЛІТИЧНОЇ ХІМІЇ

**ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ АТРОПІНУ В СЕЧІ З
ВИКОРИСТАННЯМ АЛМАЗНОГО ЕЛЕКТРОДА ДОПОВАНОГО БОРОМ**

Волинець В.Ю., Душина О.М.

Кафедра аналітичної хімії,

Львівський національний університет імені Івана Франка,

вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

e-mail: viktoria.volynets@lnu.edu.ua

Атропін – природний алкалоїд, який найчастіше зустрічається у рослинах родини пасльонових: беладонні й дурмані. Він знижує чутливість органів і тканин до імпульсів від парасимпатичних нервових волокон і до введеного ззовні ацетилхоліну [1]. Атропін застосовують для лікування брадикардії, зменшення вироблення слини під час операції, при виразковій хворобі шлунка та дванадцятипалої кишки, гастриті з підвищеною секрецією, гострому панкреатиті, жовчно-кам'яній та сечокам'яній хворобі. В офтальмології атропін застосовують під час підбирання окулярів, для огляду очного дна, при іриті, кератиті та для уповільнення прогресування короткозорості у дітей [2]. Під дією ферментів в організмі людини атропін метаболізує, однак 13-50 % виводиться із сечею в незмінній формі [3].

Ми розробили вольтамперометричну методику визначення атропіну в зразках сечі людини. Використали мініатюрну триелектродну друковану комірку з робочим алмазним допованим бором електродом, діаметром 2 мм (АДБЕ). Вольтамперограми та градувальні графіки було отримано методами диференційної імпульсної (ДІВ) та квадратно-хвильової (КХВ) вольтамперометрії. Під час аналізу сечі було досліджено вплив матриці на струм окиснення атропіну. Задовільного результату було досягнуто 100-кратним розведенням сечі фоновим електролітом. Мінімальна концентрація атропіну, яку можна визначити в сечі методом ДІВ та КХВ становить, відповідно, 0,16 мкг/мл і 0,17 мкг/мл. Правильність розробленої методики було перевірено способом «введено-знайдено».

[1] *J. Brust*, Neurological aspects of substance abuse, Elsevier, Philadelphia, 2004 p. 310.

[2] *A. Moffat*, Clarke's isolation and identification of drugs (2 edn.), Pharmaceutical Press, London, 1986 p. 1248.

[3] *W. A. Kradjan, R. C. Smallridge, R. Davis, P. Verma*, Atropine serum concentrations after multiple inhaled doses of atropine sulfate, Clin. Pharmacol. Ther., Vol. 38 (1) (1985) 12–15.

ПОЛЯРОГРАФІЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ХІНІНУ ТА ЙОГО N-ОКСИДУ

Душина О.М., Якубова Т.П.

Кафедра аналітичної хімії,

Львівський національний університет імені Івана Франка,

вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

e-mail: olha.dushna@lnu.edu.ua

Хінін – природний алкалоїд, який міститься в корі хінного дерева. Його застосовують як протималарійний і жарознижуючий засоби, а також для зменшення збудливості серцевого м'яза та для стимуляції пологової діяльності. Хінін також може міститися в харчових продуктах у вигляді ароматизатора та смакового компонента. Однак, хінін може негативно впливати на організм людини. Велика кількість хініну може викликати головний біль, запаморочення, підвищення температури тіла, безсоння, а також шум у вухах і погіршення слуху, порушення зору. В організмі людини хінін метаболізує до N-оксиду хініну та виводиться зі сечею. Отже, визначення хініну у різноманітних об'єктах є актуальним. Особливо цікавим є визначення його метаболіту у біологічних матеріалах.

Раніше ми повідомляли про вольтамперометричне визначення алкалоїдів у формі їх N-оксидів [1-2]. Такий самий підхід ми використали у цьому випадку. N-оксид хініну отримували синтетично окисненням субстанції хініну гідрохлориду калій пероксимонсульфатом (КПМС) у середовищі універсальної буферної суміші. Окиснювали хінін за рН 9,5, концентрації КПМС $1,0 \cdot 10^{-4}$ моль/л впродовж 15 хв за кімнатної температури.

N-оксид хініну легко відновлюється на ртутному краплинному електроді з утворенням двох характерних піків. Перший пік ($E = -0,98$ В) відповідає відновленню самого хініну, а другий пік ($E = -1,09$ В) – N-оксиду хініну. N-оксид хініну відновлюється в широких межах рН 4–10. Струми піку відновлення N-оксиду хініну досягають максимального значення в слабнокислому та нейтральному середовищі (в межах рН 5–7). Такий підхід можна використати для розроблення методики одночасного визначення хініну та його метаболіту.

[1] *Dubenska L.* A new approach for voltammetric determination of nefopam and its metabolite / L. Dubenska, O. Dushna, S. Pysarevska, M. Blazheyevskiy // *Electroanalysis*, 2020 – Vol. 32. № 3 – P. 626-634 <https://doi.org/10.1002/elan.201900595>

[2] *Dushna O.* The alternative voltammetric method for the determination of nicotine and its metabolite nicotine N-Oxide / O. Dushna, L. Dubenska, S. Plotycya, M. Rydehuk, M. Blazheyevskiy // *J. Electrochem. Soc.*, 2022 – Vol. 169 – № 1 – P. 016513. <https://doi.org/10.1149/1945-7111/ac4b26>

СУЛЬФАДИМЕТОКСИН – ПЕРСПЕКТИВНИЙ АНАЛІТ ДЛЯ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРІЇ

Новожилова М.С.

Кафедра аналітичної хімії,

Львівський національний університет імені Івана Франка,

вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

e-mail: maridrog2000@gmail.com

Сульфадиметоксин (СДМ) – це сульфаніламідний протимікробний препарат тривалої дії, який застосовують для лікування багатьох інфекцій, включаючи інфекції дихальних шляхів, сечовивідних шляхів, кишкових та м'яких тканин.

СДМ широко використовується для профілактики та лікування захворювань птиці, спричинених бактеріальною інфекцією. Залишки СДМ були виявлені в продуктах харчування та в пробах води, які не тільки викликають безперервне забруднення природи, але й мають потенційний канцерогенний ризик для організму людини, що призводить до резистентності антибіотиків, а тому й складність подальшого їхнього використання. Тому є потреба в їхньому визначенні.

СП — перші хіміотерапевтичні протибактеріальні засоби широкого спектра дії, які є похідними амідів сульфанілової кислоти об'єднанні загальною формулою:

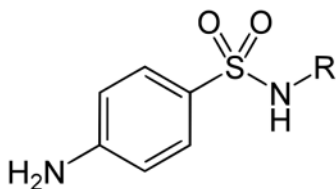


Рис. 1. Загальна формула сульфаніламідних препаратів

Ми опрацювали ВА методики визначення СДМ, які можуть ґрунтуються на здатності аміногрупи до окиснення або сульфонової групи до відновлення. Відновлення сульфонової групи в умовах ВА практично не використовували з метою аналізу. Однак відомо декілька методик ВА визначення СП за окисненням аміногрупи. Амідна група СП участі в електрохімічних перетворення не бере.

Ми запропонували визначати СДМ за відновленням деривату СДМ, який отримували за допомогою хімічної реакції окиснення Оксоном. Підібрали оптимальні умови окиснення СДМ Оксоном і подальшого відновлення одержаного деривату на р.к.е.: рН окиснення становить 8,5, отримання полярограм – 4,5, 10-кратний надлишок окиснювача; температура розчину під час окиснення 50 °С; швидкість сканування – 0,5 В/с.

ДОСЛІДЖЕННЯ ОПТИМАЛЬНИХ УМОВ ВІДНОВЛЕННЯ МЕТРОНІДАЗОЛУ НА АМАЛЬГАМНОМУ ЕЛЕКТРОДІ

Піта Р.І., Плотнікова К.М.

Кафедра аналітичної хімії,

Львівський національний університет імені Івана Франка,

вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

e-mail: romanpita406@gmail.com

Ще здавна ліки є однією з найголовніших потреб людини, адже від них залежить наше здоров'я. Проте, на сьогоднішній день існує багато неякісних та фальсифікованих ліків, вживання яких може призвести до негативних наслідків. Також внаслідок введення різних медичних препаратів в організм тварин, можливими є залишкові кількості лікарських речовин у продуктах тваринного походження. Тому актуальнішим стає завдання розроблення методик визначення лікарських засобів.

Метронідазол (МНЗ) [1-(2-гідроксиетил)-2-метил-5-нітроїмідазол] – це антибіотик групи нітроїмідазоли, який широко застосовується для лікування інфекцій, викликаних анаеробними бактеріями та найпростішими. Їхня електрохімічна активність пояснюється наявністю нітрогрупи, яка здатна до відновлення.

Дослідження проводили методом лінійної розгортки потенціалу використовуючи цифрову вольтамперометричну установку з трьохелектродною електрохімічною коміркою (робочий електрод – стаціонарний твердий електрод на основі амальгами срібла модифікований ртутним меніском (m-AgSAE), насичений каломелевий електрод порівняння та платиновий допоміжний електрод).

Дослідили залежність сили струму від рН в діапазоні від 2,0 до 11,0. Максимальний пік відновлення спостерігається в області рН 10-11 на фоні універсальної буферної суміші. Потенціал акумуляції досліджували в межах від -10 до -200 мВ і найбільше значення струму одержали в інтервалі від -30 до -50 мВ. Швидкість розгортки напруги поляризації досліджували в інтервалі від 1,0 до 5,0 В/с. Критерій Семерано становить 0,18, це говорить про те, що досліджуваний струм має кінетичні утруднення. Було обчислено значення кількості протонів та електронів, які беруть участь в електрохімічній реакції. Обчислені значення становлять 0,5 та 2,1 відповідно.

На підставі проведених досліджень ми підібрали оптимальні умови відновлення досліджуваного нітроїмідазолу на амальгамному електроді, що в подальшому буде слугувати для розроблення методики вольтамперометричного визначення метронідазолу.

ЕЛЕКТРОХІМІЧНА ПОВЕДІНКА ПОНСО 4R НА ТВЕРДОМУ АМАЛЬГАМНОМУ ЕЛЕКТРОДІ, МОДИФІКОВАНОМУ РТУТНОЮ ПЛІВКОЮ

Трухим М.В., Дмухайло А. В.

Кафедра аналітичної хімії,

Львівський національний університет імені Івана Франка,

вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

e-mail: maksym.trukhym@lnu.edu.ua

Виробники харчових продуктів дедалі частіше використовують різноманітні натуральні та синтетичні харчові барвники (СХБ). Останні зараз почали використовувати більше, завдяки низці переваг над натуральними, таких як: стійкість до світла, термостабільність, добра розчинність у воді, що полегшує їх дозування, стабільні яскраві кольори, низька ціна і менша чутливість до умов технологічних процесів і зберігання. Однак, крім переваг, СХБ здатні наносити шкоду організму як дитини, так і дорослої людини.

Одним з СХБ є понсо 4R (харчова добавка Е 124) – це яскраво-червоний азобарвник, добре розчинний у воді, стійкий до світла та кислотності середовища. Понсо 4R використовують як індивідуально, так і в сумішах з жовтогарячими (Е 110), жовтими (Е 102, Е 104) та в потрібних сумішах з жовтими та синіми барвниками (Е 102 та Е 131) отримуючи коричневий, помаранчевий та пурпуровий кольори. У США, Фінляндії, Норвегії понсо 4R входить до списку заборонених речовин, як канцерогенна речовина, що може спровокувати розвиток онкологічних захворювань, але є дозволеним для використання в ЄС і Україні.

Електрохімічну поведінку понсо 4R досліджували на твердому амальгамному електроді модифікованому ртутною плівкою методом вольтамперометрії з лінійною швидкою розгорткою потенціалу.

На вигляд вольтамперограм, струм і потенціал відновлення понсо 4R впливає рН розчину. Найбільше значення струму відновлення досягається у слабкокислому середовищі при рН 5.0. Потенціал піку відновлення зміщується в негативний бік із збільшенням рН. Така поведінка показує, що електрохімічне відновлення понсо 4R включає стадію перенесення протонів.

Для з'ясування природи струму відновлення досліджували залежність струму відновлення від значення швидкості накладання напруги поляризації. Із збільшенням швидкості накладання напруги поляризації, висота піку збільшується, а потенціал зсувається в катодну область. На вольтамперограмі простежується один катодний пік. Тангенс кута нахилу лінійної залежності $\log I$ від $\log v$, близький до 1, що свідчить про адсорбційну природу струмів і сприяє використанню адсорбційного нагромадження.

КАФЕДРА НЕОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ

ДОСЛІДЖЕННЯ СИСТЕМИ Er-Cu-Sb

Клизуб П., Коник М.Б., Ромака Л.П.

Кафедра неорганічної хімії

Львівський національний університет імені Івана Франка,

вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

e-mail: PAVLO.KLYZUB@lnu.edu.ua

Сполуки $R_3Cu_3Sb_4$ зі структурою типу $Y_3Au_3Sb_4$ проявляють напівпровідникові властивості і можуть слугувати основою для термоелектричних матеріалів. Дослідження фазових діаграм металевих систем є важливим етапом, у ході якого вивчають стабільність проміжних фаз (температурні та концентраційні межі існування), вплив розмірного фактора, методів синтезу.

Взаємодію компонентів у потрійній системі Er–Cu–Sb досліджено за температури 873 К з використанням методів рентгенофазового, мікроструктурного та рентгеноспектрального аналізів. Зразки синтезували з металів високої чистоти методом електродугового плавлення. Для надання сплавам рівноважного стану проводили гомогенізувальне відпалювання при 873 К впродовж 720 год. з подальшим гартуванням у холодній воді. Рентгенофазовий аналіз виконували за масивами дифракційних даних, отриманих на дифрактометрі ДРОН-2.0М (Fe K_α -випромінювання). Хімічний склад фаз контролювали методом енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії (скануючий електронний мікроскоп Tescan Vega 3 LMU).

В системі Er–Cu–Sb за температури дослідження 873 К підтверджено існування тернарних сполук $ErCuSb_2$ (стр. тип $HfCuSi_2$, ПГ $P4/nmm$), $Er_3Cu_{22}Sb_9$ (стр. тип $Dy_3Cu_{20+x}Sb_{11-x}$, ПГ $F-43m$), $Er_3Cu_3Sb_4$ (стр. тип $Y_3Au_3Sb_4$, $I-43d$). За результатами рентгенофазового аналізу зразків системи Er–Cu–Sb, окрім підтверджених тернарних сполук, ідентифіковано нову тернарну сполуку $ErCu_{4-x}Sb_2$, яка належить до структурного типу $TmCu_{2.93}Sb_2$ (ПГ $Pnnm$) [1].

За результатами диференціального термічного аналізу (термоаналізатор LINSEIS STA PT 1600, атмосфера аргону) для сполуки $Er_3Cu_{22}Sb_9$ визначено обмежений температурний інтервал стабільності до $\sim 640^\circ$ С, вище цієї температури сполука розпадається.

[1] Fedyna L.O., Bodak O.I., Fedorchuk A.O., Tokaychuk Y.O. The crystal structure of a new ternary antimonide: $TmCu_{4-x}Sb_2$ ($x=1.065$) // J. Alloys Compd. – 2005. – Vol. 394. – P.156-159.

СИСТЕМА Ru-Mo-Ge

Коротошин Б., Муць Н. М., Гладішевський Р. Є.

Кафедра неорганічної хімії,

Львівський національний університет імені Івана Франка,

вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

e-mail: bohdan.korotoshyn@lnu.edu.ua

Інтерметалічні сполуки елементів платинової групи відомі своєю міцністю, стійкістю та особливо каталітичною активністю в багатьох хімічних процесах. Вивчення сплавів рутенію (Ru), найбільш хімічно- та термостійкого з родини благородних металів, залишається перспективним та актуальним і на сьогодні. Наприклад, рутеній та його сполуки розглядають як нові перспективні каталізатори для роботи за низьких температур у відомому процесі синтезу аміаку за Габером-Бошем. Це дозволить значно підвищити економічність та ефективність вищезгаданого методу в промислових масштабах. Результатом нашого попереднього дослідження встановлено існування сполуки $\text{Ru}_{1,5}\text{Mo}_{1,5}\text{Ge}_5$, структуру якої уточнено в моделі бінарного типу Ir_3Ga_5 (символ Пірсона $tP32$, просторова група $P-4n2$) [1].

З метою побудови фазових рівноваг та пошуку нових сполук у системі Ru-Mo-Ge ми синтезували методом електродугової плавки вісім трикомпонентних зразків. Гомогенізаційний відпал тривав 70 днів за температури 600 °C. Рентгенофазовий аналіз здійснювали на основі дифрактограм (дифрактометри ДРОН-2.0М з Fe $K\alpha$ промінням та STOE Stadi P з промінням Cu $K\alpha_1$). Рентгенівську енергодисперсійну спектроскопію провели на скануючому електронному мікроскопі Tescan Vega 3 LMU.

За результатами рентгенофазового аналізу та енергодисперсійної спектроскопії зразок $\text{Ru}_{17}\text{Mo}_{21}\text{Ge}_{62}$ містить три фази: сполуку $\text{Ru}_{1,5}\text{Mo}_{1,5}\text{Ge}_5$ (80,0(6) мас.%) зі структурою типу Ir_3Ga_5 , просту речовину Ge (9,0(1) мас.%) та нову тернарну сполуку $(\text{Ru}_{0,95}\text{Mo}_{0,05})\text{Ge}_2$ (11,0(2) мас.%). Уточнення кристалічної структури сполуки $(\text{Ru}_{0,95}\text{Mo}_{0,05})\text{Ge}_2$ проводили в моделі бінарного типу TiSi_2 (символ Пірсона $oF24$, просторова група $Fddd$): $a = 4,7322 \text{ \AA}$, $b = 8,2884 \text{ \AA}$, $c = 8,2943 \text{ \AA}$; положення атомів Ti займає статистична суміш атомів рутенію та молібдену, а положення атомів Si – атоми Ge. Завдяки локальному рентгеноспектральному аналізу ми можемо стверджувати, що у фазі присутні всі три елементи. В інших зразках цієї системи ідентифіковано такі бінарні сполуки: Ru_2Ge_3 (СТ Ru_2Ge_3 , СП $oP40$, ПГ $Pbcn$), Mo_5Ge_3 (СТ W_5Si_3 , СП $tI32$, ПГ $I4/mcm$), Mo_3Ge (СТ Cr_3Si , СП $cP8$, ПГ $Pm-3n$).

[1] Коротошин Б. Кристалічна структура сполуки $\text{Ru}_{1,5}\text{Mo}_{1,5}\text{Ge}_5$ / Б. Коротошин, Н. Муць, Я. Токайчук, Л. Аксельруд, Р. Гладішевський // Зб. наук. праць XVIII Наук. конф. “Львівські хімічні читання – 2021” (31 травня–2 червня 2021 р.). – Львів, 2021. – С. Н27.

МОНОКРИСТАЛЬНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ КРИСТАЛІЧНОЇ СТРУКТУРИ СПОЛУКИ PrPdAl

Коць О.А., Ничипорук Г.П., Заремба В.І.

Кафедра неорганічної хімії,

Львівський національний університет імені Івана Франка,

вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

e-mail: orest.kots@lnu.edu.ua

Пошук нових фаз із цікавими структурними та фізичними властивостями спрямований на створення сучасних функціональних матеріалів. Вивчення взаємодії компонентів у системі $\text{PrPdAl}_{1-x}\text{In}_x$, тобто заміщення атомів алюмінію атомами індію у сполуці PrPdAl [1] із структурою типу ZrNiAl [2] є продовженням досліджень у цьому напрямку. Так як повне дослідження кристалічної структури сполуки PrPdAl методом монокристала не проводилося, було проведено синтез і та її структурне дослідження.

Монокристали сполуки PrPdAl синтезовано шляхом спеціальної термічної обробки сплаву, попередньо отриманого електродуговою плавкою чистих компонентів, протестовано методом Лауе і досліджено на дифрактометрі APEX X8 (Мо К α -випромінювання). Кристалічна структура розв'язана прямими методами на основі 208 незалежних відбить hkl з використанням пакету програм SHELXL-97 [3]: СТ ZrNiAl , ПГ $P-62m$, $a = 0,7190(3)$; $c = 0,42248(15)$ нм, $wR2 = 0,0337$, 208 відбить hkl , 14 уточнюваних параметрів. Атоми кожного сорту займають кристалографічні положення повністю.

Кількісний та якісний склад сполуки PrPdAl підтверджено результатами EDX аналізу (SEM Tescan VEGA 3 LMU): 34(2) ат. % Pr, 35(2) ат. % Pd, 31(2) ат. % Al.

Сполука PrPdAl відноситься до класу тригонально-призматичних структур за координацією атома найменшого розміру (Pd). Топологічно її можна розглядати як укладку фрагментів центрованих пента-, тетра- та тригональних призм, які утворюють нескінченні ланцюги вздовж напрямків X та Y .

Автори вдячні к.х.н. Н. Зарембі за допомогу в отриманні масиву експериментальних даних на монокристальному автодифрактометрі.

[1] Hulliger F. On new ternary aluminides LnPdAl and LnPtAl // J. Alloys Compd. – 1993. – Vol. 196. – P. 225–228.

[2] Крип'якевич П.І., Марків В.Я., Мельник Е.В. Кристалічні структури сполук ZrNiAl , ZrCuGa і їх аналогів // Доп. АН УРСР. Сер. А – 1967. – № 8. – С. 750–753.

[3] Sheldrick G.M. A short history of SHELX // Acta Crystallogr. – 2008. – A 64. – P. 112.

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА ТЕТРАРНОЇ ФАЗИ $\text{Dy}_{0,67}\text{Ni}_2(\text{Al},\text{Ga})_5$

Лесько О.Р., Муць Н.М., Токайчук Я.О., Гладішевський Р.Є.

Кафедра неорганічної хімії,

Львівський національний університет імені Івана Франка,

вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

e-mail: oleh.lesko@lnu.edu.ua

Кристалічну структуру тетрарної сполуки $\text{Dy}_{0,67}\text{Ni}_2(\text{Al},\text{Ga})_5$ уточнено методом Рітвельда (пакет програм FullProf Suite [1]) за масивом рентгенівських дифракційних даних (дифрактометр STOE Stadi P, проміння $\text{Cu } K\alpha_1$) зразка складу $\text{Dy}_{7,7}\text{Ni}_{23,1}\text{Al}_{43,3}\text{Ga}_{25,9}$. За результатами рентгенівського фазового та структурного аналізів зразок є двофазним: основна фаза (77,2(6) мас.%) – фаза $\text{Dy}_{0,67}\text{Ni}_2(\text{Al},\text{Ga})_5$ зі структурою типу $\text{Sc}_{0,6}\text{Fe}_2\text{Si}_{4,9}$ та бінарна сполука Ni_2Ga_3 (22,8(2) мас.%). Фазовий склад зразка, а також хімічний склад присутніх фаз додатково встановлено локальним рентгеноспектральним аналізом (скануючий електронний мікроскоп Tescan Vega 3 LMU).

У структурі тетрарної фази $\text{Dy}_{0,67}\text{Ni}_2\text{Al}_{3,44}\text{Ga}_{1,56}$ атоми Ni займають одну правильну систему точок (4f), а атоми статистичної суміші Ga та Al – три (6h, 4f та 4e). Особливістю структури цієї сполуки є також статистичне розміщення атомів Dy та трикутників з атомів Ga/Al (положення Ga1/Al1) у співвідношенні 2:1.

Координати та параметри зміщення атомів у структурі сполуки

$\text{Dy}_{0,67}\text{Ni}_2\text{Al}_{3,44}\text{Ga}_{1,56}$ (СТ $\text{Sc}_{0,6}\text{Fe}_2\text{Si}_{4,9}$, СП $hP20$, ПГ $P6_3/mmc$,

$a = 4,19379(7)$, $c = 15,8701(3)$ Å)

Атом	ПСТ	Координати атомів			КЗП	$B_{\text{ізо}}, \text{\AA}^2$
		x	y	z		
Dy1	2c	1/3	2/3	1/4	0,67	0,46(4)
Ni	4f	1/3	2/3	0,60972(10)	1	1,06(6)
Ga1	6h	0,5363(8)	0,0726(15)	1/4	0,18(3)	1,65(17)
Al1					0,16(3)	
Ga2	4f	1/3	2/3	0,04652(19)	0,03(1)	1,46(11)
Al2					0,97(1)	
Ga3	4e	0	0	0,13611(13)	0,48(2)	1,61(8)
Al3					0,52(2)	

- [1] J. Rodríguez-Carvajal, *Commission on Powder Diffraction (IUCr), Newsletter* 26 (2001) 12-19.

ПОТРІЙНА СИСТЕМА Yb–Ga–Sn ПРИ 600°C

Огоновський І.К., Токайчук Я.О., Гладішевський Р.Є.

Кафедра неорганічної хімії,

Львівський національний університет імені Івана Франка,

вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

e-mail: illia.ohonovskyi@lnu.edu.ua

Ізотермічний переріз діаграми стану потрійної системи Yb–Ga–Sn при 600°C побудовано методами рентгенівської дифракції та енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії. 37 трикомпонентних зразків синтезовано електродуговим сплавленням компактних металів з вмістом основного компонента не менше 99,9 мас.% та гомогенізовано їх у вакуумованих кварцових ампулах при 600°C впродовж 720 год. Рентгенофазовий і рентгеноструктурний аналізи проведено за масивами рентгенівських дифракційних даних, отриманих на порошковому дифрактометрі ДРОН-2.0М (проміння Fe K α). Параметри профілю рентгенограм та параметри кристалічної структури сполук уточнено методом Рітвельда з використанням пакету програм FullProf Suite [1]. Локальний рентгеноспектральний аналіз здійснено на скануючому електронному мікроскопі Tescan Vega 3 LMU.

У системах Yb–Ga та Yb–Sn підтверджено існування при 600°C таких бінарних сполук: YbGa₄ (структурний тип CaGa₄), YbGa_{2,64} (власний), YbGa₂ (CaIn₂), YbGa (CuTi), Yb₂Ga (Co₂Si), YbSn₃ (Cu₃Au), Yb₃Sn₅ (Pu₃Pd₅), YbSn (CuAu), Yb₅Sn₄ (Sm₅Ge₄), Yb₅Sn₃ (Mn₅Si₃) і Yb₂Sn (Co_{1,75}Ge). Встановлено, що бінарні галіди YbGa_{2,64} і YbGa₂ розчиняють 4 і 3 ат.% Sn, відповідно, а станіди YbSn₃, YbSn і Yb₅Sn₄ розчиняють 12, 4 і 5 ат.% Ga, відповідно, з утворенням твердих розчинів заміщення.

Підтверджено існування та кристалічну структуру при 600°C тернарної сполуки YbGaSn [2]: структурний тип YPtAs, символ Пірсона *hP*12, просторова група *P*6₃/*mmc*, *a* = 4,4397(4), *c* = 17,3005(18) Å, *R*_B = 0,0550, *R*_p = 0,0565. Синтезовано нову тернарну сполуку Yb₁₁Ga₄Sn₃ і визначено її кристалічну структуру: структурний тип Sr₁₁Ga₄Sn₃, символ Пірсона *cF*144, просторова група *Fm*-3*m*, *a* = 16,066(2) Å, *R*_B = 0,0982, *R*_p = 0,0749. Структури обох тернарних сполук характеризуються впорядкованим розташуванням атомів і тригонально-призматичною (YbGaSn) та тригонально-призматичною і тетрагонально-антипризматичною (Sr₁₁Ga₄Sn₃) координацією атомів Ga і Sn.

[1] J. Rodríguez-Carvajal, *Commission on Powder Diffraction (IUCr), Newsletter* 26 (2001) 12-19.

[2] J. R. Salvador, F. Guo, T. P. Hogan, M. G. Kanatzidis, *Nature (London)* 425 (2003) 702-705.

ГІДРИДИ НА ОСНОВІ СПОЛУКИ YCo

*Саїдов Н.Р., Міліянчук Х.Ю., Гладішевський Р.Є.**Кафедра неорганічної хімії,**Львівський національний університет імені Івана Франка,**вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна**e-mail: nazar.saidov@lnu.edu.ua*

Гідрування сполук гомологічної серії $R_{m+n}T_{m+n}X_n$ (R , T і X – f -, d - і p -елемент, відповідно), основаної на структурних фрагментах типів α -ТІІ (m) та YAlGe (n), Tb₂Co₂Ga та Tb₃Co₃Ga вказало на визначальну роль фрагментів типу α -ТІІ в утворенні гідридів [1]. Збільшення їхньої кількості дозволяє збільшувати волюметричну та гравіметричну ємність водню у гідридах. Граничний склад серії ($m = \infty$) “TbCo” не реалізується у системі Tb–Co, тому метою дослідження є встановлення розчинності Tb у сполуці YCo (структурний тип α -ТІІ, символ Пірсона $oS8$, просторова група $Smct$) та особливостей гідрування фаз твердого розчину.

Інтерметалічні сполуки отримано методом електродугового сплавлення. Гідриди синтезовано за кімнатної температури та тисків водню 770 мбар. Кристалічну структуру встановлено методом рентгенівської порошкової дифракції.

Розчинність Tb у сполуці YCo не перевищує 10 %, натомість при більшому вмісті Tb у системі YCo–“TbCo” утворюється нова сполука невідомої структури змінного складу з моноклінною елементарною коміркою. Сполуки YCo та Y_{0,9}Tb_{0,1}Co за кімнатної температури та тиску водню 770 мбар утворюють гідриди з вмістом водню 3,2 та 3,4 ат. / ф.о., відповідно. Злами на кривій абсорбції свідчать про декілька нееквівалентних положень атомів водню у структурі гідрида. Гідрування веде до виражено анізотропного збільшення елементарної комірки, причім присутність Tb веде до більш анізотропної деформації елементарної комірки (таблиця).

Значне об’ємне розширення у фазах зі структурою типу α -ТІІ знижує волюметричну ємність гідриду, запобігти чому сприяють фрагменти типу YAlGe, зміцнюючи металічний каркас у гідридах сполук серії $R_{m+n}T_{m+n}X_n$.

Сполука	a , Å	b , Å	c , Å	V , Å ³	$\Delta a/a$, %	$\Delta b/b$, %	$\Delta c/c$, %	$\Delta V/V$, %
YCo	4,090(1)	10,358(3)	3,905(1)	165,4(1)	–	–	–	–
YCoH _{3,2}	3,639(1)	11,594(4)	4,728(2)	199,5(1)	-11,0	11,9	21,1	20,6
Y _{0,9} Tb _{0,1} Co	4,100(1)	10,372(3)	3,901(1)	165,9(1)	–	–	–	–
Y _{0,9} Tb _{0,1} CoH _{3,4}	3,625(1)	11,589(4)	4,741(2)	199,2(1)	-11,6	11,7	21,5	20,1

[1] Miliyanchuk K., Maskova-Cerna S., Havela L., Saidov N., Tokaychuk Ya., Dopita M., Gladyshevskii R. Crystal structures and magnetism of the hydrides of Tb₂T₂Ga and Tb₃Co₃Ga ($T = \text{Co, Ni}$) // J. Solid State Chem. – 2021. – Vol. 296. – Art. No. 121978.

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА СПОЛУКИ $\text{Nd}_{11}\text{Si}_{3,24}\text{In}_{6,76}$

Семерак Х., Ничипорук Г.П., Заремба В.І.

Кафедра неорганічної хімії,

Львівський національний університет імені Івана Франка,

вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

e-mail: khrystyna.semerak@lnu.edu.ua

Сполуки зі структурою типу $\text{Sm}_{11}\text{Ge}_4\text{In}_6$ (надструктура до типу $\text{Ho}_{11}\text{Ge}_{10}$) виявлено у системах $R\text{--Si--In}$ і $R\text{--Ge--In}$ ($R = \text{La}, \text{Ce}, \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Ho}, \text{Er}$ та Y). Відомо про існування дещо іншого виду надструктур до типу $\text{Ho}_{11}\text{Ge}_{10}$ зі стехіометрією $R_{11}\text{Ge}_8\text{In}_2$ (СТ $\text{Sc}_{11}\text{Al}_2\text{Ge}_8$) у системах з $R = \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Er}, \text{Tm}$.

У досліджуваній нами системі Nd--Si--In при 870 К було детально вивчено склади сплавів в області існування сполуки $\text{Nd}_{11}\text{Si}_4\text{In}_6$: проведено фазовий аналіз на основі дифрактограм (дифрактометр ДРОН-2.0М, $\text{Fe K}\alpha$ -випромінювання) і результатів дослідження мікрошліфів на скануючому електронному мікроскопі.

За результатами фазового аналізу дифрактограми (дифрактометр STOE STADI P, $\text{Cu K}\alpha$ -випромінювання) зразка складу $\text{Nd}_{0,525}\text{Si}_{0,19}\text{In}_{0,285}$ підтверджено існування та методом порошку (програма FullProf [1]) уточнено в рамках моделі структурного типу $\text{Sm}_{11}\text{Ge}_4\text{In}_6$ [2] кристалічну структуру сполуки $\text{Nd}_{11}\text{Si}_{3,24}\text{In}_{6,76}$: просторова група $I4/mmm$, $a = 1,1907(3)$; $c = 1,6435(4)$ нм, $R_{\text{Bragg}} = 0,966$, $R_F = 0,563$. Уточнений склад сполуки добре узгоджується з результатами EDX аналізу мікрошліфа (SEM Tescan VEGA 3 LMU): 53,3 ат. % Nd, 16,4 ат. % Si, 30,3 ат. % In.

Характерними многогранниками для атомів статистичної суміші Si/In у цій структурі є тригональні призми з центрованими бічними гранями (КЧ = 9). Атоми In знаходяться всередині тетрагональних антипризм з додатковими атомами навпроти основ (КЧ = 10 і 12).

Автори вдячні к. х. н. П. Демченку за допомогу в отриманні масиву експериментальних даних і к. х. н. В. Кордану за допомогу у дослідженні мікроструктур окремих зразків.

[1] *Rodriguez-Carvajal J.* Commission on Powder Diffraction, IUCr Newsletter. 2001. Vol. 26. P. 12–19.

[2] *Тиванчук Ю. Б., Міліянчук Х. Ю., Заремба В. І., Степень-Дамм Ю., Каличак Я. М.* Взаємодія компонентів в системах $\text{Sm--}\{\text{Si,Ge}\}\text{--In}$ при 870 К // Укр. хім. журн. 2001. Т. 67. № 11. С. 15–18.

ФОРМУВАННЯ КУЛЬТУРИ ЗДОРОВ'Я СТУДЕНТІВ-МАГІСТРІВ ПІД ЧАС ВИВЧЕННЯ ХІМІЧНИХ ДИСЦИПЛІН

Тунська М.-Б.В., Шпирка З.М.

Кафедра неорганічної хімії

Львівський національний університет імені Івана Франка

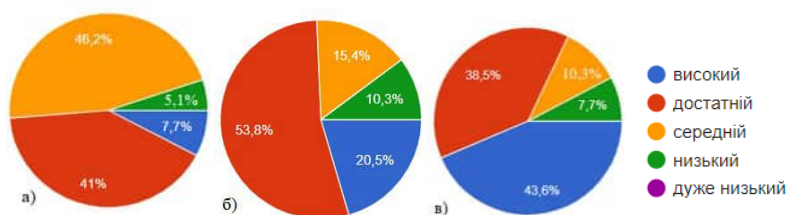
вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

e-mail: MariiaBozhena.Tunska@lnu.edu.ua

Формування культури здоров'я – це виховання у студентів-магістрів особистісних якостей, що сприяють збереженню та зміцненню здоров'я, підвищенню мотивації до ведення здорового способу життя,

Щоб з'ясувати ефективність формування культури здоров'я студентів під час вивчення хімічних дисциплін ми уклали анкету та провели анонімне анкетування 39 студентів ОС “Магістр”, першого та другого року денної форми здобуття освіти хімічного факультету.

Анонімне анкетування засвідчило, що 100 % респондентів розуміють важливість збереження власного здоров'я. Зокрема, 48,7 % студентів дотримуються правил раціонального харчування, 46,2 % – правильно організовують навчання та відпочинок, 43,6 % – систематично займаються спортом та дотримуються режиму дня. Водночас 20,5 % студентів не роблять нічого для збереження власного здоров'я. Студенти оцінили рівень сформованості їхньої культури здоров'я упродовж навчання на хімічному факультеті. Нам було дуже приємно, побачити що чим довше студенти навчаються на нашому факультеті, рівень сформованості культури здоров'я студентів зростає. З'ясовано, що 46,2 % респондентів вважають, що на I курсі навчання їх рівень був середній, на II-IV курсах – достатній (53,8 %), під час навчання у магістратурі – високий (43,6%).



Рівень сформованості культури здоров'я магістрів:

а) I курс; б) II-IV курс; в) магістратура.

Проведений нами педагогічний експеримент засвідчує, що хімічні знання, здобуті студентами у процесі вивчення хімічних дисциплін, створюють підґрунтя реалістичного ставлення до власного здоров'я та сприяють формуванню здоров'язбережувальної компетентності студентів.

КАФЕДРА ОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ

МОЛЕКУЛЯРНИЙ ДИЗАЙН ТА СИНТЕЗ НОВИХ ФЛУОРОФОРІВ З ПОЄДНАННЯМ ФРАГМЕНТІВ КАРБАЗОЛУ ТА ХІНОЛІН-2-ОНУ

Аксьонова М.В., Литвин Р.З., Обушак М.Д.

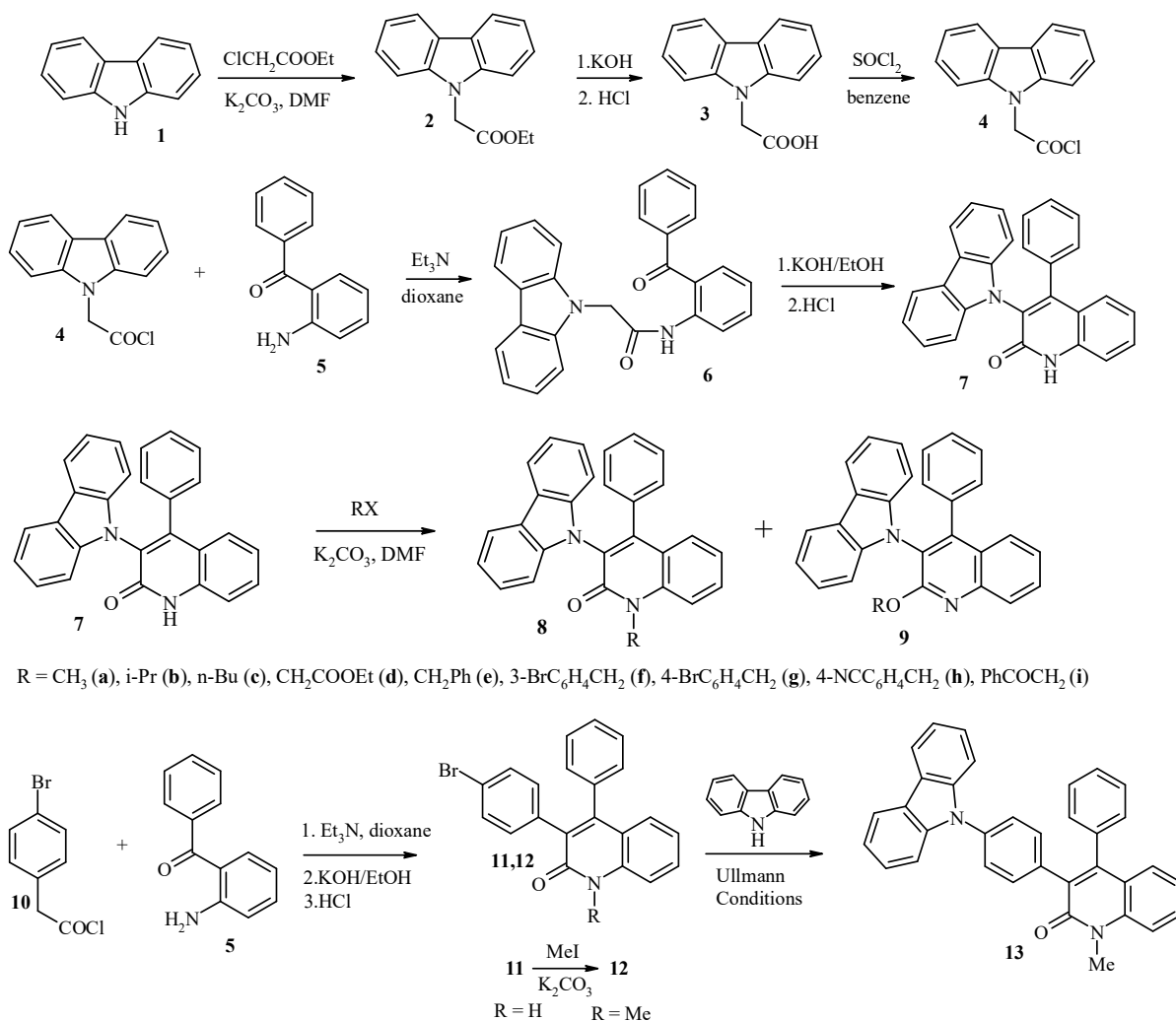
Кафедра органічної хімії,

Львівський національний університет імені Івана Франка,

вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

e-mail: Myroslava.Aksonova@lnu.edu.ua

Розроблено практично зручний та придатний до масштабування метод синтезу 3-(N-карбазоліл)-4-фенілхінолін-2-ону **7**. Сполука **7** реагує з алкілгалогенідами з утворенням продуктів N- та O-алкілювання **8** і **9**, відповідно. Кристали сполук **8**, на відміну від **9**, при опроміненні ультрафіолетом фосфоресцюють за кімнатної температури, в залежності від замісників, жовтим або оранжевим кольорами. Розроблено синтетичну схему одержання кон'югату **13**, в якому флуорофорні фрагменти карбазолу та хінолін-2-ону розділені феніленовим π -спейсером. Досліджуємо фотофізичні властивості синтезованих сполук.



СИНТЕТИЧНИЙ ПІДХІД ДО КОНСТРУЮВАННЯ МАЛЕЇНАМІДІВ З ФРАГМЕНТАМИ КАРБАЗОЛУ, ФЕНОТІАЗИНУ ТА АНТРАЦЕНУ

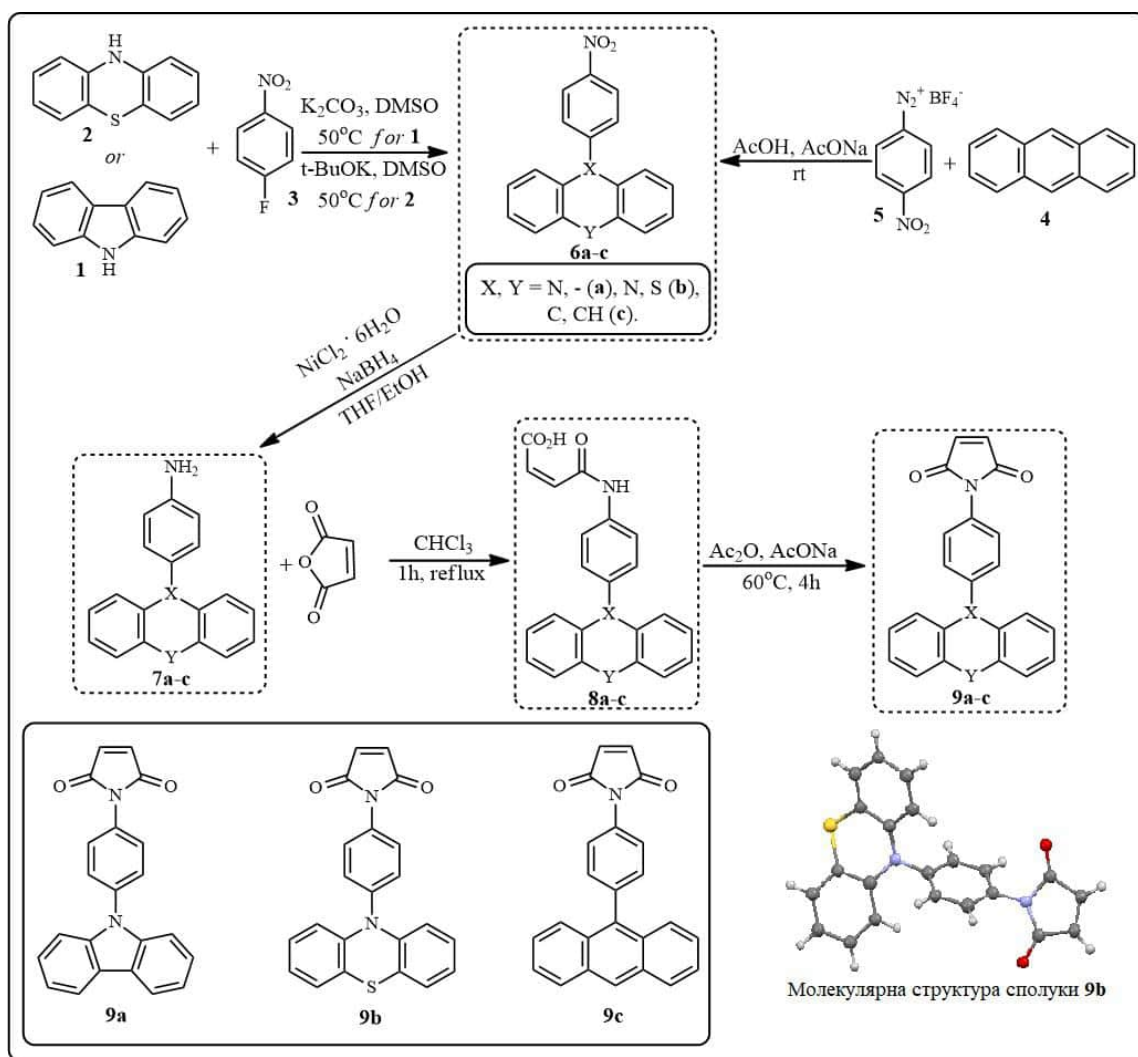
¹Єфімов І.А., ¹Бутенко С.О., ²Кінжибало В.В., ¹Литвин Р.З., ¹Обушак М.Д.

Кафедра органічної хімії,

¹Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005, м. Львів

²Institute of Low Temperature and Structure Research,
Okólna 2, 50-422 Wrocław, Poland
e-mail: Illia.Yefimov@lnu.edu.ua

У цій роботі ми розробили практично зручні синтетичні підходи до нових малеїнімідів (**9a-c**), з'єднаних *para*-феніленовим містком з донорними карбо- чи гетероциклами – карбазолом, фенотіазином чи антраценом. Слід зауважити, що вибрана нами стратегія не передбачає використання складних каталітичних систем та дорогих реагентів. Отримані малеїніміди є перспективними для конструювання нових TURN/OFF сенсорів, флуоресцентних міток для біологічних об'єктів, візуалізації процесів у живих клітинах та для вирішення інших практично важливих завдань.



ДОСЛІДЖЕННЯ ВЗАЄМОДІЇ АЛЬДЕГІДІВ ФУРАНОВОГО РЯДУ З 2-АМІНОБЕНЗІМІДАЗОЛОМ ТА 1,3-ДИКАРБОНІЛЬНИМИ СПОЛУКАМИ

¹Мотовильський В., ³Максимович І., ²Соловійов В.,
²Мотовильський О., ¹Литвин Р., ¹Горак Ю., ¹Обушак М.

Кафедра органічної хімії,

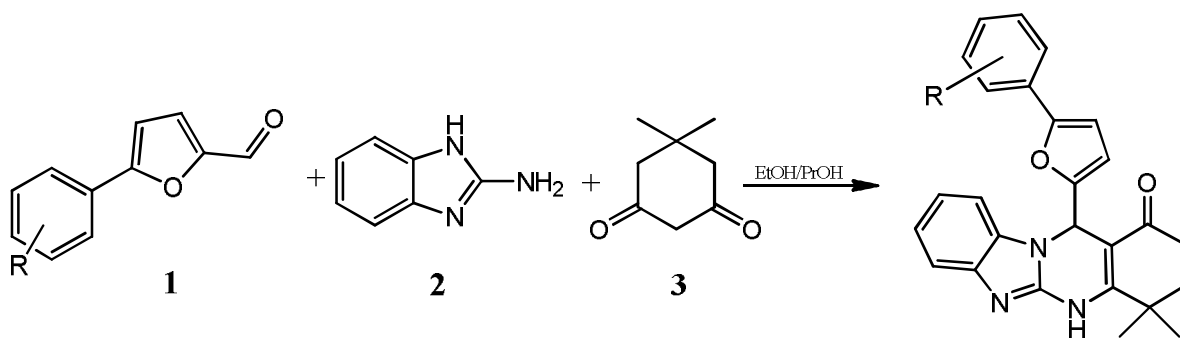
¹Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

²Рівненський НДЕКЦ МВС, вул. Гагаріна, 39, 33003 Рівне, Україна;

³Львівський НДЕКЦ МВС, вул. Конюшинна, 24, 79040 Львів, Україна
e-mail: yuriy.horak@lnu.edu.ua

Оскільки більшість лікарських препаратів та інших біологічно активних речовин є гетероциклічними сполуками або ж містять гетероциклічний фрагмент, це спонукає до пошуку ключових структурних елементів – фармакофорів і нових синтетичних підходів. Важливим у цьому сенсі класом сполук є похідні арилфуранів, оскільки такі структурні фрагменти входять до складу багатьох природних і синтетичних речовин, які виявляють біологічну активність. Деякі з них уже використовують як лікарські засоби, тому й синтез нових речовин, що містять арилфурильний фрагмент, є актуальною проблемою. Останнім часом у наукових журналах з медичної хімії постійно виходять публікації і патенти, що стосуються різних видів біологічної активності арилфуранових сполук. Наявність реакційноздатної альдегідної групи в 5-арилфурфуролах відкриває широкі можливості для перетворення їх у різноманітні арилфурановмісні гетероцикли. Метою нашої роботи було поєднання арилфуранового фрагменту з піримідо[1,2-*a*]бензімідазольним.

Для цього ми дослідили поведінку 5-арил-2-фуранкарбальдегідів у трикомпонентній циклізації з димедоном та бензімідазол-2-аміном. 5-Арил-2-фуранкарбальдегіди **1** реагують з бензімідазол-2-аміном **2** та димедоном **3** при кипінні в етиловому або пропіловому спирті протягом 24 год. З'ясовано, що утворюються тетрагідробензімідазо[2,1-*b*]хіназолін-1-они з арилфурановими фрагментами. Продукти реакції відфільтровували, промивали етанолом та перекристалізовували з диметилформаміду.



R = 4-Cl, 2,5-Cl₂, 2-NO₂, 4-Cl, 2-Cl, 2-NO₂, 2,4-Cl₂.

РЕАКЦІЇ N-АЦИЛЮВАННЯ/ЦИКЛОПРИЄДНАННЯ ЗА УЧАСТЮ 5-АРИЛ-2-ФУРИЛПРОПЕНІЛХЛОРИДІВ

Сітар А., Литвин Р., Горак Ю., Обушак М.

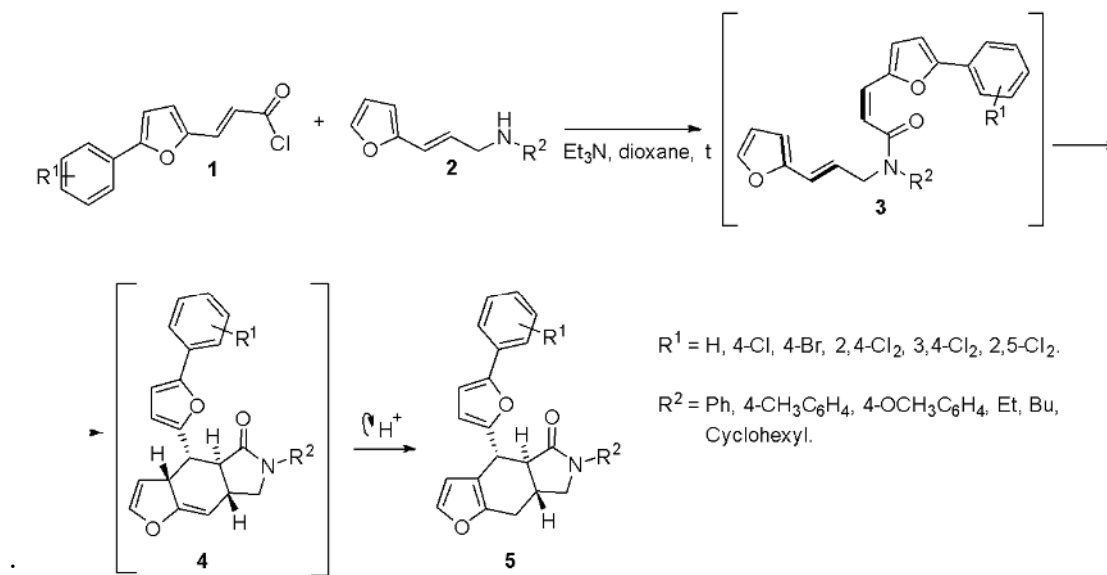
Кафедра органічної хімії,

Львівський національний університет імені Івана Франка,

вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

e-mail: ANDRII.SITAR@lnu.edu.ua

Інтрамолекулярна реакція Дільса-Альдера (IMDA) – потужний та ефективний інструмент, що відкриває широкі можливості для синтезу карбоциклічних, гетероциклічних, конденсованих систем, алкалоїдів, та інших природних і біологічно активних сполук. Приваблює простота та надійність такої реакції, можливість отримувати складні сполуки з відносно простих однією процедурою, що суттєво зменшує кількість реагентів, розчинників, а також відходів у порівнянні зі звичайним постадійним синтезом. Ми застосували цю реакцію у тандемі з N-ацилюванням для конструювання частково гідрованих ізоіндолів. З'ясовано, що під час ацилювання хлорангідридами 5-арил-2-фуранпропенових кислот **1** фурилаліламінів **2** у тих же умовах відбувається інтрамолекулярна реакція Дільса-Альдера, у якій дієноювою системою виступає екзоциклічний подвійний зв'язок разом з одним із подвійних зв'язків фуранового циклу проміжних сполук **3**. При цьому формується гексагідро-4*H*-фууро[2,3-*f*]ізоіндольний остов з арилфурановим фрагментом у положенні 6.



Сполуки **5** виявляють сильну люмінесценцію як у твердому стані, так і у розчині в ультрафіолеті при 360 нм.

КАФЕДРА ФІЗИЧНОЇ ТА КОЛОЇДНОЇ ХІМІЇ

ТЕОРЕТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ НА ПОВЕРХНІ
НАНОКРИСТАЛІВ ПЕРОВСКІТУ CsPbBr_3

Дубенська Л.В.^{1,2}

Кафедра фізичної і колоїдної хімії,

¹Львівський національний університет імені Івана Франка,

вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

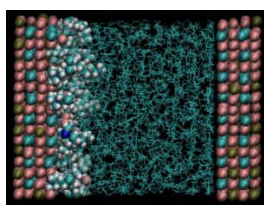
²Лабораторія неорганічної хімії факультету хімії і прикладних біонаук,

Швейцарська вища технічна школа Цюриха, Vladimir-Prelog-Weg 1-5/10, 8093 Zurich,
Switzerland

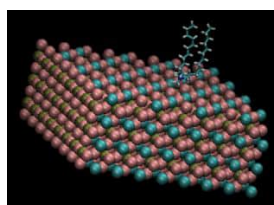
e-mail: LIDIJA.DUBENSKA@lnu.edu.ua

Механістичні уявлення про зв'язування стабілізуючих лігандів із поверхнею нанокристалу можна одержати, використовуючи методи класичної молекулярної динаміки [1], зокрема за допомогою програмного забезпечення GROMACS. Залежно від техніки, яку використовують можна встановити, які процеси відбуваються на поверхні нанокристалу в стані рівноваги, порівняти відносну ефективність різних способів пасивації поверхні частинки.

Моделювання проводили для наночастинок перовскіту CsPbBr_3 , розчинник – суміш ацетону та толуолу у співвідношенні 1:1 (за об'ємом). Як ліганд використовували дидодецилдиметил амоній. Вивчали ступінь покриття поверхні 50 %. Перед початком аналізу штучно складену систему (поверхня кристала, ліганди і розчинник) потрібно врівноважити – мінімізувати її енергію. Для цього спершу помістили систему в NVT ансамбль при 300 К. Опісля продовжили процес у NPT ансамблі. Для вивчення енергії взаємодії ліганду з поверхнею методом “umbrella sampling” (у перекладі “парасольковий відбір проб”) використали остаточно врівноважену систему. Щоб одержати енергетичний профіль взаємодії ліганду із поверхнею, ліганд “відривали” від поверхні і відтягували на відстань, на якій уже не буде взаємодії із поверхнею нанокристалу (Рис. 1б).



a



б

Рис. 1. Вигляд остаточно зрівноваженої системи(a); пласт нанокристалу із лігандом, який відриваємо (б).

[1] R. Leach. Molecular Modelling: principles and applications // 2nd edition. Pearson Education Limited, England – 2001. ISBN 0-582-38210-6

Висловлюю щиру подяку науковому консультанту Андрію Стельмаху і науковому керівнику групи професору Максиму Коваленку.

ДОСЛІДЖЕННЯ СТРУКТУРИ ПОЛІІНДОЛУ

Пришляк Х.А., Дутка В.С., Аксіментьєва О.І.

Кафедра фізичної та колоїдної хімії

Львівський національний університет імені Івана Франка,

вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

e-mail: Khrystyna.Pryshliak@lnu.edu.ua

Одним з яскравих представників спряжених полімерів є полііндол, який має досить високу електропровідність та хорошу термостабільність, володіє високою окиснювально-відновною активністю та стабільністю. Полііндол може бути отриманий при хімічній та електрохімічній полімеризації, але про структуру полімеру відомо мало [1]. Метою нашої роботи стало дослідження кінцевої структури полімерного ланцюга отриманого полімеру індолу методом ЯМР-спектроскопії.

На одержаному нами спектрі ЯМР-спектрі можна простежити два піки, один при хімічному зсуві 9,74 м.д. який відповідає одному гідрогену з групи N-H. Другий пік при 7.1 м.д. відповідає чотирьом гідрогенам, які наявні в бензольному кільці. (далі – вода=3,25 , ДМСО-диметилсульфоксим=2,5–2).

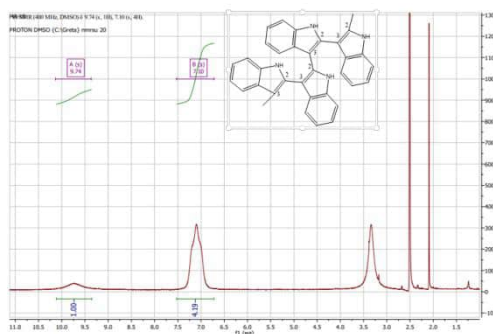


Рис. 1. Спектр ЯМР ^1H полііндолу в ДМСО. На вставці – структура досліджуваного полііндолу.

Одержані нами результати підтверджують регулярний характер структури одержаного полімерного ланцюга полііндолу, як продукту приєднання в положення 2,3.

[1] Talbia H., Monardb G., Loosb M., Billaud D. Theoretical study of indole polymerization /// J. Molecular Structure: THEOCHEM. –1998.– Vol. 434.– Issues 1–3.– P. 129–134. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0166-1280\(98\)00092-X](https://doi.org/10.1016/S0166-1280(98)00092-X)

МОДИФІКАЦІЯ АМОРФНИХ МЕТАЛЕВИХ СПЛАВІВ

Теміцька Р.Б., Герцик О.М.

Кафедра фізичної та колоїдної хімії,

Львівський національний університет імені Івана Франка,

вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

e-mail: ruslana.temitska@lnu.edu.ua

Фізико-хімічні властивості аморфних металевих сплавів (АМС) на основі Fe достатньо добре вивчені, що і визначило їх різноманітне застосування як прецизійних магнітних матеріалів, зокрема в медицині [1, 2]. Елементний склад, внутрішня структура та морфологія поверхні АМС зумовлюють необхідність детального дослідження таких систем для оптимального практичного використання.

Однак, проводячи модифікацію таких матеріалів, можна змінювати їх фізико-хімічні властивості, а, отже, і розширювати сфери використання.

Для здійснення модифікації поверхні АМС або всього об'єму зразка використовують різні типи обробки: лазерну, плазмову, анодну та катодну, ультразвукову, теплову, кріогенну, магнітним полем, нанесення полімерних покриттів тощо.

Структурні зміни в аморфних металевих сплавах на основі Fe, зумовлені різними зовнішніми впливами з метою модифікації, пов'язані з процесами релаксації і супроводжуються зняттям надлишкових напружень, а також зменшенням надлишкового вільного об'єму. Однак при цьому були також встановлені зміни і інших властивостей АМС, зокрема, магнітних, хімічних, корозійних. Тому пошук оптимальних способів та режимів обробки аморфних сплавів для досягнення заданих фізико-хімічних властивостей зразків, є перспективним напрямком для подальших досліджень фізичної хімії чи матеріалознавства.

[1] *Hertsyk, O.M., Hula, T.H., Kovbuz, M.O., Pandiak, N.L.* Electrochemical characteristics of modified amorphous alloys in nitric acid // *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.* – 2021. – Т. 43, №. 4. – С. 455–464.

[2] *Герцик О.М., Ковбуз М.О., Гула Т.Г., Корній С.А., Єзерська О.А., Пандяк Н.Л.* Корозійна тривкість модифікованих аморфних сплавів на основі заліза у сульфатній кислоті // *Фізико-хімічна механіка матеріалів.* – 2020. – № 6. – С. 30-37.

ЗМІСТ

Вольтамперометричне визначення атропіну в сечі з використанням алмазного електрода допованого бором <i>Волинець В.Ю., Душина О.М.</i>	4
Полярографічне визначення хініну та його N-оксиду <i>Душина О.М., Якубова Т.П.</i>	5
Сульфадиметоксин – перспективний аналіт для вольтамперометрії <i>Новожилова М.С.</i>	6
Дослідження оптимальних умов відновлення метронідазолу на амальгамному електроді <i>Піта Р.І., Плотнікова К.М.</i>	7
Електрохімічна поведінка понсо 4R на твердому амальгамному електроді, модифікованому ртутною плівкою <i>Трухим М.В., Дмухайло А. В.</i>	8
Дослідження системи Er-Cu-Sb <i>Клизуб П., Коник М.Б., Ромака Л.П.</i>	10
Система Ru-Mo-Ge <i>Коротошин Б., Муць Н. М., Гладішевський Р. Є.</i>	11
Монокристалльне дослідження кристалічної структури сполуки PrPdAl <i>Коць О.А., Ничипорук Г.П., Заремба В.І.</i>	12
Кристалічна структура тетрарної фази $Du_{0,67}Ni_2(Al,Ga)_5$ <i>Лесько О.Р., Муць Н.М., Токайчук Я.О., Гладішевський Р.Є.</i>	13

Потрійна система Yb–Ga–Sn при 600°C <i>Огоновський І.К., Токайчук Я.О., Гладилевський Р.Є.</i>	14
Гідриди на основі сполуки YCo <i>Саїдов Н.Р., Міліянчук Х.Ю., Гладилевський Р.Є.</i>	15
Кристалічна структура сполуки Nd ₁₁ Si _{3,24} In _{6,76} <i>Семерак Х., Ничипорук Г.П., Заремба В.І.</i>	16
Формування культури здоров'я студентів-магістрів під час вивчення хімічних дисциплін <i>Тунська М.-Б.В., Шпирка З.М.</i>	17
Молекулярний дизайн та синтез нових флуорофорів з поєднанням фрагментів карбазолу та хінолін-2-ону <i>Аксьонова М.В., Литвин Р.З., Обушак М.Д.</i>	19
Синтетичний підхід до конструювання малеїнамідів з фрагментами карбазолу, фенотіазину та антрацену <i>Єфімов І.А., Бутенко С.О., Кінжибало В.В., Литвин Р.З., Обушак М.Д.</i>	20
Дослідження взаємодії альдегідів фуранового ряду з 2-амінобензімідазолом та 1,3-дикарбонільними сполуками <i>Мотовильський В., Максимович І., Соловійов В., Мотовильський О., Литвин Р., Горак Ю., Обушак М.</i>	21
Реакції N-ацилювання/циклоприєднання за участю 5-арил-2-фурилпропенілхлоридів <i>Сітар А., Литвин Р., Горак Ю., Обушак М.</i>	22

Теоретичне моделювання процесів на поверхні нанокристалів перовскіту CsPbBr_3 <i>Дубенська Л.В.</i>	24
Дослідження структури полііндолу <i>Пришляк Х.А., Дутка В.С., Аксіментьєва О.І.</i>	25
Модифікація аморфних металевих сплавів <i>Теміцька Р.Б., Герцик О.М.</i>	26

АВТОРСЬКИЙ ПОКАЖЧИК

А

Аксiментьєва О.І.	25
Аксiонова М.В.	19

Б

Бутенко С.О.	20
--------------	----

В

Волинець В.Ю.	4
---------------	---

Г

Герцик О.М.	26
Гладишевський Р.Є.	11, 13, 14, 15
Горак Ю.І.	21, 22

Д

Дмухайло А.В.	8
Дубенська Л.В.	24
Дутка В.С.	25
Душна О.М.	4, 5

Є

Єфімов І.А	20
------------	----

З

Заремба В.І.	12, 16
--------------	--------

К

Кінжибало В.В.	20
Клизуб П.	10
Коник М.Б.	10
Коротошин Б.	11
Коць О.А.	12

Л

Лесько О.Р.	13
Литвин Р.	19, 20, 21, 22

М

Максимович І.	21
Міліянчук Х.Ю.	15
Мотовильський В.	21
Мотовильський О.	21
Муць Н.М.	11, 13

Н

Ничипорук Г.П.	12, 16
Новожилова М.С.	6

О

Обушак М.Д.	19, 20, 21, 22
Огоновський І.К.	14

П

Піта Р.І.	7
Плотнікова К.М.	7
Пришляк Х.А.	25

Р

Ромака Л.П.	10
-------------	----

С

Саїдов Н.Р.	15
Семерак Х.	16
Сітар А.	22
Соловйов В.	21

Т

Теміцька Р.Б.	26
Токайчук Я.О.	13, 14
Трухим М.В.	8
Тунська М.-Б.В.	17

Ш

Шпирка З.М.	17
-------------	----

Я

Якубова Т.П.	5
--------------	---

Студентська наукова конференція хімічного факультету

Пленарне засідання

(тези доповідей)

В авторській редакції.

Комп'ютерне верстання

Максим Кіц

Богдан Коротошин

Роман Піта

Софія Івах

Підп. до друку 27.06.2022. Формат 60x84/16. Цифровий друк.

Тираж 15 прим.

Малий видавничий центр хімічного та фізичного факультетів.

Львівський національний університет імені Івана Франка

Хімічний факультет

79005, м. Львів, вул. Кирила і Мефодія, 6

