

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

**ДНІПРОВСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ
АГРАРНО-ЕКОНОМІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**

**ДНІПРОВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ОЛЕСЯ ГОНЧАРА**

**ННІ «УКРАЇНСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ
ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ»
УКРАЇНСЬКОГО ДЕРЖАВНОГО УНІВЕРСИТЕТУ
НАУКИ І ТЕХНОЛОГІЙ**



МАТЕРІАЛИ ІІІ МІЖНАРОДНОЇ НАУКОВОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

**“Теоретичні та експериментальні аспекти
сучасної хімії та матеріалів”**

20 травня 2024 р.

**Дніпро
“Середняк Т.К.”
2024**

УДК 54(062.552)

Ч 58

Теоретичні та експериментальні аспекти сучасної хімії та матеріалів ТАСХ-2023: Матеріали III Міжнародної наукової конференції. 20 травня 2024 р., м. Дніпро. – Дніпро: “Середняк Т.К.”, 2024. – 216 с.

ISBN 978-617-8139-44-5

У збірнику представлені тези доповідей учасників заочної конференції у авторській редакції за тематиками: полімерне матеріалознавство; хімія та технологія композиційних і наноматеріалів; аналітична хімія навколишнього середовища та продуктів агровиробництва; інноваційні технології харчової промисловості; актуальні проблеми синтезу, структури та реакційної здатності органічних та елементоорганічних сполук; електроосадження металічних і полімерних покриттів; захист від корозійного руйнування; лакофарбові та захисні покриття.

Матеріали можуть бути корисними для викладачів, науковців, аспірантів, студентів та фахівців у галузі хімії, хімічної технології та агровиробництва.

ISBN 978-617-8139-44-5

ПРОГРАМНИЙ КОМІТЕТ

Голова комітету:

Кобець А.С., доктор наук з державного управління, професор, ректор ДДАЕУ;

Члени програмного комітету:

Алієв Е.Б., д.т.н., старший дослідник, професор кафедри інжинірингу технічних систем ДДАЕУ;

Баштаник П.І., к.т.н., доцент кафедри ТПП та ПМ НІІ УДХТУ;

Варгалюк В.Ф., д.х.н., проф., проф. кафедри фізичної, органічної та неорганічної хімії ДНУ;

Вишнікін А.Б., д.х.н., проф., професор кафедри аналітичної хімії та хімічної технології ДНУ, професор кафедри аналітичної хімії Університету ім. П.Й. Шафарика у м. Кошице (Словаччина);

Голіченко О.А., д.х.н., проф., в.о. завідувача кафедри неорганічної хімії НІІ УДХТУ;

Деркач О.Д., к.т.н., доц., завідувач кафедри ЕМТП ДДАЕУ;

Кабат О.С., д.т.н., проф., завідувач кафедри інноваційної інженерії НІІ УДХТУ;

Крамарьов С.М., д.с.-г.н., проф., завідувач кафедри агрохімії ДДАЕУ;

Науменко О.П., д.т.н., проф., професор кафедри інноваційної інженерії НІІ УДХТУ;

Новіцький Р.О., д.б.н., проф., завідувач кафедри ВБА ДДАЕУ;

Пальчиков В.О., д.х.н., проф., директор НДІ хімії та геології ДНУ;

Проценко В.С., д.х.н., проф., професор кафедри фізичної хімії НІІ УДХТУ;

Свердліковська О.С., д.х.н., проф., декан факультету економіко-гуманітарних наук та права, професор каф. ТПП та ПМ НІІ УДХТУ;

Ситар В.І., к.т.н., проф., професор кафедри інноваційної інженерії НІІ УДХТУ;

Стець Н.В. к.х.н., доц., завідувач кафедри фізичної, органічної та неорганічної хімії ДНУ;

Черваков О.В., д.т.н., проф., завідувач кафедри технології природних і синтетичних полімерів, жирів та харчової продукції НІІ УДХТУ;

Чигвінцева О.П., к.т.н., доцент, завідувач кафедри хімії ДДАЕУ;

Чурсінов Ю.О., д.т.н., професор кафедри харчових технологій ДДАЕУ;

Штамбург В.Г., д.х.н., проф., проф. фармації та технології органічних речовин НІІ УДХТУ.

ОРГАНІЗАЦІЙНИЙ КОМІТЕТ

Голова організаційного комітету:

Чигвінцева О.П., к.т.н., доцент, завідувач кафедри хімії ДДАЕУ.

Члени організаційного комітету:

Петрушина Г.О., к.х.н., доцент, доцент кафедри хімії ДДАЕУ;

Рула І.В., к.т.н., доцент, доцент кафедри хімії ДДАЕУ;

Токар А.В., к.х.н., доцент, доцент кафедри хімії ДДАЕУ;

Кравченко С.В., к.х.н., доцент, доцент кафедри хімії ДДАЕУ;

Бойко Ю.В., старший викладач кафедри хімії ДДАЕУ.

Секція 1

Полімерне матеріалознавство
Хімія та технологія
композиційних і наноматеріалів

**КВАНТОВО-ХІМІЧНІ АСПЕКТИ СТРУКТУРУВАННЯ
ПОЛІМЕРНИХ СИСТЕМ АРАМІДНОГО ТИПУ,
ЩО МІСТЯТЬ ГЕТАРИЛЬНІ ФРАГМЕНТИ**

Токар А.В., Тищенко В.А., Чигвінцева О.П.

Дніпровський державний аграрно-економічний університет,

вул. Сергія Єфремова, 25, 49009, м. Дніпро

atokar_2004@ukr.net

Комп'ютерне моделювання хімічних систем відкриває принципово нові можливості для вивчення особливостей будови та визначення зв'язку «структура – властивість» найрізноманітніших типів полімерних систем. При цьому варто звернути особливу увагу на здатність окремих макромолекул змінювати свою конформацію у широких межах. З одного боку, це визначає широкий спектр властивостей полімерів, а з іншого – ускладнює вивчення електронної будови цих сполук. На ранніх етапах дослідження полімерів переважно спиралися на експериментальні методи, серед яких слід відзначити дифракцію рентгенівських променів, а також спектроскопічні методи, тоді як теоретичний аналіз будувався на основі статистичної фізики твердого тіла. Останнім часом до них додалося комп'ютерне моделювання та надійні методи квантової хімії. За їх допомогою встановлюють тривимірну архітектуру полімерів, оцінюють їх різноманітні параметри та визначають структуру енергетичних рівнів [1].

Одержані дані можуть мати суттєве значення з точки зору попереднього оцінювання енергетичних ефектів міжмолекулярних взаємодій, що виникають на рівні окремих ділянок – структурних фрагментів макромолекул, включаючи можливість утворення водневих зв'язків. Зокрема, у випадку бензаніліду, що відтворює будову мономерної ланки фенілонів, матимемо справу із описаною раніше димеризованою формою (1), структуру якої наведено на рис. 1. Аналіз орбітальних взаємодій, які виникають в умовах утворення такого комплексу, свідчить про те, що основний внесок у загальну енергію стабілізації системи,

що становить не менше 17,8 кДж/моль, складають власні неподілені електронні пари атома Оксигену карбонільної групи ($>C=O$), які слугують донорами електронної густини для зв'язку ($>NH$) молекули партнера. Відповідні значення параметрів $E(2)$ для перекривань типу $n_{1,2}(O) \rightarrow \sigma^*(NH)$ становлять 15,4 та 9,5 кДж/моль і є суттєво нижчими за споріднені внутрішньомолекулярні взаємодії.

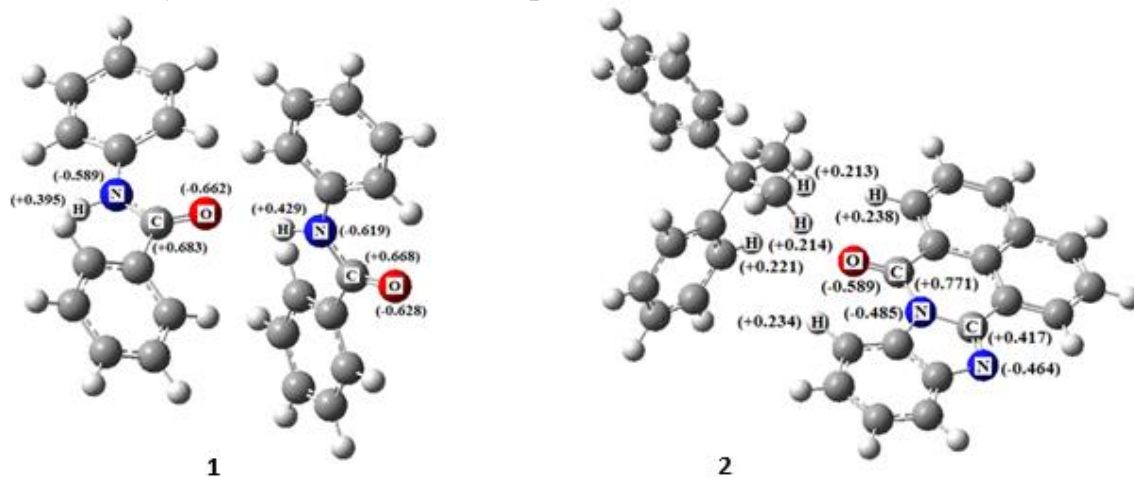


Рис. 1. Структура комплексів на основі двох молекул бензаніліду (1) та бензо[*de*]бензо[4,5]імідазо[2,1-*a*]ізохінолін-7-ону з 2,2-дифенілпропаном (2)

Для оцінки спорідненості структури, що відтворює будову жорстко-ланцюгового полігетероарилену, в якості молекули-партнера було обрано 2,2-дифенілпропан як базовий фрагмент багатьох полімерних систем, які одержують на основі бісфенолу А, а саме: діанових епоксидних смол, полікарбонату, полісульфону, поліарилату тощо. При цьому загальна енергія стабілізації системи (2) не перевищувала 5,7 кДж/моль, вказуючи тим самим на можливість утворення слабких міжмолекулярних взаємодій, переважно електростатичного характеру. Прийняття до уваги поправок на енергію нульових коливань призводило до зниження енергії в середньому на 0,9 кДж/моль, тоді як урахування похибки суперпозиції базисних наборів, навпаки, сприяло її зростанню приблизно на 2,0 кДж/моль. Для ідентифікації природи цих зв'язків у межах АІМ-теорії, нами було розраховано значення електронної густини, а також лапласіана електронної густини у $(3,-1)$ критичних точках найменш енергомістких взаємодій з метою їх додаткової оцінки з точки зору ефективності зв'язування. Як свідчать дані, наведені у табл. 1 та на рис. 2–3, одержані топологічні параметри добре корелюють із довжинами відповідних зв'язків у всьому діапазоні наведених значень.

Таблиця 1. Деякі величини топологічних параметрів у (3,-1)
критичних точках зв'язків у залежності від їх довжини (R)

Параметр	<i>DFT-B3LYP/6-311++G(d,p)</i>				
Модельный комплекс (3)					
ρ , е/Å ³	0,0187	0,0170	0,0083	0,0076	0,0042
$\nabla^2\rho$, е/Å ⁵	0,0174	0,0156	0,0068	0,0067	0,0028
R, Å	2,193	2,246	2,523	2,600	2,997
Модельный комплекс (4)					
ρ , е/Å ³	0,0107	0,0049	0,0042	0,0030	0,0009
$\nabla^2\rho$, е/Å ⁵	0,0096	0,0040	0,0039	0,0021	0,0008
R, Å	2,514	2,740	2,783	3,122	3,307

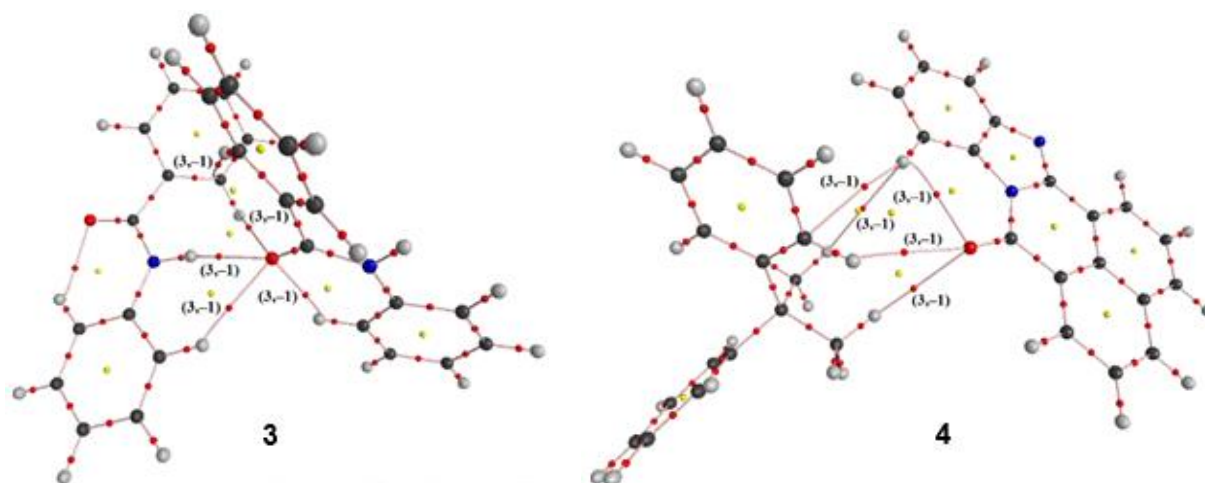


Рис. 2. Молекулярний граф 3D-моделей міжмолекулярних комплексів,
візуалізований у програмі AIM2000

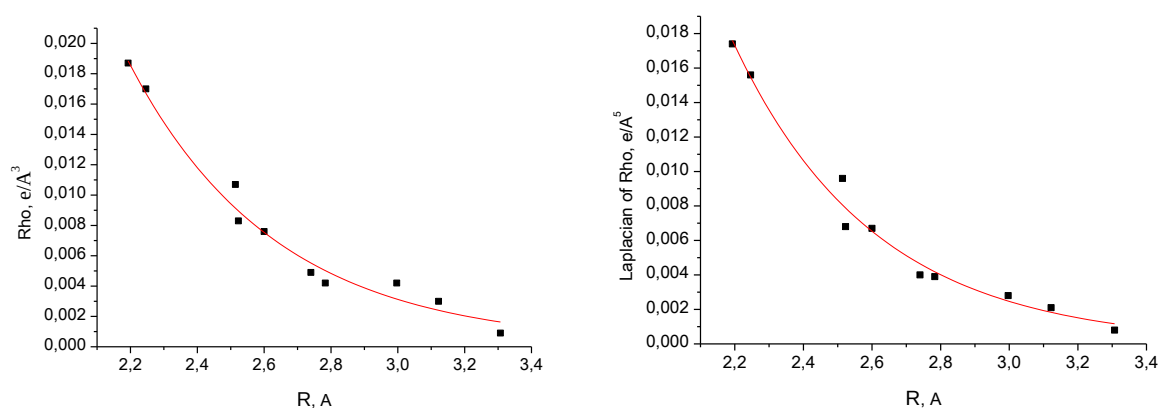


Рис. 3. Характеристичні криві електронної густини (ліворуч) та лапласіана
електронної густини (праворуч) як функції міжатомних відстаней

На рис. 3 показано хід залежностей $\rho(R)$ та $\nabla^2\rho(R)$, що при спробі лінеаризації вказують на наявність чіткого перегину із розмежуванням проміжних за силою водневих зв'язків та слабких ван-дер-ваальсових взаємодій на відстанях близько 2,520–2,780 Å. Одержані результати цілком узгоджуються із літературними даними, що стосуються особливостей розподілу електронної густини у молекулярних кристалах ароматичних структур, у тому числі й з урахуванням ефективних *стекінг*-взаємодій, й таким чином можуть бути використані для ідентифікації характеру окремих зв'язків:

$$\rho(R) = (2,800 \pm 2,299) \cdot \exp[(-R)/(0,438 \pm 0,076)], r = 0,981, n = 10, \quad (1)$$

$$\nabla^2\rho(R) = (3,677 \pm 1,199) \cdot \exp[(-R)/(0,411 \pm 0,024)], r = 0,985, n = 10. \quad (2)$$

Кореляційні рівняння, засновані на цих властивостях, дозволяють передбачити енергію взаємодії бензенових кілець із мінімальним значенням відносної похибки у межах даної ділянки поверхні потенційної енергії.

Особливої уваги заслуговує також визначення деяких термодинамічних параметрів, що стосуються процесів утворення та руйнування досліджуваних комплексів. Розраховані значення ентальпії, ентропії та енергії Гіббса утворення комплексу (3) становлять $-16,1$ кДж/моль, $-95,4$ Дж/моль·К та $+12,4$ кДж/моль. Для комплексу (4) вони складають $+3,1$ кДж/моль, $-63,9$ Дж/моль·К та $+22,1$ кДж/моль. В останньому випадку незначний внесок ентальпійного фактору добре узгоджується із невеликою енергемісткістю досліджуваних взаємодій, тоді як більш вагомий внесок ентропійної складової легко пояснюється суттєвими обмеженнями у поступальних, обертальних та коливальних ступенях свободи окремих молекул в умовах зв'язування. Останнє має бути особливо помітним при аналізі базових спектральних характеристик досліджуваних систем та потребує їх подальшого теоретичного обґрунтування.

Література:

1. Tokar A.V. (2023). Theoretical aspects of structuring for aramid type polymer systems containing aryl as well as hetaryl fragments: a comparative analysis. Modern aspects of natural science research in the context of sustainable development of society: Scientific monograph. Riga, Latvia: "Baltija Publishing", 2023. P. 318–337.

З М І С Т

Секція 1. Полімерне матеріалознавство.

Хімія та технологія композиційних і наноматеріалів 4

Kozak N., Shantalii T., Matzui L., Kosyanchuck L.,

Vovchenko L., Dragan K., Antonenko O.

Polyimide and polyurethane based polymer nanocomposites with specific
electromagnetic properties 5

Ловчицька В.С., Ковалишин Я.С., Перевізник О.Б.

Електрохімічне окиснення піролу в присутності карбонових
нанотрубок 9

Косянчук Л.Ф., Бабкіна Н.В., Воронцова Л.О., Антоненко О.І.,

Козак Н.В., Безродний В.І., Безродна Т.В.

Прозорий наповнений нано-SiO₂ поліуретан як матриця лазерного
елементу, демпферний матеріал з ефективним захистом від
УФ-випромінювання 13

Кучеренко А.М., Помірко О.Є., Моравський В.С.

Одержання легких епоксидних металонаповнених композитів 16

Чигвінцева О.П., Рула І.В., Гончаров Д.

Вуглепластик на основі цинк-вмісного вуглецевого волокна 17

Чигвінцева О.П., Рула І.В., Бойко Ю.В.

Вуглепластики на основі метало-вмісних волокон 20

Токар А.В., Тищенко В.А., Чигвінцева О.П.

Квантово-хімічні аспекти структурування полімерних систем
арамідного типу, що містять гетарильні фрагменти 24

Корній С.А., Сободош Н.Й.

Інгібувальна дія органічної композиції натрій альгінату та цинк
ацетату в 0,1%–вому розчині натрій хлориду на корозію
алюмінієвого сплаву 28

Наукове видання

**МАТЕРІАЛИ
III МІЖНАРОДНОЇ НАУКОВОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ**

**“Теоретичні та експериментальні аспекти
сучасної хімії та матеріалів”**

TACX 2024

Відповідальні за випуск – Чигвінцева О.П., Рула І.В.

Підписано до друку 19.05.2024 р.

Формат 60 × 80/16. Папір офс.

Ум. друк. арк. 9,0. Ум. вид. арк. 8,2. Тираж 100 прим. Зам. № 30717

Видавець «ФОП Середняк Т.К.», 49000, Дніпро, 18, а/с 1212

Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи до Державного реєстру
видавців, виготівників і розповсюджувачів видавничої продукції ДК № 4379 від 02.08.2012.

Ідентифікатор видавця в системі ISBN 8139

49000, Дніпро, 18, а/с 1212

тел. (096)-308-00-38, (056)-798-04-00

E-mail: 7980400@gmail.com

Віддруковано на базі поліграфічно-видавничого центру «Кавун»

49018, Дніпро, 18, а/с 1212

тел. (066)-55-312-55, (056)-798-22-47

E-mail: arbuz.in.ua@gmail.com

www.arbuz.in.ua