



BALTIC INTERNATIONAL ACADEMY

International scientific conference

THE LATEST BREAKTHROUGHS IN ECOLOGY, CHEMISTRY, GEOGRAPHY, PHYSICS, MATHEMATICS, AND EARTH SCIENCES

October 3–4, 2024



IZDEVNIECĪBA
BALTĪJA
PUBLISHING

2024

ORGANISING COMMITTEE:

Stanislav Buka – dr.oec., prof., Rector of the Baltic International Academy;

Iryna Plotka – dr.psych., prof., Baltic International Academy;

Tatiana Yurkevich – dr.iur., as.prof., Baltic International Academy;

Alla Iljina – dr.oec., docent, Baltic International Academy;

Zhanna Tsaurkubule – dr.sc.ing., professor, Baltic International Academy.

Each author is responsible for content and formation of his/her materials.

The reference is mandatory in case of republishing or citation.

The latest breakthroughs in ecology, chemistry, geography, physics, mathematics, and earth sciences (October 3–4, 2024. Riga, the Republic of Latvia) : International scientific conference. Riga, Latvia : Baltija Publishing, 2024. 84 pages.

CONTENTS

SECTION 1. AGRONOMY

Plants of the family *Euphorbiaceae* Juss. in the natural flora
of the Kingdom of Belgium

Levchyk N. Ya., Zaimenko N. V., Horbenko N. Ye. 5

SECTION 2. EXPERIMENTAL BOTANY

Protein distribution in biotechnological variants *Nicotiana tabaccum* L.
in vitro under salt stress conditions

Bronnikova L. I., Zaitseva I. O. 12

SECTION 3. ECOLOGY

Industrial waste as a consequence of the principle
of thermodynamic duality in the technological process

Voloshyn V. S. 16

Methods of determining polyaromatic hydrocarbons in the environment

Korniienko V. I., Berezovskyi O. V., Midyk S. V. 22

Optimization of drinking water quality assessment
using correlation analysis

Mats A. D., Smyrnov V. M. 26

Monitoring of the environmental state of oak plantations
using remote sensing

Nebesnyi V. B., Grodzynska G. A., Golubov S. I. 31

Studying some habitats of populations of the hare's tail-cottongrass (*Eriophorum
Vaginatatum* L.) in the territories of Ukraine (Kharkiv, Kyiv, Vinnytsia, Lviv,
Rivne, Chernivtsi, Zakarpattia, Ternopil, Dnipropetrovsk, Odesa,
Ivano-Frankivsk, Volyn, Mykolaiv regions for the period 2013–2024)

Roppe-Teneishvili O. V., Peresada Ye. A. 36

Territory (Aquatory), Population, and Natural Resource Potential
of the Ecosystems of the Ukrainian Carpathians as Key Components
of the Ecological Cadastre

Rudenko S. V. 39

Changes in the species diversity of Lepidoptera in the territory
of the national natural monument “Lysa Hora and Hora Sybukha”

Shamro N. R., Ryzhenko N. M. 44

Mealworms are plastic waste disposers

Shtuchka M. R., Tytova Yu. O. 46

SECTION 4. MEDICAL AND BIOLOGICAL RESEARCH

Prevalence of allergic diseases in children of different age groups Sidashenko O. I., Voronkova Yu. S.	49
The effect of complex treatment with ezetimibe on the blood lipid spectrum in women with menopausal metabolic syndrome Skoreiko N. T., Skoreiko R. S., Palapa V. V.	52

SECTION 5. CHEMISTRY

The quantum-chemical investigation for the interaction mechanism of tertiary aliphatic amines with epichlorohydrin Tokar A. V.	55
---	----

SECTION 6. PHYSICAL AND GEOGRAPHICAL RESEARCH

Dynamics of modern crustal movements in Transcarpathia: hydrogeological aspect Ignatyshyn V. V., Izhak T. Y., Molnar D S. S.	59
Analysis of changes in the air temperature regime in the conditions of the Kharkiv region Koliada O. V., Korobkova H. V., Mikheeva O. O.	63
Rains of the SHP category (natural phenomena) on the territory of Ukraine during the years 2020–2022 Pyasetska S. I.	67

SECTION 7. SOCIO AND GEOGRAPHICAL RESEARCH

Sports as a component of the resilience of the urban environment in Ukraine Serzhan V. A.	71
--	----

SECTION 8. FEATURES OF TRAINING SPECIALISTS IN NATURAL SCIENCES

Professional guidance in physics classes as a component of the development of subject and key competences Leonidova A. O., Skrynnik I. M.	75
--	----

SECTION 5. CHEMISTRYDOI <https://doi.org/10.30525/978-9934-26-477-1-13>**THE QUANTUM-CHEMICAL INVESTIGATION
FOR THE INTERACTION MECHANISM OF TERTIARY
ALIPHATIC AMINES WITH EPICHLOROHYDRIN****КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ МЕХАНІЗМУ
ВЗАЄМОДІЇ ТРЕТИННИХ АЛІФАТИЧНИХ АМІНІВ
З ЕПІХЛОРГІДРИНОМ****Tokar A. V.**

*Candidate of Chemical Sciences,
Associate Professor,
Associate Professor
at the Department of Chemistry
Dnipro State Agrarian
and Economic University
Dnipro, Ukraine*

Токар А. В.

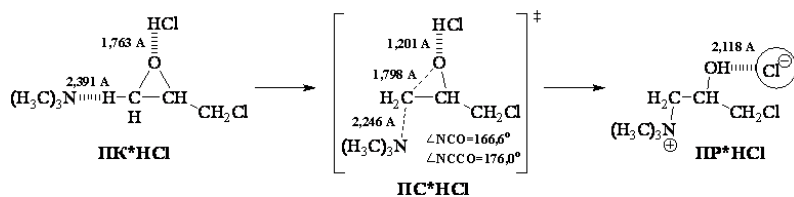
*кандидат хімічних наук, доцент,
доцент кафедри хімії
Дніпровський державний аграрно-
економічний університет
м. Дніпро, Україна*

Епіхлоргідрин (**ЕХГ**) відноситься до розряду комерційно доступних епоксидних сполук, які знаходять широке практичне застосування у виробництві найрізноманітніших синтетичних продуктів, серед яких особливо варто відмітити гліцерол та епоксидні смоли, а також гуми та еластомери. Поряд із прикладним аспектом, значну зацікавленість представляє вивчення найбільш вірогідних механізмів та шляхів перебігу реакцій, які здійснюються за участю як самих епоксидних сполук, так і їхніх численних похідних. Саме з цієї причини епіхлоргідрин протягом тривалого часу залишається предметом цілого ряду експериментальних та теоретичних досліджень, котрі постійно поповнюють та розвивають цю область хімії.

Беручи до уваги високу практичну цінність епоксидів, в рамках даного дослідження в якості об'єктів нами було обрано епіхлоргідрин та ряд третинних аліфатичних амінів (**ТАА**), що виступають в якості реакційних партнерів у процесі амінолізу, який перебігає за умов присутності електрофільного каталізатору – гідроген хлориду. Метою даної роботи є отримання нових даних про механізм взаємодії у системі «**ЕХГ**–**ТАА**», що включає вибір основних напрямків перебігу досліджуваних процесів, а також розробку теоретичної моделі, що

описує особливості електрофільної активації епоксидного циклу в умовах реакції *N*-гліцидилювання [1, с. 28].

Як показують результати кінетичного аналізу численних реакцій амінолізу епоксидних сполук, що перебігають за умов присутності мінеральних кислот, первинними процесами взаємодії такого типу є стадія попереднього утворення міжмолекулярних комплексів із протонованим атомом Оксигену епоксидного циклу. У випадку взаємодії епіхлоргідрину з гідроген хлоридом триметиламіну $(\text{CH}_3)_3\text{N}\cdot\text{HCl}$ в якості кінцевого продукту реакції утворюється *N*-(3-хлоро-2-гідроксипропіл)триметиламоній хлорид з майже теоретичним виходом. Спираючись на ці дані, нами було запропоновано теоретичну модель, яка окрім реакційних партнерів досліджуваного процесу (ЕХГ та ТМА) також включала молекулу HCl в якості електрофільного активатора епоксидного циклу (рис. 1):



$$\Delta E_{\text{AKT}} = 66,8 \text{ кДж/моль [B3LYP/6-311+G(d,p)]}$$

$$\Delta E_{\text{AKT}} = 67,5 \text{ кДж/моль [MP2/6-311+G(d,p)]/B3LYP/6-311+G(d,p)}$$

Рис. 1. Схема повного реакційного шляху розкриття епоксидного циклу молекули ЕХГ триметиламіном (ТМА) за умов електрофільної активації молекулою HCl , а також величини відповідних активаційних бар'єрів (кДж/моль)

Порівняння отриманих результатів з даними, одержаними раніше [2, с. 16], свідчить про суттєве зниження активаційних бар'єрів досліджуваних процесів. Дійсно, для розрахункового наближення $\text{MP2/6-311+G(d,p)}/\text{B3LYP/6-311+G(d,p)}$ різниця відповідних значень E_{AKT} складає не менше 41,0 кДж/моль та вказує на значний стабілізуючий вплив молекули гідроген хлориду на структуру перехідного стану ($\text{PS}\cdot\text{HCl}$), переважно за рахунок перенесення протона на атом Оксигену епоксидного циклу.

Наступним етапом нашого дослідження стало вивчення особливостей перебігу амінолізу епіхлоргідрину за участю інших третинних аліфатичних амінів (ТАА), зокрема триетиламіну та триетаноламіну, які виступають в якості структурних аналогів обраної раніше модельної сполуки (ТМА). Для урахування впливу сольватаційних ефектів середовища, представленого розчином ацетонітрилу ($\epsilon = 36,6$),

розрахункову модель було доповнено з використанням методу поляризуючого континууму у наближенні *PCM-B3LYP/6-311+G(d,p)*. Результати розрахунків наведено у табл. 1.

Таблиця 1

Геометричні параметри перехідних станів реакції розкриття епоксидного циклу ЕХГ третинними аліфатичними амінами (ТАА) за умов електрофільної активації молекулою HCl, а також величини відповідних активаційних бар'єрів (κ Дж/моль), розраховані відносно ізольованих реагентів [ЕХГ–HCl] + ТАА

ТАА	Довжини зв'язків, Å		Кути, град		E _{акт} , кДж/моль
	C–O	C–N	NCO	NCCO	
Газова фаза [B3LYP/6-311+G(d,p)]					
(CH ₃) ₃ N	1,798	2,246	166,6	176,0	56,9
(CH ₃ CH ₂) ₃ N	1,793	2,295	167,3	176,6	66,2
(HOCH ₂ CH ₂) ₃ N	1,793	2,301	166,4	174,7	79,8
Ацетонітрил [PCM-B3LYP/6-311+G(d,p)]					
(CH ₃) ₃ N	1,668	2,493	168,6	179,2	25,1
(CH ₃ CH ₂) ₃ N	1,694	2,516	169,6	179,1	36,2
(HOCH ₂ CH ₂) ₃ N	1,741	2,457	169,7	179,0	50,3

Порівняння отриманих значень активаційних бар'єрів між собою свідчить про те, що основний внесок у нуклеофілну реакційну здатність третинних амінів у реакції з ЕХГ вносить переважно стеричний (просторовий) фактор, адже зі збільшенням розмірів аліфатичних фрагментів, що знаходяться у безпосередній близькості від атакуючого атома Нітрогену, спостерігається закономірне зростання відповідних величин енергії активації. У випадку розчину ацетонітрилу помічені тенденції цілком зберігаються, демонструючи суттєвий стабілізуючий вплив сольватаційних ефектів середовища, переважно за рахунок проявів неспецифічної сольватації [3, с. 244].

Методика проведення квантово-хімічних розрахунків

Розрахунки з використанням методу функціоналу густини у наближенні **B3LYP/6-311+G(d,p)** та **MP2/6-311+G(d,p)//B3LYP/6-311+G(d,p)** проводилися за допомогою програмного пакету Gaussian 03, Revision E.01. Для всіх стаціонарних точок розраховувалися набори коливальних частот, згідно з якими перехідні стани характеризувалися однією уявною частотою, а всі частоти структур, що відповідали мінімумам на

поверхні потенційної енергії, були позитивними. Енергетичні характеристики реакцій розраховувалися відносно суми енергій ізольованих реагентів та відповідних передреакційних комплексів у газовій фазі та розчині ацетонітрилу (сольватаційна модель *PCM*) з урахуванням спеціальних поправок на енергію нульових коливань.

Література:

1. Tokar A. V. The quantum-chemical investigation of *N*-cyclization reaction mechanism for epichlorohydrin aminolysis products. *Visn. Dnipropetr. Univ.: Khim. – Bull. Dnipropetr. Univ.: Chem.* 2014. Vol. 22. № 2. P. 27–30. <https://doi.org/10.15421/081418>
2. Токар А. В., Петрушина Г. О. Квантово-хімічне дослідження механізму гетероциклізації олігомерного продукту амінолізу епіхлоргідрину: епоксид чи діоксан? *Journal of Chemistry and Technologies.* 2018. Vol. 26. № 2. P. 12–19. <https://doi.org/10.15421/0817260202>
3. Токар А. В. Квантово-хімічне дослідження реакційної здатності епіхлоргідрину та олігомерних продуктів на його основі при промотуванні полімеризаційних процесів. *New factors for the development of natural sciences in Ukraine and EU countries : scientific monograph.* Riga, Latvia : “Baltija Publishing”, 2023. P. 235–259. <https://doi.org/10.30525/978-9934-26-288-3-12>

The project was implemented with the support of



The Center for Ukrainian-European Scientific Cooperation is a non-governmental organization, which was established in 2010 with a view to ensuring the development of international science and education in Ukraine by organizing different scientific events for Ukrainian academic community.

The priority guidelines of the Center for Ukrainian-European Scientific Cooperation

1. International scientific events in the EU

Assistance to Ukrainian scientists in participating in international scientific events that take place within the territory of the EU countries, in particular, participation in academic conferences and internships, elaboration of collective monographs.

2. Scientific analytical research

Implementation of scientific analytical research aimed at studying best practices of higher education establishments, research institutions, and subjects of public administration in the sphere of education and science of the EU countries towards the organization of educational process and scientific activities, as well as the state certification of academic staff.

3. International institutions study visits

The organisation of institutional visits for domestic students, postgraduates, young lecturers and scientists to international and European institutes, government authorities of the European Union countries.

4. International scientific events in Ukraine with the involvement of EU speakers

The organisation of academic conferences, trainings, workshops, and round tables in picturesque Ukrainian cities for domestic scholars with the involvement of leading scholars, coaches, government leaders of domestic and neighbouring EU countries as main speakers.

Contacts:

Head Office of the Center for Ukrainian-European Scientific Cooperation:
88000, Uzhhorod, 25, Mytraka str.
+38 (099) 733 42 54
info@cuesc.org.ua

**The latest breakthroughs in ecology, chemistry, geography, physics,
mathematics, and earth sciences**

October 3–4, 2024

Izdevniecība “Baltija Publishing”
Valdeķu iela 62 – 156, Rīga, LV-1058
E-mail: office@baltijapublishing.lv

Iespiests tipogrāfijā SIA “Izdevniecība “Baltija Publishing”
Parakstīts iespiešanai: 2024. 7. oktobris
Tirāža 100 eks.