

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

**ДНІПРОВСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ
АГРАРНО-ЕКОНОМІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**

**ДНІПРОВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ОЛЕСЯ ГОНЧАРА**

**ДВНЗ “УКРАЇНСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ
ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ”**



**МАТЕРІАЛИ
І МІЖНАРОДНОЇ НАУКОВОЇ
КОНФЕРЕНЦІЇ**

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

*присвячена 100-річчю Дніпровського державного
аграрно-економічного університету*

20 травня 2022 р.

**Дніпро
“Середняк Т.К.”
2022**

УДК 54(062.552)

Ч 34

Рекомендовано до друку вченою радою агрономічного факультету Дніпровського державного аграрно-економічного університету (протокол № 10 від 10.05.2022 р.)

Теоретичні та експериментальні аспекти сучасної хімії та матеріалів ТАСХ-2022: Матеріали I Міжнародної наукової конференції, що присвячена 100-річчю Дніпровського державного аграрно-економічного університету. 20 травня 2022 р., м. Дніпро. – Дніпро: “Середняк Т.К.”, 2022. – 290 с.

ISBN 978-617-8010-96-6

У збірнику представлені тези доповідей учасників заочної конференції у авторській редакції за тематиками: полімерне матеріалознавство; хімія та технологія композиційних 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 978-617-8010-96-6

Секція 1

*Полімерне матеріалознавство
Хімія та технологія
композиційних наноматеріалів*

**ЯМР СПЕКТРАЛЬНІ ДОСЛІДЖЕННЯ
ВНУТРІШНЬОМОЛЕКУЛЯРНИХ ВЗАЄМОДІЙ
У СИСТЕМАХ НА ОСНОВІ ФЕНІЛОНУ**

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

Дніпровський державний аграрно-економічний університет

вул. Сергія Єфремова, 25, 49600, м. Дніпро

atokar_2004@ukr.net

Спектроскопія ядерного магнітного резонансу відкриває широкі можливості для якісної ідентифікації та дослідження будови полімерних матеріалів за характеристичними сигналами у спектрах ЯМР, а саме їх положенням, інтенсивністю та мультиплетністю, а також особливостями спін-спінових взаємодій, що дозволяють визначати склад окремих макромолекул. ЯМР широких ліній застосовують для вивчення структури полімерів, зокрема ступеня їх кристалічності, а також різних типів молекулярних рухів, що відповідають процесам фазових переходів, склування тощо. До очевидних переваг спектроскопії ЯМР слід віднести простоту спектрів, а також можливість здійснення абсолютних кількісних визначень без калібрування за теоретичними моделями. Однак суттєвим обмеженням методу залишається умова достатньої розчинності полімерів з концентрацією у розчинах не менше 3-5 мас.% [1].

Особливу зацікавленість являють численні спроби теоретичного обґрунтування спектрів ядерного магнітного резонансу з точки зору надійних квантово-хімічних методів, що призначені для розрахунку тензорів екранування та магнітної сприйнятливості молекулярних систем у газовій фазі та різноманітних розчинниках. При цьому від калібрувальної залежності зазвичай позбавляються за рахунок введення залежних від поля наборів базисних функцій. Метод розрахунку спектрів ЯМР з використанням такого підходу ще називають GIAO (Gauge-Independent Atomic Orbital). Таким чином, метою даної роботи стало детальне теоретичне дослідження спектрів ядерного магнітного резонансу *N*-фенілбензаміду як прототипу мономерної ланки арамідів, зокрема фенілону,

з метою прогнозування їх базових спектральних характеристик у газовій фазі та середовищі дипольного апротонного розчинника за допомогою *ab initio* методів квантової хімії.

На початкових етапах дослідження значної уваги було приділено попередньому визначенню базових сигналів у спектрі ЯМР ^1H модельної сполуки *N*-фенілбензаміду за допомогою можливостей програмного пакету ChemNMR Pro з оцінкою хімічних зсувів та віднесенням сигналів окремих структурних фрагментів, що містять у своєму складі екрановані атоми Гідрогену різних типів, зокрема протони бензенових кілець та місткової амідної групи в межах обраної спінової системи. Одержані результати наведено на рис. 1.

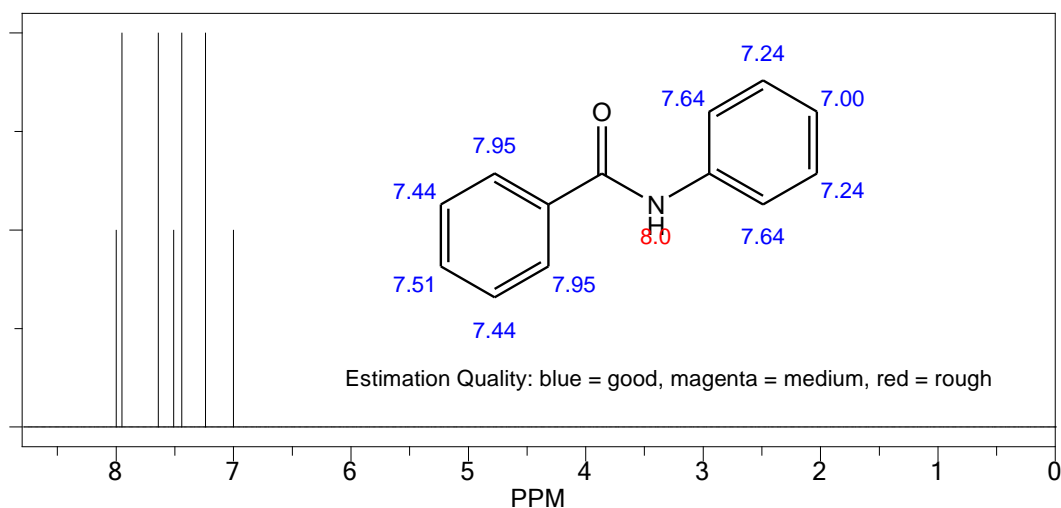


Рис. 1. Характеристичні сигнали у ПМР спектрі *N*-фенілбензаміду

Розташування сигналів цілком узгоджується із загальноприйнятими уявленнями про локалізацію ароматичних фрагментів в області 7-8 ppm з відносною інтенсивністю чотирьох сигналів, що відповідають *орто*- та *мета*-положенням Гідрогенів, яка є вдвічі більшою за інтенсивність інших спектральних ліній, що відповідають нееквівалентним *пара*-положенням бензенових кілець та протону амідної групи із розташуванням останнього у найбільш слабкому полі. Слід зазначити, що така інтерпретація є доволі спрощеною з тієї точки зору, що зовсім не враховує особливостей тонкого розщеплення сигналів ароматичних фрагментів, які в експериментальних спектрах ЯМР зазвичай представлені в якості нероздільних мультиплетів.

Продовженням нашого дослідження стало детальне вивчення базових спектральних характеристик обраної модельної системи за допомогою неемпірич-

но узагальненого градієнтного наближення PBE1PBE/6-311++G(d,p). При цьому в якості внутрішнього стандарту було обрано традиційні сполуки, а саме тетраметилсилан (ТМС) та гексаметилдисилоксан (ГМДС), що містять цілком еквівалентні з точки зору магнітного екранування протони. Аналіз одержаних за методом GIAO тензорів магнітного екранування ядер ^1H цих сполук показав майже абсолютне їх співпадіння, що було покладене в основу подальшого визначення положення окремих сигналів в спектрах *N*-феніл-бензаміду (табл. 1). Розрахунки здійснювали як для газової фази, так й за умов впливу середовища, зокрема диметилсульфоксиду (ДМСО), який поряд із розчинниками амідного типу (диметилацетамідом, *N*-метилпіролідом, тетраметилсечовиною) виявився найкращим за своєю здатністю до сольватації [2].

Таблиця 1. Хімічні зсуви δ [ppm] у спектрах ЯМР ^1H *N*-фенілбензаміду

№ з/п	PBE1PBE/6-311++G(d,p)		ChemNMR Pro	Інтерпретація
	<i>in vacuo</i>	ДМСО		
1	6,89	7,56	7,64	1-benzene 1 -NC(=O)
2	7,49	7,92	7,24	1-benzene 1 -NC(=O)
3	7,27	7,63	7,00	1-benzene 1 -NC(=O)
4	7,70	7,98	7,24	1-benzene 1 -NC(=O)
5	9,55	9,41	7,64	1-benzene 1 -NC(=O)
6	7,42	8,28	8,00	sec. amide
7	8,66	8,68	7,95	1-benzene 1 -C(=O)N
8	7,87	8,21	7,44	1-benzene 1 -C(=O)N
9	7,72	8,16	7,51	1-benzene 1 -C(=O)N
10	7,62	8,07	7,44	1-benzene 1 -C(=O)N
11	7,81	8,36	7,95	1-benzene 1 -C(=O)N

Наведені вище набори хімічних зсувів, одержані для газової фази та середовища ДМСО у наближенні *CPCM-PBE1PBE/6-311++G(d,p)//PBE1PBE/6-311++G(d,p)*, задовільно корелюють між собою, що вказує на адекватне відтворення спектральних характеристик модельної сполуки *N*-фенілбензаміду у межах обраного розрахункового наближення:

$$\delta[\text{ДМСО}] = (2,92 \pm 0,54) + (0,68 \pm 0,07) \cdot \delta[\textit{in vacuo}]; r = 0,956; S_0 = 0,16; n = 11.$$

Найбільшу зацікавленість викликає також безпосереднє співставлення результатів квантово-хімічних розрахунків із параметрами спектрів, одержаних експериментальним шляхом, а саме ¹H ЯМР (400 МГц, d⁶-ДМСО):

$$\delta[\text{ppm}] = \underline{10,26 (s, 1H)}, \underline{8,04-7,88 (m, 2H)}, \underline{7,79 (m, 2H)}, \\ \underline{7,65-7,47 (m, 3H)}, \underline{7,41-7,28 (m, 2H)}, \underline{7,19-7,02 (m, 1H)}.$$

Порівняльний аналіз характеристичних сигналів за їх положенням, інтенсивністю та мультиплетністю свідчить, перш за все, про несуттєве розходження абсолютних значень хімічних зсувів, окрім випадку протону амідної групи, переважно за рахунок впливу сольватаційних ефектів середовища, які за попередніми оцінками становлять не менше 52,5 кДж/моль.

Як свідчать результати проведених нами раніше структурних досліджень фенілону за допомогою ІЧ-спектроскопії, вагомий внесок у загальну стабілізацію систем такого типу можуть становити також численні міжмолекулярні взаємодії, в тому числі й міцні водневі зв'язки [3]. При цьому спектроскопія ЯМР суттєвим чином доповнює інші спектральні методи дослідження індивідуальних полімерів та композитів на їх основі.

Література:

1. Воловенко Ю. М., Туров О. В. Ядерний магнітний резонанс : підруч. для студ. вищ. навч. закл. Київ-Ірпінь: Перун, 2007. 475 с.
2. Спосіб одержання розчинів ароматичних поліамідів : пат. 76293 Україна. № 20040706261 ; заявл. 27.07.2004 ; опубл. 17.07.2006, Бюл. № 7.
3. Tokar A., Chigvintseva O. (2021). The quantum-chemical and spectral criteria for hydrogen bonding efficiency in structural analysis of aramides. *Chem. Chem. Technol.*, 15(1), 9-15. <https://doi.org/10.23939/chcht15.01.009>

З М І С Т

Секція 1. Полімерне матеріалознавство.

Хімія та технологія композиційних наноматеріалів 4

Місюра А.І., Мамуня Є.П., Пилипенко А.М.

Особливості структури та електропровідності
металонаповненого полімерного композиту 5

Трофименко В.В., Трофименко А.В.

Вплив пластичної деформації на форму пористих литих металів 9

Дутка В.С., Ковальський Я.П., Хамар О.О., Галечко Г.М.

Одержання та фізико-хімічні властивості
полімер-полімерних композитів 12

Мустяца О.Н., Шуляк О.І., Пархоменко Н.Г.

Механо-хімічне отримання нанокompозитів на основі
поліетилену і домішок неорганічних сполук 15

Віслогузова Т.В., Рожнова Р.А., Наражайко Л.Ф.

Біосумісні анібактеріальні плівкові матеріали, наповнені
срібловмісними кремнеземними нанокompозитами 19

Козак Н.В., Шанталій Т.А.

Динамічні характеристики та проникність поліімідних
нанокompозитів при фізичному старінні 21

Зінченко О.В., Єжова В.Д., Толстов О.Л.

Синтез та властивості фотохімічно активних гідрофільних
полімерних композитів, що містять нанокристалічний
TiO₂ для очищення стічних вод від органічних забруднювачів 24

Юшкевич С.В., Корнієнко О.А., Биков О.І., Барщевська Г.К.

Фазові рівноваги в системі La₂O₃–Dy₂O₃ 27

**Примушко С.О., Козлова Г.А., Гладирь І.І., Рожнова Р.А.,
Галатенко Н.А.**

Синтез та властивості нових поліуретансечовин медичного
призначення, які містять як подовжувачі діаміни
з атомами кисню в ланцюзі 29

<i>Денисенко В.Д., Галатенко Н.А., Рожнова Р.А., Нечаєва Л.Ю.</i>	
Поліуретанові композиції з дакарбазином медичного призначення на основі пінополіуретансечовин	33
<i>Самойленко Т.Ф., Яценко Л.М., Ярова Н.В., Бровко О.О.</i>	
Механічні властивості полімерних епоксиретанових композиційних матеріалів, наповнених мерсеризованою конопляною кострицею	37
<i>Кулєш Д.В., Галатенко Н.А., Гриценко В.П.</i>	
Біологічне оцінювання композиційного матеріалу на основі сітчастого поліуретану з дакарбазином в експерименті	41
<i>Будішевська Ольга, Юринець Ірина</i>	
Катіонний крохмаль як флокулянт для осадження бичачого сироваткового альбуміну	45
<i>Снігур М., Бережницька О.С., Чигиринець О.Е.</i>	
Зелений синтез наночастинок срібла	47
<i>Slisenko Olga, Bei Iryna, Budzinska Vira</i>	
Dual network polymer composites based on acrylic acid and 2-aminoethyl-3-aminopropyltrimetoxysilane for agriculture applications	51
<i>Grytsenko O.M., Dulebova L., Baran N.M., Berezhnyy B.V.</i>	
Structure formation peculiarities of nickel-filled polyvinylpyrrolidone copolymers	53
<i>Kucherenko A., Dovha Y., Dulebova L., Moravskiy V.</i>	
Analysis of damage of metal shell on polymer granules	55
<i>Nosova A.N., Belyanovskaya E.A., Yeromin O.O., Prokopenko O.M., Sukhyu K.M., Hryhorenko T.</i>	
The effect of heating in air and hot water on the dynamic mechanical properties of epoxy-thiocol polymers	57
<i>Чигвінцева О.П., Бойко Ю.В., Рула І.В.</i>	
Органопластики антифрикційного призначення на основі фенілону С-П	61

Кабат О.С., Пікула І.І., Сула М.П. Фторполімери для вузлів тертя машин і механізмів	65
Деркач О.Д., Михайліченко Є.М., Науменко М.М., Макаренко Д.О., Муранов Є.С. Підвищення надійності сільськогосподарських автономних платформ (агророботів) застосуванням полімерних композитів	67
Макаренко Д.О., Деркач О.Д., Муранов Є.С., Крутоус Д.І., Яшнова А.В. Вплив графіту на властивості вторинного поліетилену	71
Фролова Л.А., Баиштанік П.І., Шунькін І.С., Сухий М.К. Вплив природи катіона на властивості композиційних матеріалів ПВС/бентоніт/ПШГ	74
Баиштанік П.І., Кабак А.І., Лесич А.В. Термопластичні базальтопластики з покращеними механічними властивостями	75
Сухий К.М., Сергієнко Я.О., Беляновська О.А. Фізико-хімічні властивості органомодифікованого монтморилоніту	77
Токар А.В., Бабенко В.О., Чигвінцева О.П. ЯМР спектральні дослідження внутрішньомолекулярних взаємодій у системах на основі фенілону	79
Мартинюк Г.В., Аксіментьєва О.І., Яцков М.В., Поліщук Н.В. Перколяційні ефекти в полімер-полімерних композитах	83
Дейнека К.Ю. Фактори технологічної та енергетичної ефективності автоколивного процесу подрібнення у барабанному млині	86
Савельєв Ю., Марковська Л., Пархоменко Н., Савельєва О., Робота Л. Мультифункціональні поліуретанові матеріали для захисту від дії агресивних факторів оточуючого середовища та техногенних факторів	90

Наукове видання

**МАТЕРІАЛИ
І МІЖНАРОДНОЇ НАУКОВОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ**

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

TASX 2022

*присвячена 100-річчю Дніпровського державного
аграрно-економічного університету*

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

Підписано до друку 16.05.2022 р.

Формат 60 × 80/16. Папір офс.

Ум. друк. арк. 16,85. Ум. вид. арк. 11.75. Тираж 100 прим. Зам. № 6578

Видавець “ФОП Середняк Т.К.”, 49000, Дніпро, 18, а/с 1212

Ідентифікатор видавця у системі ISBN: 7373

49000, Дніпро, 18, а/с 1212

Тел. (096) 308-00-38, (056) 798-04-00

E-mail: 7980400@gmail.com www.isbn.com.ua

Віддруковано на базі поліграфічно-видавничого центру «Адверта»

49000, м. Дніпро, Короленко 3/308

тел.(066) 55-312-55, (056) 798-22-47 E-mail: 7980400@gmail.com

www.adverta.com.ua

www.vk.com/izdatelstvo_adverta

www.facebook.com/adverta.Izdatelstvo