

**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»**

25 травня 2023 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» (25 травня 2023 р.). – Ужгород: вид. «Говерла», 2023. – 66 с.

***Рекомендовано до друку Вченою радою
Навчально-наукового інституту хімії та екології
ДВНЗ «Ужгородський національний університет»,
протокол №8 від 30 травня 2023 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 25 травня 2023 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»
25 травня 2023 року, м. Ужгород, вул. О. Фединця, 53/1

Секція неорганічної хімії

Керівник секції – професор Ігор БАРЧІЙ
Секретар секції – студ. 4 к. Марія ЛАПКО

1. **Лазур Н.Р.** Порівняння навчальних досягнень учнів при вивченні хімії у школах міста та села.
Наукові керівники: доц. Погодін А.І., доц. Стерчо І.П.
2. **Леонова С.В., Цірик Л.П.** Порівняння результатів підсумкової оцінки з хімії у школі та успіхів у навчанні студентів і курсу хімічних спеціальностей ННІХЕ
Наукові керівники: доц. Кохан О.П., доц. Стерчо І.П.
3. **Лапко М.І.** Властивості сполук Rb_2TeBr_6 та Rb_2TeI_6 .
Наукові керівники: доц. Зубака О.В., проф. Барчій І.Є., доц. Погодін А.І.
4. **Стерчо О.О.** *Ab initio* розрахунки електронної структури бінарного селеніду Sb_2Se_3 .
Наукові керівники: проф. Барчій І.Є., доц. Сабов М.Ю., доц. Погодін А.І.

Секція аналітичної хімії

Керівник секції – доцент Ярослав СТУДЕНЯК

Секретар секції – студ. 2 курсу ОС Магістр Тетяна ЧОНТОШ

1. **Дутчук М.Л.** «Зелені» розчинники в аналітичній хімії.
Науковий керівник: проф. Базель Я.Р.
2. **Пінчук Л.Р.** Фібрилярні агрегати барвників з аніонними поверхнево-активними речовинами.
Науковий керівник: доц. Студеняк Я.І.
3. **Ісайович В.А.** Використання штучного інтелекту на уроках хімії.
Науковий керівник: доц. Студеняк Я.І.
4. **Федорко В.В.** Оптичні методи визначення алюмінію.
Науковий керівник: доц. Сухарева О.Ю.
5. **Хмелевська О.В.** Розробка потенціометричної методики визначення бору у ґрунтах.
Науковий керівник: доц. Фершал М.В.
6. **Чонтош Т.О.** Дослідження спектрофотометричних та протолітичних властивостей 8-гідроксихінолін-азо-фенілборонату.
Науковий керівник: доц. Фершал М.В.
7. **Магада Є.** Хелатні комплекси як активні речовини потенціометричних сенсорів.
Науковий керівник: доц. Фершал М.В.
8. **Капшин С.О.** Спектрофотометричне визначення додецилбензен сульфонату натрію з використання нового барвника.
Науковий керівник: доц. Русин В.М.

Секція органічної хімії

Керівник секції – професор Михайло ОНИСЬКО

Секретар секції – студ. 4 курсу Ольга ГАЛЕГА

1. **Галега О.В.** Синтез та електрофільна циклізація 2-алкеніл(алкініл)тіобензотіазола.
Наукові керівники: Повідайчик М.В., Онисько М.Ю.
2. **Куля Д.Ю.** Електрофільна гетероциклізація 2-алілтіо-3-алілхіназолін-4-ону.
Наукові керівники: Кут Д.Ж., Кут М.М., Онисько М.Ю., Лендел В.Г.
3. **Криворучко А.Р.** Електрофільна гетероциклізація 2-алкенілтіо-3-етилхіназолін-4-ону.
Наукові керівники: Кут Д.Ж., Кут М.М., Онисько М.Ю., Лендел В.Г.
4. **Бестріцька В.О., Алексик Г.В.** Дослідження електрофільної гетероциклізації довголанцюгових 4-алкеніл-1,2,4-триазол-3-тіонів.
Наукові керівники: Король Н.І., Фізер М.М., Сливка М.В.
5. **Лабатій Т.В., Брилинський Р.С.** Елементи СТЕМ-освіти при навчанні дітей з особливими потребами.
Наукові керівники: Король Н.І., Сливка М.В.
6. **Мучичка Я.Ю., Млинецька Т.В.** Формування дослідницьких умінь учнів в процесі навчання хімії.
Науковий керівник: Кривов'яз А.О.

Секція фізичної та колоїдної хімії

Керівник секції – доцент Неля ГОЛУБ

Секретар секції – студ. 1 курсу ОС Магістр Ярослава ГЕРНЕШІЙ

1. **Грицан В.В.** Сучасні тенденції стану та перспектив видобутку й промислової переробки природного газу в світі та Україні.
Науковий керівник: доц. Голуб Н.П.
2. **Савко В.М.** Сучасні методи синтезу фосфатних каталізаторів.
Науковий керівник: доц. Голуб Н.П.
3. **Сірко А.М., Ловас С.В.** Деякі фізико-хімічні властивості каталізатора $\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2$.
Науковий керівник: доц. Козьма А.А.
4. **Кирица Д.В.** Методи одержання алюмосилікатних каталізаторів.
Науковий керівник: доц. Голуб Н.П.
5. **Дужар М.Ю.** Перетворення компонентів природного газу на гетерогенних каталізаторах.
Науковий керівник: доц. Козьма А.А.
6. **Куцина І.В.** Сучасні шляхи синтезу етилену як цінного продукту хімічної промисловості.
Науковий керівник: доц. Голуб Н.П.
7. **Магада О.В.** Вивчення фізико-хімічних властивостей ферум(III)фосфатного каталізатора.
Науковий керівник: доц. Козьма А.А.
8. **Михальчук Г.М.** Одержання та дослідження фізико-хімічних властивостей цинкфосфатного каталізатора.
Науковий керівник: доц. Голуб Н.П.
9. **Гернешій Я.М.** Синтез та дослідження фізико-хімічних властивостей складного кислотного каталізатора $50\%\text{Cu}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 50\%\text{AlPO}_4$.
Науковий керівник: доц. Козьма А.А.

Секція екології та охорони навколишнього середовища

Керівник секції – професор Сергій СУХАРЕВ

Секретар секції – студ. 4 курсу Людмила ГАРАПКО

1. **Гаранко Л.І.** Особливості забезпечення стійкості аграрного сектору економіки України в умовах війни.
Науковий керівник: проф. Сухарев С.М.
2. **Широкова С.О.** Аналіз норм екологічного законодавства ЄС як спосіб формування екологічної законодавчої системи України.
Науковий керівник: проф. Сухарев С.М.
3. **Сейковські Д.Й.** Екологічні аспекти та перспективи використання міського електротранспорту у м. Ужгороді.
Науковий керівник: доц. Глух О.С.
4. **Гамаль К.С.** Біоіндикація стану природних вод у системі їх моніторингу.
Науковий керівник: проф. Сухарев С.М.
5. **Дорошенко А.Ю.** Моніторинг наслідків бойових дій Російської федерації на навколишнє середовище України.
Науковий керівник: доц. Галла-Бобик С.В.
6. **Кондрич К.А.** Екологічні проблеми полонин Закарпаття.
Науковий керівник: доц. Роман Л.Ю.
7. **Піпаш В.В.** Використання даних проекту Landsat для моніторингу лісових пожеж.
Науковий керівник: доц. Глух О.С.
8. **Заяць Я.Р.** Моніторинг екологічного стану підземних водних тіл Закарпатської області.
Науковий керівник: доц. Трапезнікова Л.В.
9. **Гаврилюк І.В.** Якість питної бутильованої води.
Науковий керівник: доц. Галла-Бобик С.В.
10. **Михалко Л.С.** Моніторинг якості води річки Стрий.
Науковий керівник: доц. Роман Л.Ю.
11. **Чегіль С.В.** Моніторинг метеорологічних величин і кліматична класифікація світу.
Науковий керівник: доц. Трапезнікова Л.В.
12. **Барчій О.І.** Вивчення електронної структури екологічно чистого термоелектричного матеріалу на основі аргентум (I) селеніду. Співавтори: Стерчо О.О., с.н.с. Погодін А.І., проф. Барчій І.Є.
Науковий керівник: проф. Чундак С.Ю.

ПОРІВНЯННЯ НАВЧАЛЬНИХ ДОСЯГНЕНЬ УЧНІВ ПРИ ВИВЧЕННІ ХІМІЇ У ШКОЛАХ МІСТА ТА СЕЛА

Лазур Н.Р., Погодін А.І., Стерчо І.П.
Кафедра неорганічної хімії
e-mail: lazur.nataliya@student.uzhnu.edu.ua

Контроль, перевірка й оцінка – невід’ємні складники освітнього процесу, без яких неможливо уявити взаємодію між учнем і вчителем. 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 навчальних досягнень 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 школярів 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 (з огляду на безпеку учні виїхали на навчання за кордон, в школі немає достатньо місця у сховищі для всіх учнів під час повітряної тривоги і т.д.). В такому випадку навчальний заклад змушений змішано або повністю переходити на онлайн-навчання за допомогою дистанційних технологій. При керуванні вибору моделі дистанційних технологій [4]. Тому було цікаво порівняти навчальні досягнення учнів у сільській і міській школах, оскільки не завжди рівний доступ до всіх освітніх технологій може впливати на дані показники.

Експериментальні дослідження проводились в Ужгородському ЗЗСО І-ІІІ ступенів №6 імені В.С. Гренджі-Донського та Білківському ЗЗСО І-ІІІ ст. Хустського району згідно календарно-тематичного планування для 10 класів, що відповідає «Програмі для загальноосвітніх навчальних закладів. Хімія 10-11 класи (рівень стандарту)» (Програма затверджена Наказом Міністерства освіти і науки України від 23.10.2017 № 1407) [5]. Дана навчальна програма реалізована з використанням підручників «Хімія 10» авторів О.Г. Ярошенко та Попель П.П., Крикля Л.С. (м. Ужгород) та автора Григорович О.В. (с. Білки) [6,7]. Щоб порівняти навчальні досягнення учнів у школах сільського та міського типів, в обидвох школах (м. Ужгород та с. Білки) було вибрано паралелі 10-х класів та їх результати навчання з органічної хімії за I семестр 2022-2023 н.р.

Нами були розраховані такі моніторингові характеристики знань учнів як середній бал, коефіцієнт якості знань і ступінь навченості учнів. 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.

Таблиця 1. Коефіцієнт результативності, коефіцієнт якості та ступінь навченості учнів 10-х класів

	10 клас Білківський ЗЗСО І-ІІІ ст. №2	10-А Ужгородський ЗЗСО І-ІІІ ст. №6	10-Б Ужгородський ЗЗСО І-ІІІ ст. №6
Коефіцієнт якості, %	45	81	78
Ступінь навченості учнів, %	49	72	62
Середній бал	6.3	8.4	7.9

Якщо проаналізувати одержані результати, то бачимо, що в школі м. Ужгорода коефіцієнт якості знань (учні, які вчаться на «достатній» і «високий» рівень) в обидвох класах знаходиться в межах 75-85%, що відповідає дуже хорошому рівню підготовки учнів. Ці дані узгоджуються із ступенем навченості учнів (10-А і 10-Б класи м.Ужгород), який знаходиться на «високому» рівні. Відсоток відмінників у цих класах складає 38% і 13% відповідно. Що стосується 10-А класу в Білківському ЗЗСО І-ІІІ ст. (таблиця 1), показники якості знань та ступеня навченості учнів майже в півтори рази менше, і це пояснюється великим відсотком учнів, які вчаться на оцінки «низького» та «середнього рівня», хоча відсоток відмінників тут складає 14%. Щодо середнього балу успішності учнів у цих школах, бачимо, що в сільській школі він знаходиться на рівні «середній», а в міській – на «достатньому», що теж узгоджується з вище описаними характеристиками. Причиною такого низького рівня знань у сільській школі може бути менша доступність до сучасних інтерактивних методів навчання, що погіршує комунікацію між вчителем і учнями в умовах змішаного навчання. А це в свою чергу призводить до нижчого рівня засвоєння навчального матеріалу та узагальнення попереднього.

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) 10-11 класи* (затверджена наказом МОН від 23.10.2017 № 1407). Київ: *Перун*, 2017. [Електронний ресурс]. Режим доступу: <https://goo.gl/fwh2BR>.
6. Попель П., Криля Л. Хімія (рівень стандарту): підручник для 10 класів закладів загальної середньої освіти. Київ: *ВЦ «Академія»*, 2018. С. 256.
7. Григорович О.В. Хімія (рівень стандарту): підручник для 10 класів закладів загальної середньої освіти. Харків: *ВЦ «Ранок»*, 2018. С. 240.

ПОРІВНЯННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ ПІДСУМКОВОЇ ОЦІНКИ З ХІМІЇ У ШКОЛІ ТА УСПІХІВ У НАВЧАННІ СТУДЕНТІВ І КУРСУ ХІМІЧНИХ СПЕЦІАЛЬНОСТЕЙ ННІХЕ

Леонова С.В., Цірик Л.П., Кохан О.П., Стерчо І.П.

Кафедра неорганічної хімії

e-mail: leonova.svitlana@student.uzhnu.edu.ua

Однією з важливих складових системи забезпечення якості освіти є моніторинг та забезпечення належного рівня підготовки студентів [1]. Якість підготовки студентів університету залежить від декількох факторів. Це, перш за все, якість загальної середньої освіти у державі та регіоні, а також конкурс на конкретну спеціальність в університеті, який дозволяє відібрати кращих абітурієнтів.

Вдалий вибір професії – одна з головних складових і умов становлення особистості, усвідомлення своєї значимості в соціумі. Тому актуальним є питання цілеспрямованого впливу на процес професійного самовизначення старшокласників. Існують різні підходи до тлумачення поняття «професійне самовизначення» [2]. Проте спільною залишається думка, що це процес вибору із врахуванням особистісних можливостей суб'єкта і вимог професії, яка обирається.

Підготовка бакалавра хімічного профілю у закладах вищої освіти III-IV рівнів акредитації передбачає опанування ним циклу природничих дисциплін даного фахового спрямування, а саме: «Неорганічна хімія», «Органічна хімія», «Аналітична хімія», «Фізична хімія» та «Колоїдна хімія». Метою їх вивчення є засвоєння студентами базових хімічних знань, необхідних під час розв'язування задач у професійній діяльності; вироблення навичок вирішення прикладних задач хімічного профілю, формування логічного мислення. Фундаментом для вивчення цих дисциплін, безумовно, є базові знання з хімії, тобто ті знання, що були отримані теперішніми студентами під час навчання у середніх загальноосвітніх школах I-III ступенів.

У зв'язку з війною, абітурієнти 2022 року вступу не мали можливості скласти ЗНО з профільного предмету, оскільки Порядком прийому 2022 [3] було передбачено три складові даного тесту: українська мова, математика та історія України. Отже, абітурієнти не мали можливості показати свої знання саме з хімії при вступі. Тим не менше, хімія є необхідною для навчання при виборі хімічних професій. Інтерес до вивчення хімії, первинні знання в цій галузі, науковий світогляд, на якому в подальшому ґрунтується майбутній вибір фаху та професіоналізм, закладаються у середній школі. А оцінкою результативності цього процесу можна вважати результати підсумкової оцінки у свідоцтві про повну загальну середню освіту.

Тому цікаво було проаналізувати, які оцінки з хімії в документі про освіту мають абітурієнти, що вступали на хімічні спеціальності ННІХЕ. Для порівняльного аналізу результати підсумкових оцінок з хімії було переведено з 12-бальної шкали у 100-бальну, щоб була відповідність шкалі ЄКТС, згідно якої оцінюються поточний та підсумковий контроль навчання у закладі вищої освіти (таблиці 1-2).

Абітурієнти, що вступали на спеціальність «Хімія», показали дуже хороші знання з цього предмету, які вони здобули навчаючись у закладі середньої освіти. Як бачимо, 71% з них мають оцінку з хімії в межах 85-100 балів, що відповідає дуже хорошему рівню підготовки з цього предмету у школі, 29% – мають 75-80 балів, що також є непоганим показником рівня знань (таблиця 1). Майже подібна картина спостерігається і у студентів, що навчаються на спеціальності «Середня освіта. Хімія» (таблиця 2), тобто 83% з них показують у загальному високий рівень знань хімії за програмним матеріалом, але 1 студент (номер 3) має задовільний рівень знань, його оцінка складає 60 балів за шкалою ЄКТС. Так як при виведенні підсумкової оцінки з хімії у школі програмний матеріал в основному розподілено на чотири тематичні блоки – «Загальна хімія», «Неорганічна хімія», «Органічна

хімія» та «Обчислення в хімії», нам було цікаво порівняти ці результати з результатами навчання студентів хімічних спеціальностей першого курсу Навчально-наукового інституту хімії та екології у першому семестрі саме з дисципліни «Неорганічна хімія» (таблиці 1-2).

Таблиця 1. Результати з хімії у школі, бал підсумкового контролю з дисципліни «Неорганічна хімія» у першому семестрі для спеціальності «Хімія»

Рейтинг абітурієнта при вступі / Номер студента у списку	Хімія (свідоцтво про ПЗСО) із 100 б.	Неорганічна хімія із 100 б.
1/(3)	90	86
2/(4)	100	88
3/(5)	100	83
4/(2)	90	71
5/(1)	85	65
6/(7)	80	62
7/(6)	75	60

Таблиця 2. Результати з хімії у школі, бал підсумкового контролю з дисципліни «Неорганічна хімія» у першому семестрі для спеціальності «Середня освіта. Хімія»

Рейтинг абітурієнта при вступі / Номер студента у списку	Хімія (свідоцтво про ПЗСО) із 100 б	Неорганічна хімія із 100 б
1/(1)	95	77
2/(4)	95	86
3/(5)	85	75
4/(6)	90	66
5/(3)	60	60
6/(2)	95	60

Бачимо, що студенти обидвох спеціальностей суттєво понизили свій рівень знань з хімії з оцінки «відмінно» та «добре» на «задовільно», особливо це стосується студентів під номером 2, 1, 7, 6 (для спеціальності «Хімія»), що складає 57% і студентів під номером 6 і 2 – 33% (для спеціальності «Середня освіта. Хімія»). Якщо порівнювати загальний середній бал з хімії у школі та навчальної дисципліни у ЗВО для всіх студентів, можна відмітити, що він складає 95 балів (хімія в школі) і 72 бали («Неорганічна хімія»), що теж від «високого» рівня знань прямує практично до «задовільного». Причина цього може полягати в тому, що для успішного навчання у ЗВО важливим стає не стільки стартовий рівень знань, скільки здатність студента вчитись та ефективно працювати з навчальними матеріалами в нових умовах. Важливу роль відіграє і самоконтроль студента, що вирізняє навчальний процес у школі та у закладі вищої освіти. Суттєвим є також психологічний вплив фактору війни на пізнавальні можливості студентів першого курсу, що ускладнило їх адаптацію до нових умов навчання в університеті.

Література

1. Закон України «Про вищу освіту». Від 01.07.2014. № 1556-VII. [Електронний ресурс]. Режим доступу: <http://vnz.org.ua/zakonodavstvo/111-zakon-ukrayiny-pro-vyschu-osvitu>.
2. Закатнов Д.О. Технології підготовки учнівської молоді до професійного самовизначення: монографія. Київ: Педагогічна думка, 2012. С.160.
3. Порядок прийому на навчання для здобуття вищої освіти в 2022 році. [Електронний ресурс]. Режим доступу: <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/z0487-22#Text>.

ВЛАСТИВОСТІ СПОЛУК Rb_2TeBr_6 ТА Rb_2TeI_6

Лапко М.І., Зубака О.В., Барчій І.Є., Погодін А.І.

Кафедра неорганічної хімії
e-mail: lapko.mariya@student.uzhnu.edu.ua

Складні галогенхалькогенідні сполуки знайшли широке використання в якості робочих елементів у різних пристроях оптоелектроніки як ефективні акусто-, нелінійно- та електрооптичні матеріали. Гексабром- та гексайодтелурати лужних металів відносяться до цікавого з практичної та теоретичної точки зору класу сполук, комплексні аніони яких утворені атомами, що легко поляризуються.

У літературі є відомості про дослідження характеру фізико-хімічної взаємодії в системах RbX-TeX_4 , де X-Br, I [1,2]. Зокрема, встановлено, що у цих системах утворюються проміжкові фази складу Rb_2TeX_6 з конгруентним характером плавлення. На основі діаграм стану відповідних систем здійснено синтез гексабром- і гексайодтелуратів рубідію. Одержані сполуки ідентифікували методами диференційно-термічного (ДТА) і рентгенофазового (РФА) аналізів. За попередньо підібраними раціональними складами і розробленими технологічними умови вирощено монокристали вищезгаданих сполук. У процесі проведених досліджень встановлено, що близькими до оптимальних є наступні технологічні умови росту монокристалів: швидкість переміщення фронту кристалізації 0,3 – 0,5 мм/годину; градієнт температури в зоні кристалізації – 2-4 К/мм; відпал у зоні кристалізації при температурі 473 К протягом 3-х діб, охолодження до кімнатної температури із швидкістю не більше 30 град./годину.

Основні кристалохімічні параметри сполук Rb_2TeBr_6 та Rb_2TeI_6 представлено у таблиці 1, будову кристалічної ґратки на Рис.1.

Таблиця 1. Кристалохімічні характеристики сполук Rb_2TeBr_6 та Rb_2TeI_6

Сполука	Сингонія	Пр. гр.	Параметри кристалічної ґратки
Rb_2TeBr_6	кубічна	$Fm\bar{3}m$ (225)	$a=10.773$, $V=1250.29 \text{ \AA}^3$, $Z=4$
Rb_2TeI_6	тетрагональна	$P4/mnc$ (128)	$a=8.136$, $c=11.810 \text{ \AA}$, $V=781.76 \text{ \AA}^3$, $Z=2$

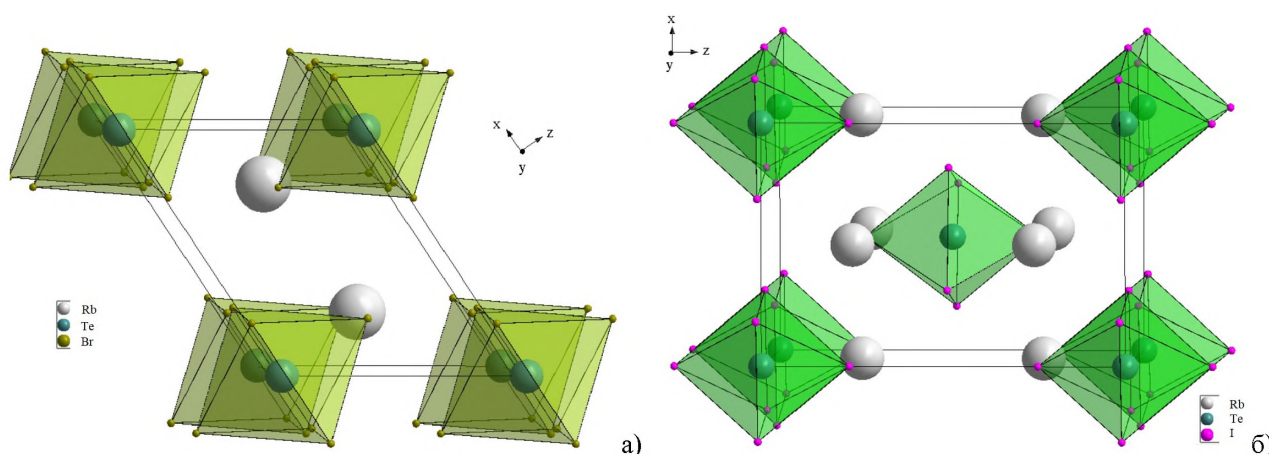


Рис.1. Будова кристалічної ґратки сполук Rb_2TeBr_6 (а) та Rb_2TeI_6 (б.)

Сполуки $\text{Rb}_2\text{TeBr}_6(\text{I}_6)$ кристалізуються у структурному типі K_2PtCl_6 . Координаційні октаедри $[\text{TeX}_6]$ розміщуються у вершинах і центрі великого куба, а між цими октаедрами розміщуються атоми лужного металу Rb. Співставлення експериментальних міжатомних відстаней Rb-Br(I) , Te-Br(I) з теоретично розрахованими вказує на те, що хімічний зв'язок у тернарних сполуках має змішаний (комбінований) характер – ковалентно-іонний із

перевагою іонної складової. Сполуки $\text{Rb}_2\text{TeBr}_6(\text{I}_6)$ можна розглядати як іонні сполуки, де у ролі катіону виступає іон Rb^+ , у ролі аніону – стабільні комплексні іон $[\text{TeX}_6]^{2-}$.

Проведено дериватографічний аналіз монокристалічних взірців. Аналіз дериватограм за початком втрати ваги показав, що загалом рубідію гексабромтелурат (кубічна сингонія) стійкіший до нагрівання на повітрі, ніж гексайодтелурат (тетрагональна сингонія).

Визначено густину, розраховано ентальпію і ентропію плавлення, ступінь та константу дисоціації при плавленні і оптичну ширину забороненої зони сполук $\text{Rb}_2\text{TeBr}_6(\text{I}_6)$, які представлено у таблиці 2.

Край оптичного пропускання знімали на монокристалічних зразках товщиною 2–3 мм. Аналіз краю оптичного пропускання дозволив провести розрахунки ширини забороненої зони. Величина пропускання досліджених зразків коливається в межах 50-64 %.

Порівняння ступеня дисоціації при плавленні гексабром- та гексайодтелуратів рубідію підтвердило, що ці сполуки мають досить високу стабільність при плавленні.

Таблиця 2. Фізико-хімічні і оптичні властивості кристалів $\text{Rb}_2\text{TeBr}_6(\text{I}_6)$

Сполука	$T_{\text{пл.}}$ К	d г/см ³	H МПа	$\Delta H_{\text{пл.}}$ КДж/моль	$\Delta S_{\text{пл.}}$ Дж/моль·К	$\alpha_{\text{дис}}$	$K_{\text{дис}}$	ΔE еВ
Rb_2TeBr_6	960	4,18	32	15	16	0,19	$1,78 \cdot 10^{-2}$	2,19
Rb_2TeI_6	764	4,57	18	29	38	0,24	$3,33 \cdot 10^{-2}$	1,43

За стандартними методиками на спеціально підготовлених зразках у вакуумованому до 0,133 Па кріостаті досліджено електрофізичні властивості. Для цього із монокристалічних буль виготовляли зразки у вигляді паралелепіпедів розмірами $1,5 \times 3 \times 5$ мм³. Попередньо взірці шліфували, полірували, знежирювали і просушували. Питомий опір кристалів вимірювали при кімнатній температурі (293 К) (таблиця 3).

Таблиця 2. Значення енергії активації та питомого опору для кристалів сполук $\text{Rb}_2\text{TeBr}_6(\text{I}_6)$

Сполука	ΔE_a , еВ	ρ , Ом·см (293 К)
Rb_2TeBr_6	0,27	$5 \cdot 10^{14}$
Rb_2TeI_6	0,57	$1 \cdot 10^{15}$

Встановлено, що абсолютні значення питомого опору досліджених кристалів знаходяться у межах 10^{14} - 10^{15} Ом·см.

Відмічено, що електропровідність із підвищенням температури лінійно збільшується, що засвідчує їх напівпровідниковий характер.

Література

1. E.Yu. Peresh, O.V. Zubaka, S.V. Kun, I.V. Galagovts, I.E. Barchii, M.Yu. Sabov, Stability Limits and Properties of Tl_2TeI_6 , Cs_2TeI_6 , and Rb_2TeI_6 . *Inorganic Materials*. 2001, 37 (8), 849-852.
2. E.Yu. Peresh, O.V. Zubaka, V.I. Sidei, I.E. Barchii, S.V. Kun, A.V. Kun, Preparation, Stability Regions, and Properties of M_2TeI_6 (M = Rb, Cs, Tl) Crystals. *Inorganic Materials*. 2002, 38 (8), 859-863.

AB INITIO РОЗРАХУНКИ ЕЛЕКТРОННОЇ СТРУКТУРИ БІНАРНОГО СЕЛЕНІДУ Sb_2Se_3

Стерчо О.О., Барчій І.Є., Сабов В.І., Погодін А.І.

Кафедра неорганічної хімії

e-mail: stercho.oleksandr@student.uzhmu.edu.ua

Складні халькогеніди продовжують привертати значну увагу науковців, головним чином завдяки різноманітному технологічному застосуванню функціональних матеріалів на їх основі. Зокрема, триселенід стибію Sb_2Se_3 використовують у напівпровідникових пристроях, таких як фотодіоди, фотокатоли для розщеплення води, гарячі електроди, гібридні органо-неорганічні сонячні елементи, натрій-іонні батареї та тонкоплівкові фотоелектричні пристрої. Sb_2Se_3 є одним із найбільш досліджених тонкоплівкових матеріалів для фотоелектричних застосувань. Завдяки прямій оптичній ширині забороненої зони 1.2 eV, сонячні батареї на основі Sb_2Se_3 можуть досягти теоретичної ефективності перетворення $\sim 10\%$.

У даній роботі представлені результати вивчення кристалохімічних характеристик та зонної структури стибію (III) селеніду.

Система Sb–Se характеризується утворенням однієї бінарної сполуки Sb_2Se_3 , яка плавиться конгруентно при 863 К. Евтектиці між чистим компонентом Sb та Sb_2Se_3 (евтектичний нонваріантний процес $L \leftrightarrow Sb + Sb_2Se_3$) відповідають координати: 50 ат.% Se, 811 К. В інтервалі концентрацій 23–50 ат.% Se спостерігається розшарування у твердій фазі (метатектичний процес відбувається при 853 К). Одержують шляхом сплавлення елементарних компонентів при температурі 863 К.

Sb_2Se_3 кристалізується в орторомбічній сингонії, просторовій групі $Pnma$ (62), параметри кристалічної ґратки $a=11.794(1) \text{ \AA}$, $b=3.986(1) \text{ \AA}$, $c=11.648(1) \text{ \AA}$, $Vol=547.58 \text{ \AA}^3$, $Z=4$, $\rho_{\text{рентг}} = 5,83 \text{ г/см}^3$ (Рис.1).

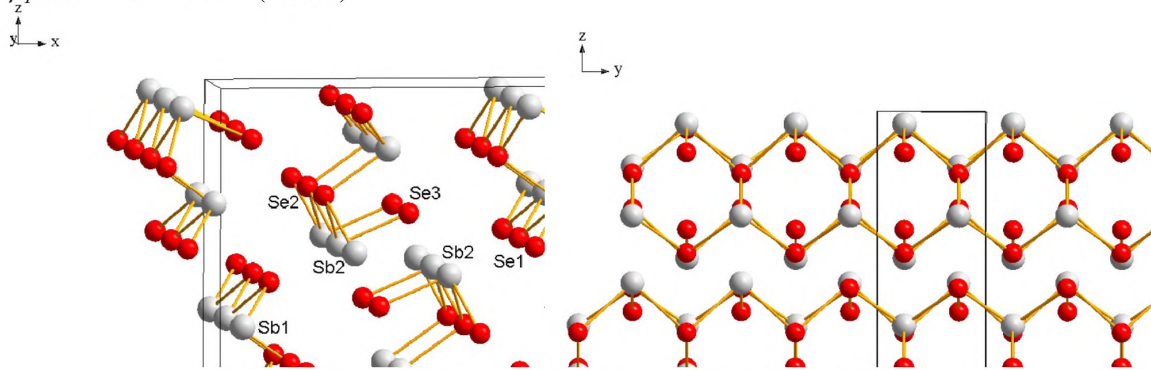


Рис.1. Будова кристалічної ґратки сполуки Sb_2Se_3

Структура є 2D-вимірною, слабо шаруватою і складається з двох шарів Sb_2Se_3 , орієнтованих у напрямку (0,1,0). Sb^{3+} знаходиться у двох нееквівалентних позиціях. У першій позиції Sb^{3+} зв'язується з шістьма атомами Sb^{3+} , утворюючи спотворені октаедри $SbSe_6$, які мають спільні кути з двома еквівалентними квадратними пірамідами $SbSe_5$, ребра з чотирма еквівалентними октаедрами $SbSe_6$ і ребра з трьома еквівалентними квадратними пірамідами $SbSe_5$. Довжина відстаней зв'язку Sb1–Se складає 2.663–3.247 Å (Рис.2). У другій позиції Sb^{3+} зв'язується з п'ятьма атомами Se^{2-} , утворюючи квадратні піраміди $SbSe_5$, які мають спільні кути з двома еквівалентними октаедрами $SbSe_6$, ребра з трьома еквівалентними октаедрами $SbSe_6$ і ребра з чотирма еквівалентними квадратними пірамідами $SbSe_5$. Спільні кути октаедра дорівнюють 6. Міжатомні відстані зв'язку Sb2–Se знаходяться в діапазоні від 2.589–3.007 Å. Селен знаходиться у трьох нееквівалентних позиціях. У першій та другій позиціях Se^{2-} зв'язаний у 3-координатній геометрії з трьома еквівалентними

атомами Sb^{3+} . У третій позиції Se^{2-} зв'язується з п'ятьма атомами Sb^{3+} , утворюючи викривлені квадратні піраміди SeSb_5 зі спільними краями (Рис.3). Міжатомні відстані становлять: 2.668–3.247 Å (Se1-Sb), 2.663–2.804 Å (Se2-Sb), 2.589–3.215 Å (Se3-Sb).

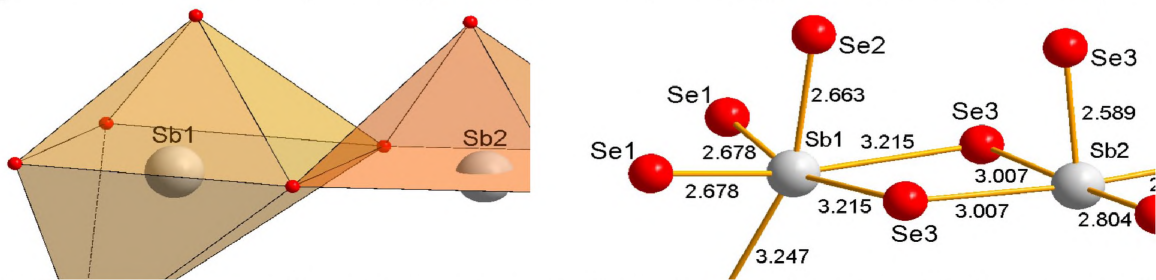


Рис.2. Перше координаційне оточення атомів Sb та міжatomні відстані Sb-Se у кристалічній ґратці сполуки Sb_2Se_3

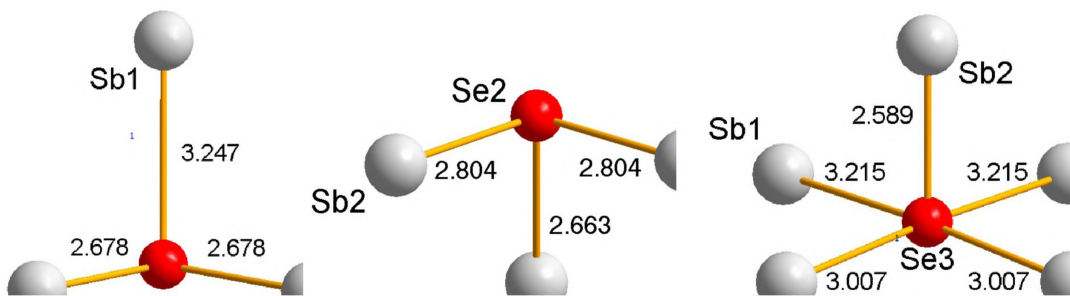


Рис.3. Перше координаційне оточення атомів Se та міжatomні відстані Se-Sb у кристалічній ґратці сполуки Sb_2Se_3

Ab initio квантово-хімічні розрахунки електронної структури стибій (III) селеніду здійснювали за допомогою програмного пакету Quantum Espresso, яка містить основні пакети для обчислень електронної структури в межах теорії функціоналу густини (DFT). Візуалізація за допомогою графічного інтерфейсу (GUI) програми Vurai 1.3.2. Геометричну оптимізацію структури здійснювали ітераційним методом самоузгодженого поля (SCF) на основі алгоритму Брюдена – Флетчера – Гольдфарба – Шанно (BFGS). Зонну структуру Sb_2Se_3 розраховували вздовж ліній, які зв'язують точки високої симетрії першої зони Брілюєна для кристалів орторомбічної сингонії $\Gamma-X-S-Y-\Gamma-Z-U-R-T-Z|Y-T|U-X|S-R$.

На основі теоретичних розрахунків зонної структури, загальної густини станів (DOS) (Рис.4-5) визначені криві розподілу енергії електронних станів у валентній зоні (ВЗ) та зоні провідності (ЗП) (Рис.6).

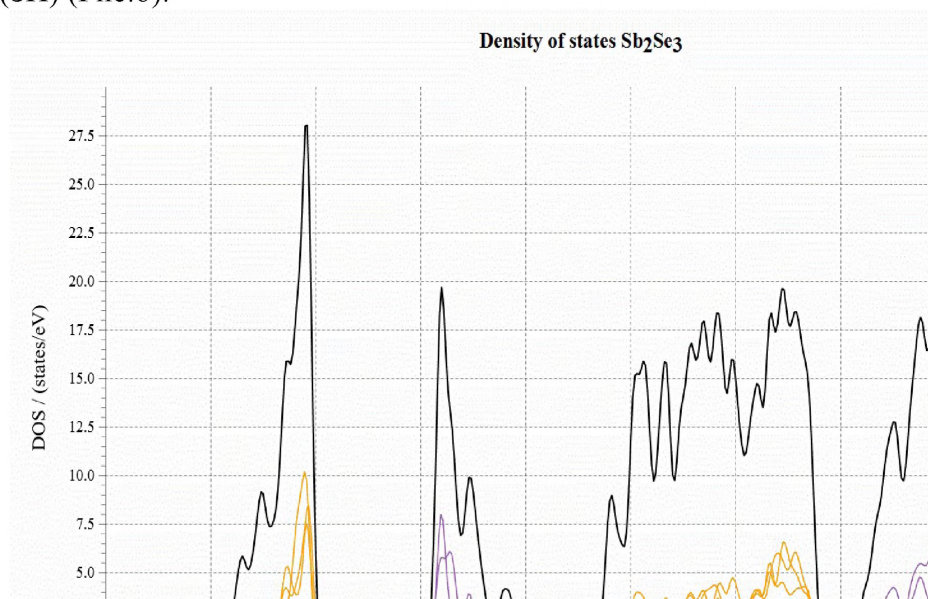


Рис.4. Загальна та парціальна густина станів (DOS) сполуки Sb_2Se_3 .

За результатами DFT розрахунків встановлено, що Sb_2Se_3 відноситься до прямозонних напівпровідників з шириною забороненої зони 0,87 eV, енергія кристалічної комірки $E_{total} = -409.3119 \text{ Ry}$ (-5568.9687 eV), енергія на один атом $E_{atom} = -20,4655 \text{ Ry}$ (-278.4471 eV), енергія Фермі $E_{Fermi} = 6.1182 \text{ eV}$, максимум валентної зони -0.46 eV, мінімум зони провідності 0.41 eV.

Дно валентної зони (ВЗ) формують Se 4s-рівні (-14.7 ÷ -12.5 eV). В області енергій -10.0 ÷ -7.5 eV розташовані Sb 5s-рівні. Високоенергетичні стани валентної зони -6.0 ÷ -0.46 eV формують Se 4p-рівні. Дно зони провідності (ЗП) (0.41 ÷ 5.0 eV) утворюють Sb 5p-рівні. Оптична ширина забороненої зони ($E_g = 0.87 \text{ eV}$) Sb_2Se_3 утворюється переходами електронів Se 4p → Sb 5p.

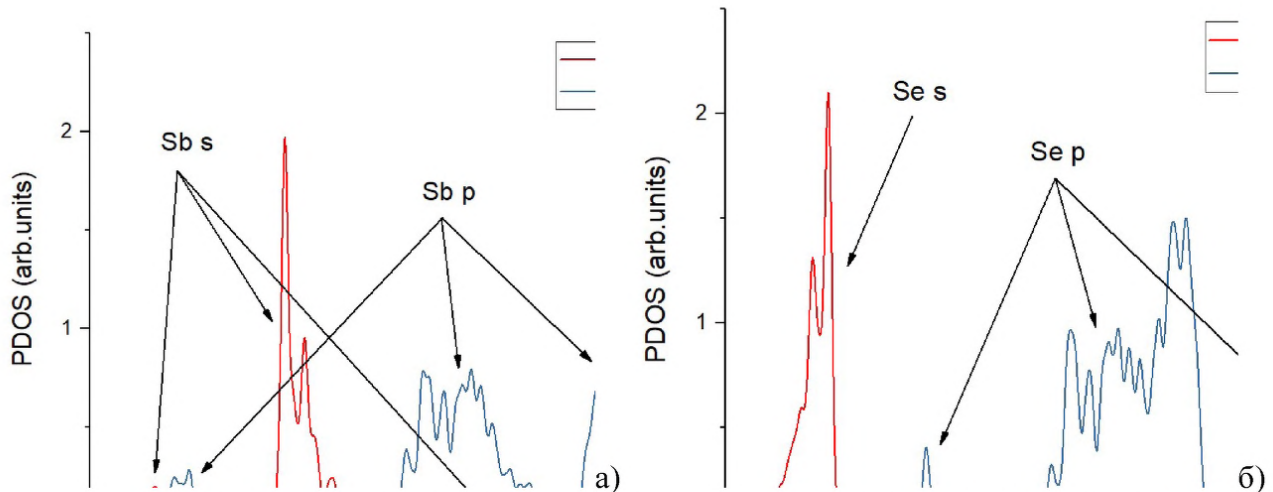


Рис.5. Парціальна густина станів (DOS) індивідуальних елементів: Sb (а), Se (б).

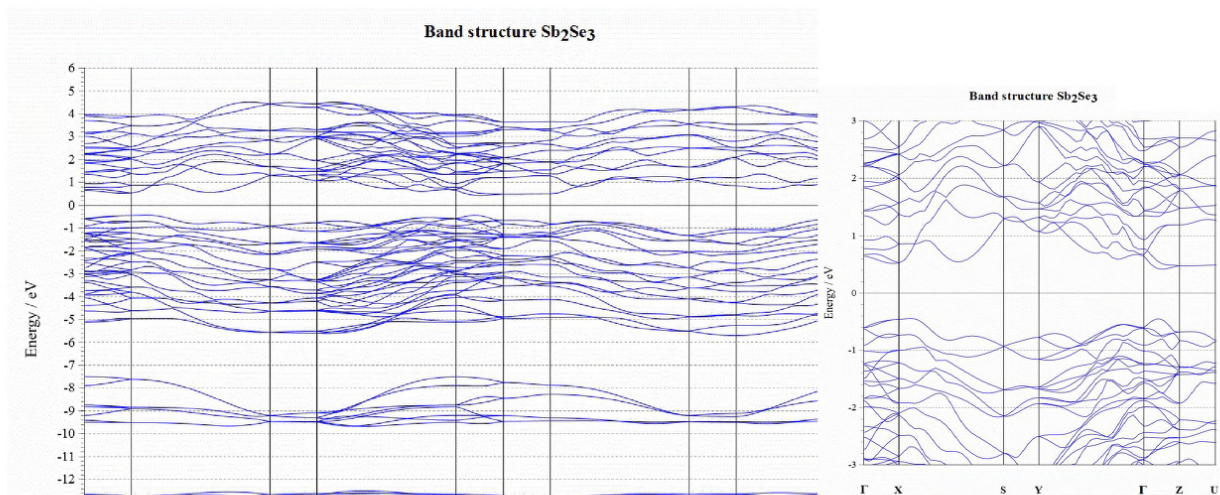


Рис.6. Зонна структура сполуки Sb_2Se_3 .

Макимум валентної зони та мінімум зони провідності знаходяться в одній зоні Бріллюена $\Gamma-Z$ (Рис.6), що вказує прямозонний тип провідності стибій (III) селеніду.

«ЗЕЛЕНІ» РОЗЧИННИКИ В АНАЛІТИЧНІЙ ХІМІЇ: АНАЛІЗ НАУКОВОЇ ЛІТЕРАТУРИ ЗА ОСТАННІХ ДЕСЯТЬ РОКІВ

Дутчук М.Л., Базель Я.Р.
Кафедра органічної хімії
e-mail: dutchuk.maksym@student.uzhnu.edu.ua

Хімічні розчинники становлять близько 80% загального обсягу хімічних речовин, що використовуються в багатьох важливих хімічних процесах, особливо в тонкому хімічному виробництві. Однак ці розчинники часто є летючими органічними сполуками з нафтових ресурсів, що мають кілька ризиків для здоров'я та навколишнього середовища. Багато дослідників використовують ці два аспекти як причину для пошуку нових зелених розчинників для заміни звичайних. Як наслідок, з'являється дедалі більше публікацій, присвячених зеленим розчинникам [1].

Кожен тип зелених розчинників пропонує унікальне поєднання властивостей пов'язаних з ними методів для різних застосувань. Раціональний вибір найбільш ефективного розчинника повинен враховувати емпіричні знання, накопичені в ході практики зеленої хімії. Зелені розчинники є різними в багатьох аспектах, і в тих самих умовах один може існувати як газ, інший – як рідина, а третій – як тверда речовина, але ці розчинники мають відмінні характеристики здоров'я і безпеки. При синтезі біологічно активних сполук з метою покращення здоров'я населення вкрай важливо мінімізувати вплив цього процесу на здоров'я та природу, обираючи розчинники, які є нетоксичними, легко та повністю біорозкладними [2].

Наприклад підкритичну воду можна розглядати як перспективний розчинник для переробки біомаси, наприклад, перетворення сполук, отриманих з лігніну, паливні продукти з додаванням і без додавання промислових газів [3; 4].

Заміна традиційно використовуваних розчинників зеленими розчинниками є дуже широкою областю досліджень та розробок. Першою загальною вимогою є визначення того, що таке зелений розчинник. Gu та Jérôme [5] запропонували 12 критеріїв, яким повинні відповідати зелені розчинники, пов'язані з доступністю, ціною, перероблюваністю, сортом, синтезом, токсичністю, біорозкладанням, продуктивністю, стабільністю, зберіганням та відновлюваністю.

Література

1. Häck K., Kunz W. Some aspects of green solvents. *Comptes Rendus Chimie*, 2018. Vol. 21. 6. P. 572–580. DOI: 10.1016/j.crci.2018.03.010
2. Dolzhenko A. Green solvents for eco-friendly synthesis of bioactive heterocycles. *Green Synthetic Approaches for Biologically Relevant Heterocycles (Second Edition)*, 2021. P. 393–470. DOI: 10.1016/B978-0-12-820792-5.00007-X
3. Hill Bembenic M., Burgess Clifford C. Subcritical Water Reactions of Lignin-Related Model Compounds with Nitrogen, Hydrogen, Carbon Monoxide, and Carbon Dioxide Gases. *Energy Fuels*, 2013. Vol. 27. P. 6681–6694. DOI: 10.1021/ef401113a
4. Möller M., . Subcritical Water as Reaction Environment: Fundamentals of Hydrothermal Biomass Transformation. *Chem Sus Chem*, 2011. Vol. 4. P. 566–579. DOI: 10.1002/cssc.201000341
5. Gu Y., Jérôme F. Bio-based solvents: an emerging generation of fluids for the design of eco-efficient processes in catalysis and organic chemistry. *Chem. Soc. Rev.*, 2013. Vol. 42. P. 9550–9570. DOI: 10.1039/C3CS60241A

ФІБРИЛЯРНІ АГРЕГАТИ БАРВНИКІВ З АНІОННИМИ ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНИМИ РЕЧОВИНАМИ

Пінчук Л., Студеняк Я. І.
Кафедра аналітичної хімії
e-mail pinchuk.liliya@student.uzhmu.edu.ua

Сучасний стан аналітичної, в т.ч. біоаналітичної хімії вимагає розробки нових молекулярно-розмірних аналітичних «інструментів» - зондів та хемосенсорів, які надають сьогочасну (on-line) і надійну інформацію про присутність та концентрацію відповідного аналіту в об'єкті аналізу [1]. Успішне застосування зондів включає низку необхідних умов, наприклад, їх достатньої чутливості та селективності, відносної доступності, безпечності, розчинності у воді, та ін., серед яких забезпечення останнього, нерідко, є найбільш проблематичним. У переважній більшості йдеться про обмежену розчинність зондів у водних середовищах, що потребує використання добавок органічних розчинників чи поверхнево-активних речовин. Типовим прикладом таких систем є ціанінові/поліметинові барвники, низка з яких привертає значну увагу щодо створення на їх основі нових молекулярних зондів [1,2].

Поліметинові барвники є унікальним класом органічних барвників, їх молярні коефіцієнти світлопоглинання досягають максимальних для барвників значень $\varepsilon = (1-3) \times 10^5 \text{ л} \times \text{моль}^{-1} \times \text{см}^{-1}$. Крім того, плоска структура молекул поліметинових барвників створює передумови для агрегації типу «площина - площина» з утворенням нових супрамолекулярних структур, здебільшого J та H-агрегатів з унікальними фотофізичними властивостями [3] та високими потенційними можливостями їх застосування для зондування біологічних об'єктів на клітинному рівні, і взагалі для фототермічних методів лікування [4]. Серед різних типів агрегатів мабуть найменш вивченими і малочисельними є, так звані, H*-агрегати - утворення яких супроводжується гіпсохромним зміщенням максимуму поглинання барвника при одночасному значному звуженні смуги поглинання (ширина смуги світлопоглинання на половині її висоти ~ 20 нм). До цих пір причини, структура, принципи їх утворення є дискусійними [5]. В роботі нами було досліджено утворення останніх агрегатів з декількома новими структурно-подібними поліметиновими барвниками у присутності деяких аніонних поверхнево-активних речовин (аПАР) (довголанцюгових аліфатичних та алкіл-ароматичних сульфатів і сульфонатів), а також у присутності гепарину.

Утворення одного із досліджених H*-агрегатів, як приклад, наведено на рис. 1., де показано зміни спектрів світлопоглинання водних розчинів барвника залежно від концентрації додецилсульфату натрію (ДДС). При зростанні в системі концентрації ДДС спочатку спостерігається утворення важкорозчинних агрегатів, після чого утворення H* агрегатів ($\lambda_{\text{max}}=471$ нм) і на завершення - розчинення останніх з батохромним зміщенням смуги поглинання до 626 нм. H*-агрегати з ДДС зворотно руйнуються при нагріванні розчинів більш як 40 °С. До речі, в низці публікацій, наприклад [6], вказується про індукований перехід під впливом ДДС білків у їх фібрилярні форми, що є цікавим із точки аналогії при можливості з'ясування деяких моментів фібрилоутворення із застосуванням барвників.

На відміну від ДДС, алкілбензенсульфонати при кімнатній температурі утворюють класичні H-агрегати ($\lambda_{\text{max}} \sim 550-560$ нм), які переходять в аналогічні до ДДС (за спектральними характеристиками) H* - при нагріванні розчинів та їх витриманні за відповідної температури, наприклад, не менш як 80 хв. при 60 °С. Обговорюються склад сполук та проблеми пов'язані із його встановленням. Цікаво, що гепарин-добре відомий антикоагулянт крові також утворює H*-агрегати, подібні до вищеописаних, але, з вищою схильністю до осадження (розчинність вільного барвника $\sim 0,2$ моль/л). Для однотипних барвників, що відрізняються наявністю деяких замісників отримано подібні агрегати, які відрізняються за положенням та зміщеннями спектрів світлопоглинання.