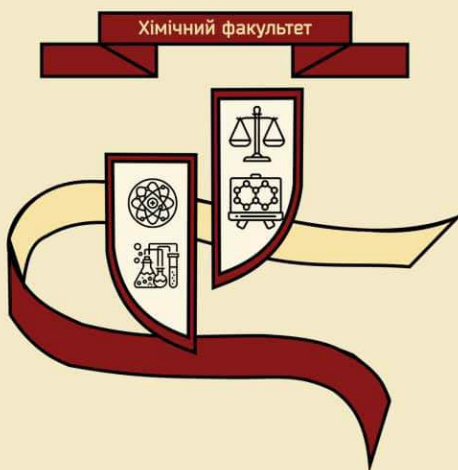


## Хімічний факультет



# СТУДЕНТСЬКА НАУКОВА КОНФЕРЕНЦІЯ хімічного факультету

## Тези доповідей



26 травня 2021 року  
Львів

Міністерство освіти і науки України  
Львівський національний університет імені Івана Франка

Хімічний факультет



СТУДЕНТСЬКА НАУКОВА КОНФЕРЕНЦІЯ  
хімічного факультету

Тези доповідей



26 травня 2021 року

Львів

**Рекомендовано до друку**

Вченою радою хімічного факультету  
(протокол №3 від 20 жовтня 2021 р.)

**УДК 543+544+546+547**

Студентська наукова конференція. Пленарне засідання: програма та тези доповідей. Львів, 26 травня 2021 року / А. Дмухайло, Б. Коротошин, Л. Дубенська, А. Михайлевич, С. Івах (ред.). – Львів: Малий видавничий центр хімічного та фізичного факультетів ЛНУ імені Івана Франка, 2021. – 36 с.

У збірнику опубліковані тези доповідей учасників пленарного засідання звітної студентської наукової конференції хімічного факультету Львівського національного університету імені Івана Франка за 2021 рік. Окрім того, збірник містить програми секційних засідань кафедр хімічного факультету, а саме аналітичної хімії, фізичної та колоїдної хімії, неорганічної хімії та органічної хімії.

**Відповідальні за випуск:**

*Студенти хімічного факультету:* Андрій Дмухайло, Богдан Коротошин, Лідія Дубенська, Анастасія Михайлевич, Софія Івах.

**В авторській редакції.**

© Львівський національний університет  
імені Івана Франка, 2021

**КАФЕДРА АНАЛІТИЧНОЇ ХІМІЇ**

**ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ХАРЧОВОГО  
БАРВНИКА АЗОРУБІНУ**

*Дмухайло А.В.*

*Кафедра аналітичної хімії,*

*Львівський національний університет імені Івана Франка,*

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

*e-mail: Andrii.Dmukhailo@lnu.edu.ua*

Харчування одна з найголовніших потреб людини. Якісна їжа є джерелом енергії для розвитку та нормального функціонування організму, підвищує працездатність людини та її самопочуття. Але наявність у харчових продуктах синтетичних харчових барвників – сторонніх та потенційно небезпечних речовин, які не мають жодної харчової цінності, може призвести до низки захворювань. Наприклад, азорубін (E 122) – синтетичний харчовий барвник червоного кольору, належить до групи азобарвників. Азорубін широко використовують для забарвлення різноманітних кондитерських виробів, напоїв, сумішей для приготування желе, пресервів із фруктів, соусів, спецій, косметичних засобів, лікарських препаратів, засобів побутової хімії; як індивідуально так і у сумішах з жовтими барвниками тартразином та хіноліновим жовтим для отримання помаранчевого забарвлення. Незважаючи на широке використання азорубіну, в результаті численних досліджень було виявлено низку негативних наслідків на здоров'я людини.

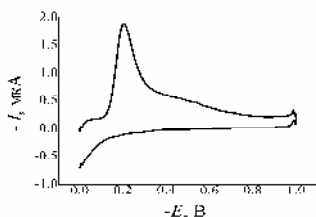


Рис. 1. Вигляд вольтамперограми для m-AgSAE у розчині азорубіну. Умови:  $C = 4.0 \cdot 10^{-5}$  М,  $pH = 3.0$ ,  $V = 1$  В/с,  $t_{acc} = 30$  с,  $E_{acc} = -25$  мВ.

Ми дослідили відновлення азорубіну на твердому амальгамному електроді модифікованому ртутним меніском. Струм і потенціал відновлення азорубіну залежить від pH; залежність струму від концентрації барвника є лінійною; значення струму залежить від часу і потенціалу акумуляції, швидкості розгортки напруги поляризації. На підставі проведених досліджень ми підібрали оптимальні умови визначення азорубіну, і розробили нову вольтамперометричну методику визначення азорубіну у напоях, яку було апробовано під час аналізу води солодкої сильногазованої однієї із ТМ України.

## ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ НІКОТИНУ ТА ЙОГО N-ОКСИДУ

*Душина О.М.*

*Кафедра аналітичної хімії,*

*Львівський національний університет імені Івана Франка,*

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

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

Нікотин (Рис. 1.а) – піридиновий алкалоїд, який міститься в листі родини пасльонових, а також сигаретах, сигарах та в заправках до електронних сигарет. Нікотин потрапляє в організм людини через вживання тютюнових виробів, лікарських препаратів. Смертельною дозою для дорослої людини є 40-60 мг, а для дітей 10 мг. Тютюнопаління, вживання нікотину через паління тютюну у формі сигарет, широко визнане як провідна причина захворюваності і смертності. В організмі людини нікотин метаболізує з утворенням двох основних метаболітів, N-оксиду нікотину (Рис. 1.б) та котиніну.

Ми розробили методику, яка ґрунтується на окисненні нікотину до його N-оксиду за допомогою калій пероксимоносульфату, потім N-оксид нікотину відновлюється на поверхні електрода р.к.е та m-AgSAE. Відновленню N-оксиду нікотину відповідає один пік при потенціалі  $-0,78$  В на р.к.е. і при потенціалі  $-1,05$  В на m-AgSAE.

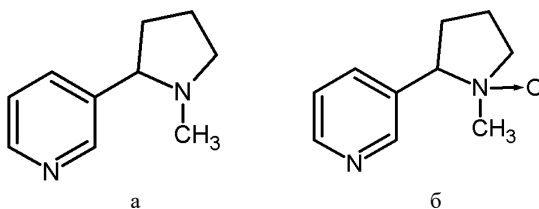


Рис. 1. Структурні формули нікотину та N-оксиду нікотину

В обраних оптимальних умовах було побудовано градувальні графіки на р.к.е. та m-AgSAE. На залежності струму відновлення від концентрації N-оксиду нікотину прростежується по дві лінійні ділянки на обох електродах. Межа виявлення на р.к.е. для першої лінійної ділянки становить  $1,23 \cdot 10^{-7}$  М, а межа визначення  $3,9 \cdot 10^{-7}$  М. На m-AgSAE LOD для першої лінійної ділянки становить  $2,51 \cdot 10^{-7}$  М, а LOQ дорівнює  $7,6 \cdot 10^{-7}$  М.

Розроблену методику було апробовано під час аналізу спрею для ротової порожнини «Нікоретте» виробництва корпорації «Макніл АБ» (Швеція), а також способом “уведено-знайдено” зразків сечі та слини людини. Межі лінійності визначення N-оксиду нікотину в сечі становлять  $2,0 \cdot 10^{-6}$  –  $4,0 \cdot 10^{-5}$  М ( $R = 0,99975$ ). Мінімальна

кількість нікотину N-оксиду, яку можна виявити таким методом становить  $5,8 \cdot 10^{-7}$  М або 2,3 мкг на 1 мл сечі. Межа визначення відповідно дорівнює  $1,78 \cdot 10^{-6}$  М або 7,2 мкг на 1 мл сечі.

На фоні слини людини було отримано градувальний графік в діапазоні концентрацій N-оксиду нікотину від  $2,0 \cdot 10^{-6}$  до  $2,8 \cdot 10^{-5}$  М. Мінімальна кількість нікотину N-оксиду, яку так можна виявити у слині становить  $1,33 \cdot 10^{-6}$  М або 5,4 мкг на 1 мл слини, межа визначення дорівнює  $4,06 \cdot 10^{-6}$  М або 16,4 мкг на 1 мл слини. Для введених у зразки слини кількостей N-оксиду нікотину ступінь визначення коливався від 92,1 до 108,7%.

## ОСОБЛИВОСТІ РОБЕНІДИНУ ЯК ОБ'ЄКТА ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

*Івах С.Р.*

*Кафедра аналітичної хімії,  
Львівський національний університет імені Івана Франка,  
вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна  
e-mail: Sofiia.Ivakh@lnu.edu.ua*

Для харчової промисловості актуальною є проблема контролю вмісту кокцидіостатиків у продуктах тваринного походження, відповідно і розробка селективних, експресних і високочутливих методик визначення залишків діючих речовин. В аналізі складних об'єктів зазвичай використовують хроматографію з різними детекторами, недоліки таких методів очевидні: тривалість пробопідготовки, потреба дорогих реагентів і обладнання. Хорошою альтернативою для визначення кокцидіостатиків є вольтамперометрія (ВА), яка поєднує в собі високу селективність, чутливість, порівняно недороге обладнання, короткий час аналізу та можливість автоматизації.

У роботі досліджували робенідин (РОБ) як представник синтетичних кокцидіостатиків, субстанція містила 98,3% основної речовини згідно з паспортом. Стандартний розчин РОБ готували розчиненням точної наважки у метанолі, для пришвидшення розчинення метанол підігрівали до 27-30 °С. Розчин РОБ у метанолі погано зберігається (аналітичний сигнал зменшується на 25 % впродовж тижня), тож свіжий стандартний розчин готували на початку кожного робочого дня.

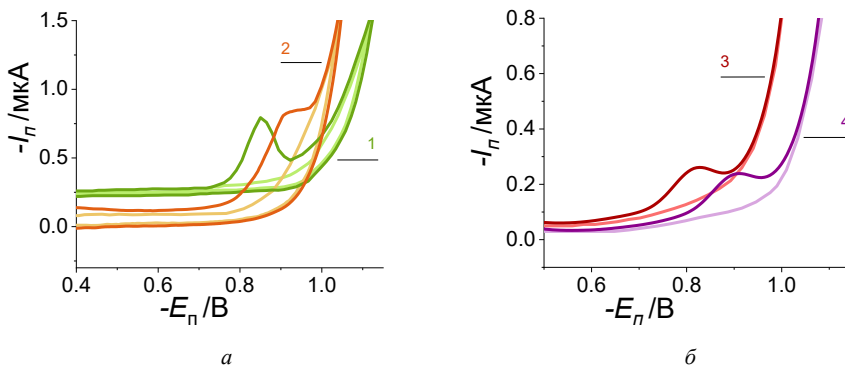


Рис. 1. Вольтамперограми (а) у розчинах РОБ на р.к.е. (1) і р-AgSAE (2) методами циклічної ВА; на m-AgSAE (б) методами ДІВ (3) і КХВ (4); світліші кольори –

відповідна лінія фону (розчин HCl + 30% MeOH),  $C_{\text{HCl}}=0,08 \text{ M}$ ;  $C_{\text{POB}}=5,1 \cdot 10^{-6} \text{ M}$ , для р.к.е.  $v=0,5 \text{ V/c}$ , для p-AgSAE і m-AgSAE  $E_{\text{acc}}=-0,10 \text{ V}$  і  $t_{\text{acc}}=125 \text{ c}$ .

Електрохімічне відновлення РОБ досліджували на трьох робочих електродах (р.к.е., p-AgSAE, m-AgSAE) методами циклічної, швидкої лінійної, диференційної імпульсної (ДІВ) і квадратно-хвильової (КХВ) ВА. РОБ відновлюється з утворенням одного чіткого піку на циклічній вольтамперограмі з потенціалом піку  $-0,85 \text{ V}$  на р.к.е.,  $-0,94 \text{ V}$  на p-AgSAE,  $-0,82 \text{ V}$  і  $-0,92 \text{ V}$  на m-AgSAE методами ДІВ і КХВ відповідно (рис. 1). На анодній частині циклічних вольтамперограм не простежували жодних піків зі зміною умов у межах потенціалів від  $-1,5$  до  $0 \text{ V}$ .

На основі підібраних оптимальних умов відновлення РОБ розробили вольтамперометричні методики аналізу кормів і м'яса птиці на вміст РОБ, які характеризуються межами визначення  $2,52 \text{ мг/кг}$  і  $0,51 \text{ мг/кг}$  відповідно, аналітичні параметри методики повністю задовольняють вимоги Регламенту (ЄС) No 1455/2004 та Регламенту (ЄС) No 2020/148.

**НОВІ ТЕРНАРНІ ФОСФІДИ У СИСТЕМАХ  $L_n$ -Pd-P, ДЕ  $L_n$  — ВАЖКИЙ  
РІДКІСНОЗЕМЕЛЬНИЙ МЕТАЛ**

*Каричорт О.Р., Жак О.В.*

*Кафедра аналітичної хімії*

*Львівський національний університет імені Івана Франка*

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

*e-mail: Oksana.Karychort@lnu.edu.ua*

Швидкий розвиток інноваційних технологій стимулює вчених до пошуку функціональних матеріалів з комплексом необхідних фізико-хімічних та фізичних властивостей. Значне зацікавлення дослідників викликає дослідження трикомпонентних систем, що містять в своєму складі рідкісноземельний метал (РЗМ), паладій та фосфор. Ізотермічні перерізи діаграм стану побудовано лише для систем  $Er$ -Pd-P та  $Yb$ -Pd-P.

Нашою метою був пошук нових тернарних фосфідів паладію у системах з важкими рідкісноземельними металами та вивчення їх кристалічної структури.

Для синтезу зразків перемішували шматочки вихідних компонентів та пресували в таблетку після чого спікали у муфельній печі, поступово нагріваючи до 800 °С. Зразки перетирали та знову спікали за температури 600 °С щоб гомогенізувати їх, гартували у холодній воді не розбиваючи ампул. Тривалість відпалу становила не менше шести тижнів. Дифрактограми порошку отримували за допомогою дифрактометра STOE STADI P. Рентгенівський профільний аналіз та рентгеноструктурний аналіз проведено за допомогою пакету програм WinCSD (підпрограми CellCSD та MainCSD). За температури 600 °С було підтверджено існування відомого тернарного фосфиду  $Yb_5Pd_9P_7$  з гексагональною структурою власного типу. Окрім зазначеного, синтезовано два нові тернарних фосфіди складу  $L_n_5Pd_9P_7$  де  $L_n = Tm, Lu$ .

Кристалічну структуру синтезованих тернарних фосфідів уточнено за дифракційними даними порошку, структурний тип  $Yb_5Pd_9P_7$ , просторова група  $P-6$ :

$a = 0,99785(2)$  нм,  $c = 0,39512(4)$  нм,  $R_I = 0,0418$ ;  $R_P = 0,0909$ ;  $wR_P = 0,1299$  для  **$Tm_5Pd_9P_7$** ;

$a = 0,99873(2)$  нм,  $c = 0,39439(1)$  нм,  $R_I = 0,0611$ ;  $R_P = 0,0991$ ;  $wR_P = 0,1744$  для  **$Yb_5Pd_9P_7$** ;

$a = 0,99934(7)$  нм,  $c = 0,39207(1)$  нм для  **$Lu_5Pd_9P_7$** .

Кристалічна структура  $Yb_5Pd_9P_7$  є надструктурою другого роду до структурного типу  $Zr_2Fe_{12}P_7$  і утворюється внаслідок заміщення атома перехідного металу на атом рідкісноземельного металу в кристалографічній позиції 3k.

**КАФЕДРА ФІЗИЧНОЇ ТА КОЛОЇДНОЇ ХІМІЇ**

**ХІМІЧНИЙ ТА ЕЛЕКТРОХІМІЧНИЙ СИНТЕЗ ПОЛІ(2-АМІНОТІАЗОЛУ)**

**ЗА НАЯВНОСТІ ГРАФЕН ОКСИДУ**

*Дубенська Л.В.*

*Кафедра фізичної і колоїдної хімії,  
Львівський національний університет імені Івана Франка,  
вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна  
e-mail: lidiya.dubenska@gmail.com*

2-амінотіазол – гетероциклічний амін, що виявляє біологічну активність. Тіазольне кільце є частиною великої кількості лікарських препаратів: анальгетиків, протизапальних, протимікробних, протипухлинних та інших. Крім того, полі(2-амінотіазол) (ПАТ) спряжений полімер, який володіє властивостями концентрування та визначення важких металів, потенційний кандидат для моделювання поведінки магнітних центрів у металопротеїнах, однак поки що ПАТ залишається маловивченим.

Графен оксид - каркасний вуглецевий матеріал із високорозвиненою активною поверхнею, утворений із шарів графену з функціональними оксигеновмісними групами. В електропровідних полімерах з відновленими частинками ГО відбувається взаємодія сильно кон'югованої структури ГО та делокалізованих електронів у ланцюзі полімерів. Ми досліджували умови хімічного і електрохімічного одержання ПАТ та вплив графен оксиду на структуру і властивості отриманого полімеру.

Синтез проводили із водного розчину 2-амінотіазолу (АТ) при  $T = 70^\circ \text{C}$  впродовж 18 годин.  $\text{CuCl}_2$  та  $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$  використовували як ініціатори полімеризації за мольного співвідношення ініціатор : мономер = 1:5. Вихід полімеру, синтезованого з  $\text{CuCl}_2$ , становив приблизно 40 %, із ініціатором  $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$  полімер майже не утворився. За наявності ГО (250 мкл ГО на 0,1 моль АТ з ініціатором  $\text{CuCl}_2$ ) вихід продукту теж становив 40 %. Методом скануючої електронної мікроскопії підтверджено глобулярну структуру отриманих зразків з розмірами глобул 0,4-0,6 мкм та включення атомів міді до складу композитів. В ІЧ-ФП спектрах ПАТ-ГО виявлено додаткові смуги поглинання при  $\nu = 1650 \text{ cm}^{-1}$  та  $1457 \text{ cm}^{-1}$ , притаманні фрагментам ГО.

Електрохімічний синтез ПАТ та ПАТ-ГО проводили в умовах ЦВА на прозорому  $\text{SnO}_2$  електроді з 0,1 М розчину АТ в універсальній буферній суміші із  $\text{pH}=9,5$  і наявності 100 мкл ГО (у випадку ПАТ-ГО). При сканування потенціалу в межах  $E = -0,2 \dots -1,8 \text{ В}$  впродовж 10 циклів розгортки одержали світло-жовту прозору плівку на поверхні електроду. Проведено СЕМ аналіз та вивчено оптичні спектри поглинання плівкових зразків ПАТ і ПАТ-ГО. Результати дослідження зразків, отриманих хімічним та електрохімічним синтезом, свідчать про утворення композиту ПАТ з ГО.

## ДОСЛІДЖЕННЯ АМС НА ОСНОВІ ЗАЛІЗА ЯК ЕЛЕКТРОДІВ РЕАКЦІЇ ФЕНТОНА ПРИ ОЧИСТЦІ СТІЧНИХ ВОД

*Івашко С.П., Бойчишин Л.М.*

*Кафедра фізичної та колоїдної хімії,*

*Львівський національний університет імені Івана Франка,*

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

*e-mail: Sofiia.Ivashko@lnu.edu.ua*

Однією з найбільш використовуваних реакцій в очистці стічних вод є реакція Фентона. Оскільки реакція Фентона передбачає взаємодію іонів  $Fe^{2+}$  з гідроген пероксидом, то джерелом цих іонів має виступати АМС-електрод внаслідок окиснення поверхні. На рисунку 1а наведено циклічну вольтамперну криву АМС-електроду в розчині фільтрату з додаванням 0,1 мл 3%  $H_2O_2$ . Як видно, під час поляризації електроду вольтамперну криву (рис. 1а) можна поділити на два діапазони. Перший розташований при потенціалах від -2,0 до -1,1 В. На цій ділянці відбуваються процеси відновлення ймовірно  $H_2$ , виключенням є невеликий максимум при потенціалі -1,32 В, який відповідає за оборотний процес.

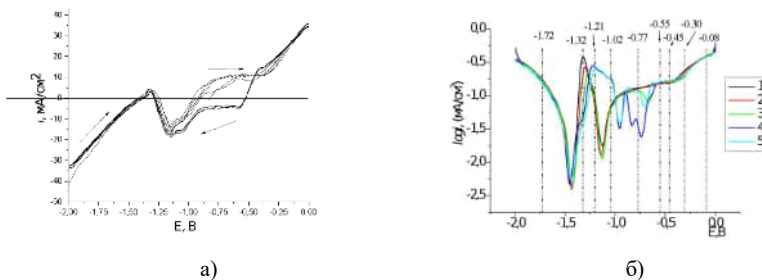


Рис.1 Вольтамперні криві (нелогарифмічних (а) та в напівлогарифмічних координатах (б)) АМС  $Fe_{78.5}Ni_{1.0}Mo_{0.5}Si_{6.0}V_{14.0}$  в розчині фільтрату з додаванням 3%  $H_2O_2$  із наведеними значеннями потенціалів. 1,2,3,4,5 номер вольтамперної кривої.

Внаслідок додавання у фільтрат 0,1 мл 3%  $H_2O_2$  змінюється хід вольтамперної кривої, відбувається зміщення потенціалів деполаризації водню у катодний бік, з'являється максимум при -1,32 В, який характеризує оборотний окисно-відновний процес. Ймовірно, що присутність в розчині ртуті, кадмію, свинцю та інших, які забруднюють стічні води полігонів ТПВ, підвищує перенапругу водню. При потенціалах окиснення АМС-електродів -0,7, -0,45, -0,30В внаслідок проходження реакції Фентона за участі іонів  $Fe^{2+}$ , в пітингах осаджуються важкі метали ртуть, кадмій, мідь. Отже, електрохімічним методом можна генерувати іони  $Fe^{2+}$  необхідні в реакції Фентона та очищати фільтрати від важких металів.

## СИНТЕЗ І ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ПОЛІІНДОЛУ

*Пришляк Х.А.*

*Кафедра фізичної та колоїдної хімії*

*Львівський національний університет імені Івана Франка,*

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

*e-mail: pislakhristina@gmail.com*

Полііндол є важливим електроактивним полімером, який може бути отриманий при електрохімічному або хімічному окисненні індолу. Метою нашої праці стало дослідження умов хімічної та електрохімічної полімеризації індолу, встановлення особливостей структури і фізико-хімічних властивостей одержаного полімеру.

При проведенні хімічного синтезу відносний вихід темно-зеленого порошку полііндолу становить 71%. За даними електронної мікроскопії виявлено, що в процесі полімеризації відбувається утворення упорядкованих структур поліедричного типу з нанорозмірами 10-50 нм. При розчиненні полімеру спостерігається сольватохромний ефект: в оптичних спектрах спостерігаються смуги поглинання при  $\lambda=390$  і 510 нм (діоксан),  $\lambda=390, 440$  і 510 нм (ДМФА) та  $\lambda=400, 540$  нм (трихлорметан). Експериментально визначена електрична провідність отриманого полімеру  $5 \cdot 10^{-3}$  См/см. За температурною залежністю питомого опору визначено енергію активації провідності  $E_a = 0,087$  еВ, що свідчить про напівпровідникові властивості синтезованого полімеру.

Електрохімічне окиснення індолу на SnO<sub>2</sub> електроді в органічному середовищі на фоні 0,05 М ТБАП в ацетонітрилі супроводжується утворенням світло-зеленої полімерної плівки. При циклічній розгортці потенціалу в діапазоні  $E=-0,2 \dots 1,2$  В спостерігається поява максимумів окиснення при  $E= 0,65$  В та відновлення при  $E=0,15$  В, інтенсивність яких зростає зі збільшенням кількості циклів розгортки потенціалу, що свідчить про утворення електроактивного полімеру (полііндолу). При використанні платинового електроду спостерігаються подібні закономірності. В спектрах оптичного поглинання плівки полііндолу виявлено смуги з максимумами при  $\lambda_1=390$  нм,  $\lambda_2=500$  нм і  $\lambda_3=860$  нм, які відповідають електронним переходам у спряжених полімерних системах.

**КАФЕДРА НЕОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ**

**КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА НОВИХ СПОЛУК У СИСТЕМІ Li-Cu-Ga**

*Зайцева К.С., Дмитрів Г.С.*

*Кафедра неорганічної хімії,*

*Львівський національний університет імені Івана Франка,*

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

*e-mail: katernyna.zaitseva@lnu.edu.ua*

Мета нашого дослідження – пошук нових літійвмісних інтерметалічних фаз у системі Li-Cu-Ga та вивчення їхньої кристалічної структури з метою відбору матеріалу для подальшого вивчення фізичних властивостей фаз та пропозицій щодо їхнього використання. За результатами рентгенофазового аналізу отриманих дифрактограм нами було виявлено дві нові сполуки складу  $\text{Li}_2\text{CuGa}$  та  $\text{LiCu}_2\text{Ga}$ . Сплави виготовляли в електродуговій печі компонентів (літій  $\geq 99.8$  мас.%, купрум та галій  $\geq 99.99$  мас.%) з подальшою гомогенізацією за температури  $200^\circ\text{C}$  впродовж 2 місяців.

Уточнення кристалографічних параметрів тернарних фаз  $\text{Li}_2\text{CuGa}$  та  $\text{LiCu}_2\text{Ga}$  провели методом Рітвельда. Оскільки дифрактограми зразків  $\text{Li}_2\text{CuGa}$  та  $\text{LiCu}_2\text{Ga}$  дуже подібні до дифрактограм сполук  $\text{Li}_2\text{AgIn}$  (структурний тип –  $\text{MnCu}_2\text{Al}$ ) і  $\text{LiAg}_2\text{In}$  (структурний тип –  $\text{Li}_2\text{AgSb}$ ), то для уточнення структури цих сполук взято координати атомів у сполуках системи Li-Ag-In. Умови дифракційних досліджень та результати уточнення структури сполуки наведено в таблиці.

У системі Li-Cu-Ga утворюються дві тернарні сполуки  $\text{Li}_2\text{CuGa}$  та  $\text{LiCu}_2\text{Ga}$  зі співвідношенням компонентів 2:1:1 та 1:2:1, що є досить цікавим, оскільки атоми Li, Cu та Ga сильно відрізняються за природою (*s*-метал, *d*-метал та *p*-метал) та розмірами. Незважаючи на це, у структурах обох сполук усім атомам відповідає аналогічна координація атомів – ромбододекаедр.

Склад сполуки	$\text{Li}_2\text{CuGa}$	$\text{LiCu}_2\text{Ga}$
Структурний тип	$\text{Li}_2\text{AgSb}$	$\text{Cu}_2\text{MnAl}$
Просторова група	$F-43m$	$Fm-3m$
Параметри комірки $a$ , Å	6.0942(7)	5.8964(8)
Об'єм комірки $V$ , Å <sup>3</sup>	226,33(4)	205.01(5)
Дифрактометр	ДРОН-2.0 М	ДРОН-2.0 М
Випромінювання	Fe $K\alpha$	Fe $K\alpha$
Крок (град.)	0.05°	0.05°
2 $\theta$ макс.	87.565	82.142
Фактори достовірності	$R_{\text{Br}} = 0.0789$ , $R_{\text{F}} = 0.0482$	$R_{\text{Br}} = 0.0711$ , $R_{\text{F}} = 0.0311$

## ФАЗОВІ РІВНОВАГИ НА ПЕРЕТИНІ $\text{ScGe}_2\text{-SmGe}_2$ ПРИ 870 К

*Іванушко А.А., Штирка З.М.*

*Кафедра неорганічної хімії*

*Львівський національний університет імені Івана Франка,*

*вул. Кирила і Мефодія, 6/8, 79005 Львів, Україна*

*e-mail: andriana.ivanushko@lnu.edu.ua*

Методами рентгенівського фазового та рентгеноструктурного аналізів досліджено взаємодію компонентів на перетині  $\text{ScGe}_2\text{-SmGe}_2$  при температурі 870 К, уточнено кристалічну структуру фаз. Для дослідження синтезовано 8 сплавів.

З'ясовано, що на перетині утворюється тернарна фаза складу  $\text{Sc}_{1-x}\text{Sm}_x\text{Ge}_2$ . Зразки з області гомогенності містять основну фазу  $\text{Sc}_{0,35}\text{Sm}_{0,65}\text{Ge}_{1,85}$  (СТ  $\text{DyGe}_{1,85}$ , СП  $oS24$ , ПГ  $Cmc2_1$ ), вміст якої становить від 67,2 до 62,7 %. Зразок складу  $\text{Sc}_{0,16}\text{Sm}_{0,18}\text{Ge}_{0,66}$  дослідили на автоматичному дифрактометрі STOE STADI P ( $\text{CuK}_{\alpha 1}$ -випромінювання). Експериментальна, теоретична та різницева дифрактограми зразка  $\text{Sc}_{0,16}\text{Sm}_{0,18}\text{Ge}_{0,66}$  показана на рисунку. Зразок містив фази  $\text{Sc}_{0,75}\text{Sm}_{0,25}\text{Ge}_2$  (СТ  $\text{ZrSi}_2$ ,  $oS12$ , ПГ  $Cmcm$ ,  $a = 0,3941(4)$ ,  $b = 1,5203(2)$ ,  $c = 0,3827(3)$ ),  $\text{Sc}_{0,25}\text{Sm}_{0,75}\text{Ge}_{1,86}$  (СТ  $\text{TbGe}_2$ , СП  $oS24$ , ПГ  $Cmmm$ ,  $a = 0,4102(4)$ ,  $b = 2,9608(6)$ ,  $c = 0,3999(6)$ ) та германій.

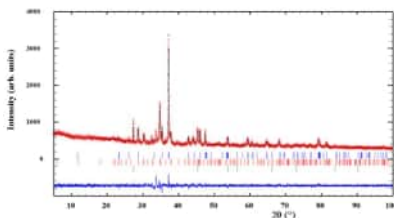


Рисунок. Експериментальна (кільця) теоретична (суцільна лінія) та різницева (унизу) дифрактограми зразка  $\text{Sm}_{0,18}\text{Sc}_{0,16}\text{Ge}_{0,66}$ , разом із відмітками брегівських рефлексів для фаз  $\text{Sc}_{1-x}\text{Sm}_x\text{Ge}_2$  і  $\text{Sm}_{1-x}\text{Sc}_x\text{Ge}_{1,9}$ .

На основі дигерманіду  $\text{SmGe}_2$  (СТ  $\alpha\text{-ThSi}_2$ ) утворюється обмежений твердий розчин заміщення протяжністю  $\sim 0,10$  ат. частки Sc (таблиця). Розчинність Sm в  $\text{ScGe}_2$  – незначна.

Параметри та об'єм елементарної комірки в області твердого розчину Sc в  $\text{SmGe}_2$  (СТ  $\alpha\text{-ThSi}_2$ )

Склад сплавів (ат. частки)			Параметри комірки, нм			$V$ , нм <sup>3</sup>
Sc	Sm	Ge	$a$	$c$	$c/a$	
—	0,34	0,66	0,417	1,384	3,318	0,2407
0,03	0,31	0,66	0,4169(4)	1,3794(3)	3,309	0,2397
0,05	0,29	0,66	0,4168(1)	1,3788(5)	3,308	0,2395
0,09	0,25	0,66	0,4163(1)	1,3784(4)	3,311	0,2389

## РЕНТГЕНОФАЗОВИЙ АНАЛІЗ ЗРАЗКІВ СИСТЕМИ Pd–Mo–Ge

*Коротошин Б.М., Муць Н.М., Гладішевський Р.С.*

*Кафедра неорганічної хімії,*

*Львівський національний університет імені Івана Франка,*

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

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

Для реакцій крекінгу нафти, гідрування та дегідрування органічних сполук дедалі більшого застосування набувають каталізатори на основі інтерметалічних сполук паладію. До прикладу, сплав складу Pd<sub>2</sub>Ga<sub>0,85</sub>Sb<sub>0,15</sub> проявляє високу активність і селективність у напівгідруванні ацетилену в надлишку етилену [1]. Краща каталітична активність порівнюючи з чистим паладієм пояснюється унікальним механізмом реакції напівгідрування. У сполуках паладію, у яких забезпечується належна ізоляція активних центрів, реалізується слабке π-зв'язування молекули ацетилену з атомом паладію. Це дозволяє підвищити як селективність реакції, так і вихід продукту. Тоді як при використанні в ролі каталізатора чистого металу реалізується сильне ди-σ-зв'язування, що приводить до утворення в значній кількості небажаного етану.

Метою нашого дослідження є пошук нових каталітично активних інтерметалічних сполук у системі Pd–Mo–Ge та побудова ізотермічного перерізу діаграми стану системи за температури 600°C. Для цього ми синтезували трикомпонентні зразки методом електродугового сплавлення шихти металів із вмістом основного компоненту не менше 99,95 %. Гомогенізаційний відпал тривав 150 днів за температури 600 С. Масиви рентгенівських дифракційних даних від полікристалічних зразків отримано на дифрактометрах ДРОН-2.0 М (Fe Kα проміння) та STOE Stadi P (Cu Kα проміння). Хімічний склад зразків та індивідуальних фаз підтверджували енергодисперсійною рентгенівською спектроскопією (скануючий електронний мікроскоп Tescan Vega 3 LMU). За результатами рентгенофазового аналізу та енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії всі зразки виявились багатофазними. Ми підтвердили існування в системі таких бінарних сполук: MoGe<sub>2</sub> (структурний тип PbCl<sub>2</sub>, символ Пірсона oP12, просторова група *Pnma*,  $a = 0,63531(8)$ ,  $b = 0,34560(4)$ ,  $c = 0,8595(1)$  нм), Mo<sub>3</sub>Ge (СТ Cr<sub>3</sub>Si, СП *cP8*, ПГ *Pm-3n*,  $a = 0,49387(7)$  нм), PdGe (СТ FeAs, СП *oP8*, ПГ *Pnma*,  $a = 0,6303(3)$ ,  $b = 0,5819(3)$ ,  $c = 0,3483(2)$  нм), Pd<sub>2</sub>Ge (СТ Fe<sub>2</sub>P, СП *hP9*, ПГ *P-62m*,  $a = 0,6719(2)$ ,  $c = 0,3411(3)$  нм). Встановлено, що дигерманід молібдену розчиняє паладій (~10 ат. %), а розчинність Мо в сполуці еквіатомного складу PdGe складає ~7 ат. %.

[1] *Matselko O., Zimmermann R.R., Ormeci A., Burkhardt U., Gladyshevskii R., GrinYu., Armbrüster M.* Revealing electronic influences in the semi-hydrogenation of acetylene // J. Phys. Chem., C. – 2018. – Vol. 122 (38). – P. 21891–21896.

## НЕПЕРЕРВНИЙ РЯД ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ $\text{NdSi}_x\text{Ge}_{2-x}$

*Кушнірчук О.А., Штурка З.М.*

*кафедра неорганічної хімії,*

*Львівський національний університет імені Івана Франка,*

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

*e-mail: olga.kushnirchuk.99@ukr.net*

Методом порошку (ДРОН-4,0; FeK $\alpha$ -проміння), СЕМ (скануючий електронний мікроскоп Tescan Vega3 LMU) та ЕДРС (енергодисперсійний рентгенівський мікроаналізатор Oxford Instruments Aztec ONE, детектор X-Max<sup>N20</sup>) уточнено фазові рівноваги перетині  $\text{NdSi}_2$ – $\text{NdGe}_{2-x}$  при 870 К. Між сполуками  $\text{NdSi}_{2-x}$  і  $\text{NdGe}_{2-x}$  утворюється НРТР з неперервною зміною структурних типів  $\alpha$ - $\text{GdSi}_2$  /  $\alpha$ - $\text{ThSi}_2$  [1].

Залежність питомого електроопору від температури для зразка  $\text{Nd}_{0,33}\text{Ge}_{0,20}\text{Si}_{0,47}$  поміряна у температурному інтервалі 170–290 К (рис. 1), диференціальної термо-е.р.с. для зразків складу  $\text{Nd}_{0,33}\text{Si}_{0,07}\text{Ge}_{0,60}$  (1),  $\text{Nd}_{0,33}\text{Ge}_{0,20}\text{Si}_{0,47}$  (2) в інтервалі 80–390 К (рис. 2). Поступове зростання питомого електроопору зі збільшенням температури та невеликі його значення вказують на металічний тип провідності, результати вимірювань диференціальної термо-е.р.с. засвідчують, що досліджувані зразки характеризуються малими від'ємними значеннями диференціальної термо-е.р.с. і належать до матеріалів з металічною провідністю.

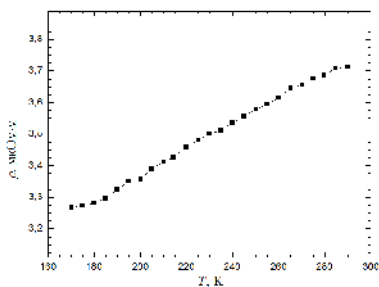


Рис. 1. Залежність питомого електроопору від температури для зразку складу  $\text{Nd}_{0,33}\text{Ge}_{0,20}\text{Si}_{0,47}$  в температурному інтервалі 170–290 К.

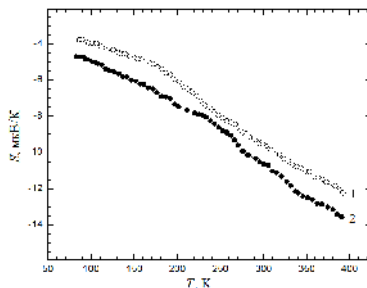


Рис. 2. Залежність диференціальної термо-е.р.с. від температури для зразків  $\text{Nd}_{0,33}\text{Si}_{0,07}\text{Ge}_{0,60}$  (1),  $\text{Nd}_{0,33}\text{Ge}_{0,20}\text{Si}_{0,47}$  (2).

[1] Shpyrka Z. The system Nd–Si–Ge at 870 K / Z. Shpyrka, O. Soludchuk, N. German, V. Pavlyuk // Coll. Abs. XII Int. Conf. Cryst. Chem. Internet. Comp. – Lviv, 2019. – P. 69.

**СИСТЕМА DyNi<sub>3</sub>Al<sub>9</sub> – DyNi<sub>3</sub>Ga<sub>9</sub>**

*Лесько О.Р., 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: oleh.lesko@lnu.edu.ua*

У потрійних системах R–Ni–Al та R–Ni–Ga, де R – Sc, Y, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu, утворюються тернарні сполуки зі стехіометрією 1:3:9 зі структурами типів Yb<sub>0,67</sub>Ni<sub>2</sub>Al<sub>6</sub> (символ Пірсона *hP11*, просторова група *P-6m2*), DyNi<sub>3</sub>Al<sub>9</sub> (СП *hR99*, ПГ *R32*) та ErNi<sub>3</sub>Al<sub>9</sub> (СП *hR78*, ПГ *R32*) [1-3].

З метою вивчення взаємодії компонентів у системі DyNi<sub>3</sub>Al<sub>9</sub> – DyNi<sub>3</sub>Ga<sub>9</sub> нами синтезовано зразки складу DyNi<sub>3</sub>Al<sub>x</sub>Ga<sub>9-x</sub> ( $x = 1,5, 2,25, 3,375, 5,625, 6,75$  та 9) методом електродугової плавки з чистих компонентів: Dy  $\geq 99,85$  мас. %, Ni  $\geq 99,9$  мас. %, Al  $\geq 99,985$  мас. %, Ga  $\geq 99,89$  мас. %. Гомогенізаційний відпал проводили за температури 600°C впродовж 120 днів. Для всіх зразків виготовлено дифрактограми (ДРОН-2.0 М та STOE Stadi P), на основі яких проведено рентгенофазовий аналіз. Усі зразки були багатофазними. Нами підтверджено існування сполуки DyNi<sub>3</sub>Al<sub>9</sub> та уточнено її кристалічну структуру в моделі власного структурного типу ( $a = 0,72806(2)$ ,  $c = 2,7393(2)$  нм). У чотириккомпонентних зразках DyNi<sub>3</sub>Al<sub>1,5</sub>Ga<sub>7,5</sub>, DyNi<sub>3</sub>Al<sub>2,25</sub>Ga<sub>6,75</sub> та DyNi<sub>3</sub>Al<sub>6,75</sub>Ga<sub>2,25</sub> ідентифіковано фазу зі структурою типу DyNi<sub>3</sub>Al<sub>9</sub>, вміст якої кількісно переважає (~80-90 мас. %). Додатковою фазою у всіх зразках є бінарна сполука Ni<sub>2</sub>Ga<sub>3</sub> (СТ Ni<sub>2</sub>Al<sub>3</sub>, СП *hP5*, ПГ *P-3m1*). Результати енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії (скануючий електронний мікроскоп **Tescan Vega 3 LMU**) зразка DyNi<sub>3</sub>Al<sub>1,5</sub>Ga<sub>7,5</sub> вказали на склад тетрарної фази Dy<sub>7,1(4)</sub>Ni<sub>22,2(3)</sub>Al<sub>11(1)</sub>Ga<sub>59,7(8)</sub>.

- [1] Villars P., Cenzual K., Gladyshevskii R., Handbook of Inorganic Substances 2017, Berlin, De Gruyter, 2017, 1717.
- [2] Topertser V., Martynyak R.-I., Muts N., Tokaychuk Ya., Gladyshevskii R. Crystal structure of GdNi<sub>3</sub>Ga<sub>9</sub>// Chem. Met. Alloys. – 2019. – Vol. 12. – P. 21–28.
- [3] Matselko O., Pukas S., Lutsyshyn Yu., Gladyshevskii R., Kaczorowski D. Ternary aluminides R<sub>0.67</sub>Ni<sub>2</sub>Al<sub>6</sub> (R= Sc, Y, Gd-Lu) with partly disordered structures// J. Solid State Chem. – 2013. – Vol. 198. – P. 50–56.

**ЕЛЕКТРОХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ФАЗ  $GdFe_{2-x}M_x$  ( $M = Mn, Co, Ni, Zn, Mg$ )**

*Михайлович А.М., Зелінська О.Я., Кордан В.М., Павлюк В.В.*  
*Кафедра неорганічної хімії,*  
*Львівський національний університет імені Івана Франка,*  
*вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна*  
*e-mail: anastasiya.mykhailevych@gmail.com*

Інтерметалічні сполуки на основі рідкоземельних та перехідних металів складу АВ, АВ<sub>2</sub>, АВ<sub>3</sub>, АВ<sub>5</sub> та А<sub>2</sub>В<sub>17</sub> мають здатність до оборотної інтеркаляції/деінтеркаляції водню, що робить можливим розробку на їх основі нових електродних матеріалів для нікель-металогідридних акумуляторів. Вивчення ефективності електрохімічного гідрування бінарного інтерметаліду GdFe<sub>2</sub> та його тернарного похідного GdFe<sub>2-x</sub>Zn<sub>x</sub> проводилось у праці [1]. Мета цієї роботи – дослідити вплив мангану, кобальту, нікелю та магнію як легуючих компонентів на електрохімічні властивості інтерметалічної сполуки GdFe<sub>2</sub>.

Синтез сплавів Gd<sub>33,3</sub>Fe<sub>64,7</sub>Mn<sub>2</sub>, Gd<sub>33,3</sub>Fe<sub>64,7</sub>Co<sub>2</sub>, Gd<sub>33,3</sub>Fe<sub>64,7</sub>Ni<sub>2</sub> та Gd<sub>33,3</sub>Fe<sub>64,7</sub>Mg<sub>2</sub> проводили сплавлянням високочистих металів в електродуговій печі з наступним гомогенізаційним відпалом впродовж 2 місяців при 500°C. Електрохімічне гідрування фаз здійснювали в прототипі хімічного джерела енергії “Swagelok-cell” у гальваностатичному режимі впродовж 50 циклів заряджання-розряджання. Фазовий склад зразків до та після гідрування дослідили методами рентгенівської дифракції порошку (дифрактометр ДРОН-2.0М) та скануючої електронної мікроскопії (мікроскоп Tesla Vega 3 LMU).

Синтезовані інтерметаліди належать до фаз Лавеса з кубічною симетрією комірки (СТMgCu<sub>2</sub>, ПГFd-3m). Атоми Гідрогену входять в тетраедричні пустоти 8 a(0 0 0), утворені атомами перехідних металів, які мають достатній розмір для такого включення. Параметри елементарних комірок фаз у процесі гідрування збільшуються: для GdFe<sub>2-x</sub>Mn<sub>x</sub> a = 7,3786(4)–7,393(1)Å (ΔV/V = 0,57 %), для GdFe<sub>2-x</sub>Co<sub>x</sub> a = 7,3744(7)–7,3824(8)Å (ΔV/V = 0,32 %), для GdFe<sub>2-x</sub>Ni<sub>x</sub> a = 7,3689(3)–7,3840(8)Å (ΔV/V = 0,61%) і для GdFe<sub>2-x</sub>Mg<sub>x</sub> a = 7,3882(9)–7,424(8)Å, (ΔV/V = 1,46%). Оборотною кількістю поглинутого водню становить 0,044 Н/ф.о. для GdFe<sub>2-x</sub>Mn<sub>x</sub>, 0,054 Н/ф.о. для GdFe<sub>2-x</sub>Co<sub>x</sub>, 0,061 Н/ф.о. для GdFe<sub>2-x</sub>Ni<sub>x</sub> та 0,047 Н/ф.о. для GdFe<sub>2-x</sub>Mg<sub>x</sub>, x = 0,06. Загалом зразок з нікелем порівняно з іншими має найкращі електрохімічні характеристики, є більш корозійно стійким, поглинає найбільшу кількість водню і демонструє найбільший час розряду.

Окрім цього досліджено електрохімічну інтеркаляцію літію та натрію в структуру інтерметалідів. З'ясували, що при літіюванні атоми Li частково заміщають атоми статичної суміші (Fe,M), а при інтеркаляції натрію атоми Na частково заміщають атоми Gd.

[1] ChornaN., SaganN., ZelinskaO., KordanV., ZelinskiyA., PavlyukV. Chem. Met. Alloys.– 2018. – Iss. 11(1/2). – P.27-33.

## МОНОКРИСТАЛЬНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ СПОЛУКИ GdPtIn

*Перун Р.Р., Гудзьо О.О., Ничиторук Г.П., Заремба В.І.*  
*Кафедра неорганічної хімії,*

*Львівський національний університет імені Івана Франка,*  
*вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна*  
*e-mail: Romana.Perun@lnu.edu.ua*

Тернарні індици еквіатомного складу  $R\text{PtIn}$  ( $R = \text{PЗМ}$ ) ідومی в літературі і належать до структурного типу  $\text{ZrNiAl}$ , окрім сполуки  $\text{EuPtIn}$ , яка є представником структурного типу  $\text{TiNiSi}$ . Останнім часом досить інтенсивно вивчаються їхні фізичні, зокрема магнітні, властивості.

Зразки для дослідження синтезували методом електродугової плавки з шихти чистих металів. Для одержання монокристалів сплави, попередньо запаяні у танталові контейнери та вакуумовані у кварцові ампули, піддали спеціальній термічній обробці у муфельній печі, яка полягала у нагріванні, відпалі та охолодженні в режимі контрольованої температури. Як наслідок, отримали монокристали неправильної форми, і ряд з них протестували (метод Лауе, камера РКВ-86) та відібрали для подальших досліджень. Масиви експериментальних відбить  $hkl$  отримали на моно кристальному дифрактометрі Stoe IPDS 2T (МоК $\alpha$ -випромінювання) в Інституті хімії Технічного університету м. Мюнхена (Німеччина).

Кристалічна структура сполуки  $\text{GdPtIn}$  розв'язана в рамках моделі структурного типу  $\text{ZrNiAl}$  [1] з використанням пакету програм SHELX [2]: ПГ  $P-62m$ ,  $a = 0,75726(11)$ ,  $c = 0,39137(8)$  нм,  $wR_2 = 0,0218$ , 315 відбить  $hkl$ , 15 уточнених параметрів. Досліджена сполука відноситься до класу сполук з тригонально-призматичною координацією атомів найменшого розміру (платини) згідно класифікації запропонованої П.І. Крип'якевичем [3].

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

[2] Sheldrick G.M. A short history of SHELX // Acta Crystallogr. 2008. А 64. Р. 112.

[3] Крип'якевич П.І. Структурныетипыинтерметаллическихсоединений // М.: Наука. 1977. 290 с.

**НОВІ ПРЕДСТАВНИКИ СТРУКТУРНОГО ТИПУ  $Y_3NiAl_3Ge_2$**

*Пляцко Ю.О., Янів О.О., Пукас С.Я., Гладішевський Р.С.  
Кафедра неорганічної хімії,  
Львівський національний університет імені Івана Франка,  
вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна  
e-mail: yuliia.pliatsko@lnu.edu.ua*

Метою наукового дослідження є синтез тетрарних алюмогерманідів купруму та визначення параметрів структури. Чотирикомпонентні системи  $R-T-Al-Ge$  ( $R$  – рідкісноземельний метал,  $T$  –  $3d$ -елемент Mn, Fe, Co, Ni) досліджено на предмет існування тетрарних сполук окремих складів. Кристалічні структури цих інтерметалідів належать до 11 структурних типів, 7 з яких є чотирикомпонентними. Максимальна кількість сполук, 57, знайдена для структурного типу  $Y_3NiAl_3Ge_2$ .

Сплави складу  $R_{33,3}Cu_{11,1}Al_{33,4}Ge_{22,2}$  ( $R = Y, Gd-Lu$ ) синтезовано сплавленням компонентів в електродуговій печі та відпалено при  $600^\circ C$  впродовж 720 год. Для зразків знято масиви рентгенівських порошкових дифракційних даних на дифрактометрі STOE Stadi P (проміння Cu  $K\alpha_1$ ). Уточнення кристалічної структури проведено методом Рігвельда. Встановлено, що основною фазою в усіх сплавах є нова тетрарна сполука  $R_3CuAl_3Ge_2$  зі структурою типу  $Y_3NiAl_3Ge_2$ . Параметри елементарної комірки синтезованих тетрарних сполук закономірно зменшуються зі зменшенням атомного радіуса рідкісноземельного металу, за винятком сполуки з Yb, що може бути пояснено валентним станом Yb(II).

Параметри елементарної комірки сполук  $R_3CuAl_3Ge_2$

Сполука	$a, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	$V, \text{Å}^3$
$Y_3CuAl_3Ge_2$	7,0019(9)	4,1666(6)	176,91(4)
$Gd_3CuAl_3Ge_2$	7,04421(8)	4,20448(4)	180,674(6)
$Tb_3CuAl_3Ge_2$	7,0093(7)	4,1806(5)	177,88(7)
$Dy_3CuAl_3Ge_2$	6,9837(9)	4,1677(6)	176,03(4)
$Ho_3CuAl_3Ge_2$	6,95612(8)	4,14524(5)	173,706(6)
$Er_3CuAl_3Ge_2$	6,92304(9)	4,13082(6)	171,459(7)
$Tm_3CuAl_3Ge_2$	6,9183(6)	4,1144(4)	170,54(3)
$Yb_3CuAl_3Ge_2$	6,9210(9)	4,2131(6)	174,77(7)
$Lu_3CuAl_3Ge_2$	6,8899(8)	4,0917(6)	168,22(4)

Acta Crystallogr. C – 1990. – Vol. 46. – P. 2273–2276.

**КАФЕДРА ОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ**

**СИНТЕЗ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ НОВИХ ПОХІДНИХ**

**3,5-ДИМЕТИЛ-2,6-ДИЦИАНОАНІЛІНУ**

*Аксьонова М.В., Литвин Р.З.*

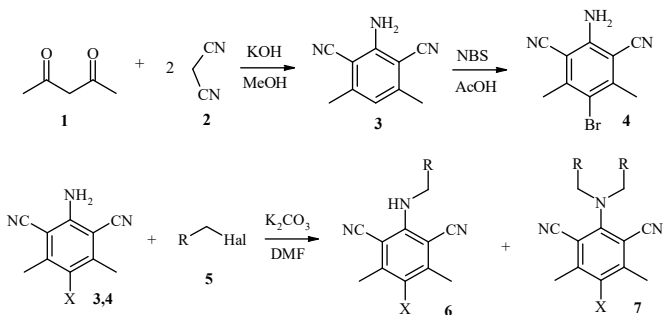
*Кафедра органічної хімії,*

*Львівський національний університет імені Івана Франка,*

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

*e-mail: Myroslava.Aksionova@lnu.edu.ua*

Деякі похідні 3,5-диметил-2,6-диціаноаніліну фосфоресцюють за кімнатної температури (room-temperature phosphorescence, RTP). З метою пошуку нових матеріалів з покращеними RTP-властивостями реакціями алкілювання диціаноанілінів **3,4** було синтезовано серію сполук **6a-i** та **7a-d**.



**6:** R = Ph, X = H (**6a**); R = 3-BrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, X = H (**6b**); R = 4-BrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, X = H (**6c**); R = 4-NCC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, X = H (**6d**); R = 2-EtOOC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, X = H (**6e**); R = n-Pr, X = H (**6f**); R = n-C<sub>8</sub>H<sub>17</sub>, X = H (**6g**); R = Me, X = Br (**6h**); R = Ph, X = Br (**6i**).

**7:** R = Ph, X = H (**7a**); R = 3-BrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, X = H (**7b**); R = 4-BrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, X = H (**7c**); R + R = C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, X = H (**7d**).

Кристали сполук **6a**, **6b**, **6e**, **7a**, **7c** фосфоресцюють після опромінення УФ-лампою чи LED-ліхтариком, тому для них було знято спектри фотолумінесценції та фосфоресценції за кімнатної температури та обраховано часи життя збуджених станів. Будову отриманих сполук доведено за допомогою <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C ЯМР-спектроскопії та, у деяких випадках, PCA (рис. 1).

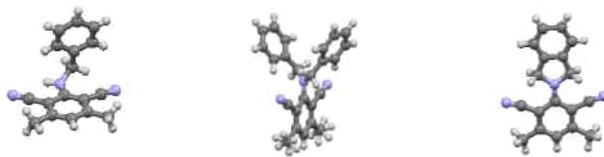


Рис 1. Молекулярні структури сполук **6a**, **7a** та **7d** згідно даних РСА

Висловлюємо щиро вдячність к.фіз.-мат.н. **Тарасу Малому** (кафедра експериментальної фізики, ЛНУ) за вимірювання фотофізичних характеристик та PhD **Василю Кінжибалу** (INTIBS, м. Вроцлав, Польща) за рентгеноструктурні дослідження. Робота підтримана Міністерством освіти і науки України у рамках двостороннього українсько-литовського проекту.

## НОВІ ВАРІАНТИ РЕАКЦІЙ C- ТА N-АРИЛЮВАННЯ

*Бутенко С.О., Литвин Р.З., Обушак М.Д.*

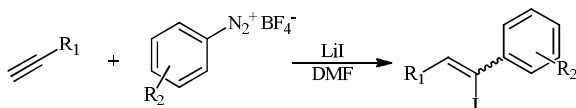
*Кафедра органічної хімії,*

*Львівський національний університет імені Івана Франка,*

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

*e-mail: serhii.butenko@lnu.edu.ua*

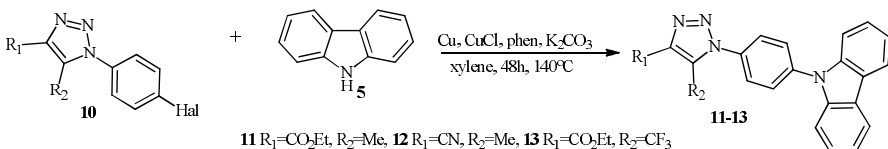
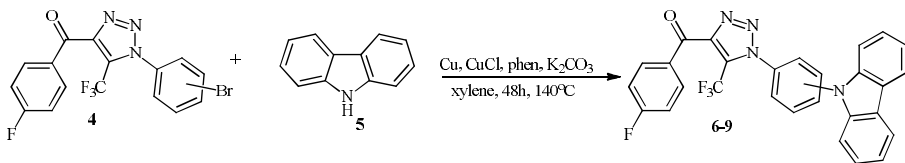
Реакції C- та N-арилювання посідають чільне місце в арсеналі сучасної органічної хімії, а продукти таких реакцій є практично корисними речовинами, або ж їх використовують при плануванні дивергентних шляхів синтезу складних речовин. Зважаючи на це, ми розробили нову трикомпонентну реакцію йодарилування алкінів, яка полягає у взаємодії арендіазоній тетрафторборатів з літій йодидом та алкінами. У результаті цієї реакції відбувається приднання арильного радикала та йоду до потрійного зв'язку (сполуки **3**).



$R_1 = \text{CH}_2\text{OH}, \text{CH}_2\text{SO}_2\text{Me}, \text{CO}_2\text{Et}, \text{Ph}.$

$R_2 = \text{H}, \text{o-Cl}, \text{p-Cl}, \text{p-Br}, \text{p-F}, \text{p-Me}, \text{p-OMe}, \text{p-CO}_2\text{Et}, \text{p-NO}_2, \text{m-CF}_3.$

Відомо, що поєднання в одній молекулі донорних та акцепторних фрагментів є одним із сучасних трендів у створенні нових матеріалів для OLED-пристроїв. З цією метою ми отримали низку нових карбазол-триазольних кон'югатів (**6-9**, **11-13**) за допомогою реакції Ульмана.



Висловлюємо подяку працівникам львівського НДЕКЦ за GC-MS-аналіз, д.х.н. Н. Походилу за надані сполуки **4**, **10**, доктору В. Кінжибало (Вроцлав) за рентгеноструктурні дослідження та колегам з Каунаського технологічного університету за дослідження фотофізичних властивостей синтезованих сполук.

**ПРОГРАМА ЗВІТНОЇ СТУДЕНТСЬКОЇ НАУКОВОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ**

Пленарне засідання

26 травня 2021 року, 15:00

1. **Христина Пришляк** (IV курс) Синтез і фізико-хімічні властивості полііндолу.  
Наукові керівники: проф. Дутка В.С., проф. Аксіментьєва О.І.
2. **Анастасія Михайлович** (II курс) Електрохімічні особливості фаз  $GdFe_{2-x}M_x$  ( $M = Mn, Co, Ni, Zn, Mg$ ).  
Наукові керівники: доц. Зелінська О.Я., н.сп. Кордан В.М.
3. **Софія Івах** (IV курс) Вольтамперометричне визначення кокцидіостатика робенідину в кормі для тварин та м'ясі птиці.  
Наукова керівниця: доц. Дубенська Л.О
4. **Сергій Бутенко** (I курс, магістр) Нові варіанти реакцій C- та N-арилування.  
Наукові керівники: с.н.с. Литвин Р.З., проф. Обушак М.Д.
5. **Богдан Коротошин** (II курс) Фазовий аналіз зразків системи Pd-Mo-Ge.  
Наукові керівники: проф. Гладішевський Р.Є., доц. Муць Н.М.
6. **Мирослава Аксьонова** (III курс) Синтез та дослідження нових похідних 3,5-диметил-2,6-диціаноаніліну.  
Науковий керівник: с.н.с. Литвин Р.З.
7. **Софія Івашко** (I курс, магістр) Використання аморфного металевого сплаву складу Fe-Ni-Mo-Si-B в очищенні стічних вод.  
Наукова керівниця: доц. Бойчишин Л.М.
8. **Любомир Шевчук** (IV курс) Дослідження можливості спектрофотометричного визначення Cu(II) з використанням 1-(1-метил-1H-піразол-3-іл-азо)-нафтален-2-олу.  
Науковий керівник: доц. Ридчук П.В.

Засідання секції аналітичної хімії

1. **Марія Новожилова** (IV курс) Вольтамперометричне визначення сульфадиметоксину.  
Наукова керівниця: доц. Дубенська Л.О.
2. **Юлія Малецька** (IV курс) Кристалічна структура твердого розчину Гольмію у NiIn.  
Науковий керівник: проф. Каличак Я.М.
3. **Андрій Дмухайло** (I курс, магістр) Вольтамперометричне визначення харчового барвника азорубіну.  
Наукова керівниця: доц. Дубенська Л.О.
4. **Оксана Каричорт** (I курс, магістр) Нові тернарні фосфіди у системах  $Ln$ -Pd-P, де  $Ln$  – важкий рідкісноземельний метал.  
Наукова керівниця: доц. Жак О.В.
5. **Ольга Душна** (I курс, магістр) Вольтамперометричне визначення нікотину і його N-оксиду.  
Наукова керівниця: доц. Дубенська Л.О.
6. **Любомир Шевчук** (IV курс) Дослідження можливості спектрофотометричного визначення Cu(II) з використанням 1-(1-метил-1H-піразол-3-іл-азо)-нафтален-2-олу.  
Науковий керівник: доц. Ридчук П.В.
7. **Анастасія Кушнір** (IV курс) Дослідження взаємодії феруму або ванадію з танталом і фосфором за його високого вмісту.  
Наукова керівниця: доц. Ломницька Я.Ф.
8. **Софія Івах** (IV курс) Вольтамперометричне визначення кокцидіостатика робенідину в кормі для тварин та м'ясі птиці.  
Наукова керівниця: доц. Дубенська Л.О.

9. **Христина Шкумбатюк** (IV курс) Дослідження можливості використання 3-(2-гідрокси-нафтален-1-іл-азо)-1-метил-1H-піразол-4-етилкарбоксилату для спектрофотометричного визначення Cu(II).

Науковий керівник: доц. Ридчук П.В.

*Засідання секції фізичної та колоїдної хімії*

1. **Христина Пришляк** (IV курс) Синтез і фізико-хімічні властивості полііндолу.  
Наукові керівники: проф. Дутка В.С., проф. Аксіментьєва О.І.
2. **Назарій Дацюк** (IV курс) Вплив рН на швидкість знебарвлення розчинів на основі алюмінію азобарвників за участі аморфних сплавів.  
Наукова керівниця: доц. Бойчишин Л.М.
3. **Лідія Дубенська** (II курс) Хімічний та електрохімічний синтез полі(2-амінотіазолу) за наявності графен оксиду.  
Наукова керівниця: проф. Аксіментьєва О.І.
4. **Софія Івашко** (I курс, магістр) Використання аморфного металевого сплаву складу Fe-Ni-Mo-Si-B в очищенні стічних вод.  
Наукова керівниця: доц. Бойчишин Л.М.
5. **Олег Хамар** (I курс, магістр) Фізико-хімічні властивості полімерних композитів на основі поліаніліну та поліметакрилової кислоти.  
Науковий керівник: проф. Дутка В.С.
6. **Владислав Брюховецький** (IV курс) Дослідження ефективності АМС на основі алюмінію в реакціях виділення водню волнометричним методом.  
Наукова керівниця: доц. Бойчишин Л.М.

*Засідання секції неорганічної хімії*

1. **Богдан Коротошин** (II курс) Фазовий аналіз зразків системи Pd-Mo-Ge.  
Наукові керівники: чл.-кор. НАНУ, проф. Гладішевський Р.Є., доц. Муць Н.М.
2. **Андріана Іванушко** (I курс, магістр) Фазові рівноваги на перетині  $\text{ScGe}_2\text{-SmGe}_2$  при 870 К.  
Наукові керівники: доц. Шпирка З.М., пр.н.сп. Демченко П.Ю.
3. **Ілля Огоновський** (IV курс) Рентгенофазовий аналіз сплавів системи Yb-Ga-Sn.  
Наукові керівники: ст.н.сп. Токайчук Я.О., чл.-кор. НАНУ, проф. Гладішевський Р.Є.
4. **Анастасія Михайлевич** (II курс) Електрохімічні властивості фаз  $\text{GdFe}_{2-x}\text{M}_x$  (M = Mn, Co, Ni, Zn, Mg).  
Наукові керівники: доц. Зелінська О.Я., н.сп. Кордан В.М.
5. **Артем Янчак** (III курс) Кристалічна структура купрум(I) бромідного  $\pi$ -комплексу  $[\text{Cu}_2\text{Br}_2(\text{L})_2]$  (де L = N-[(2Z)-5-(бромометил)-3-аліл-1,3-тіазолідин-2-іліден]анілін) як продукту купрокаталітичної циклізації диалілфенілтіокарбаміду.  
Наукові керівники: пр.н.сп. Сливка Ю.І., проф. Миськів М.Г.
6. **Катерина Зайцева** (I курс, магістр) Кристалічна структура сполук  $\text{Li}_2\text{CuGa}$  і  $\text{LiCu}_2\text{Ga}$ .  
Науковий керівник: доц. Дмитрів Г.С.
7. **Юлія Пляцко** (IV курс), **Ольга Янів** (I курс, магістр) Нові представники структурного типу  $\text{Y}_3\text{NiAl}_3\text{Ge}_2$ .  
Наукові керівники: чл.-кор. НАНУ, проф. Гладішевський Р.Є., доц. Пукас С.Я.
8. **Ольга Кушнірчук** (I курс, магістр) Неперервний ряд твердих розчинів  $\text{NdSi}_x\text{Ge}_{2-x}$ .  
Наукові керівники: доц. Шпирка З.М., ст.н.сп. Горинь А.М.

9. **Олег Гудзьо** (III курс), **Романа Перун** (I курс, магістр) Монокристалне дослідження кристалічної структури сполуки GdPdIn.  
Наукові керівники: доц. Заремба В.І., зав.лаб. Ничипорук Г.П.
10. **Марта Гладка** (IV курс) Фазові рівноваги при 800°C системи Gd-Fe-Si в області до 50 ат.% Si.  
Наукові керівники: проф. Котур Б.Я., пр.н.сп. Бабіжецький В.С.
11. **Олег Лесько** (II курс) Система  $DyNi_3Al_9$ - $DyNi_3Ga_9$ .  
Наукові керівники: чл.-кор. НАНУ, проф. Гладішевський Р.Є., доц. Муць Н.М.
12. **Андрій Федько** (I курс, магістр) Особливості будови нових  $\pi$ -комплексів Cu(I) з 3-алілсульфаніл-4,5-дифеніл-1,2,4-триазолом.  
Наукові керівники: пр.н.сп. Сливка Ю.І., проф. Миськів М.Г.

*Засідання секції органічної хімії*

1. **Володимир Лучечко** (IV курс) Застосування тандемних циклізацій у синтезі похідних піролідонопітицену та фенантридону.  
Наукові керівники: с.н.с. Горак Ю.І., проф. Обушак М.Д.
2. **Оксана Барабаш** (II курс, магістр) Піразолілдіазонієві солі у синтезі заміщених піразолілтриазолів та піразолілпіразолів.  
Науковий керівник: доц. Остап'юк Ю.В.
3. **Мирослава Аксьонова** (III курс) Синтез та дослідження нових похідних 3,5-диметил-2,6-диціаноаніліну.  
Науковий керівники: с.н.с. Литвин Р.З.
4. **Тарас Сех** (IV курс) Синтез наночастинок різної форми для shape-directed самоорганізації.  
Науковий керівник: проф. Обушак М.Д.
5. **Володимир Фолюш** (II курс, магістр) 2-Хлорацетамідотіазоли у молекулярному дизайні біологічно активних речовин.  
Науковий керівник: проф. Матійчук В.С.
6. **Володимир Мотовильський** (IV курс) Синтез 1,4-дигідропіримідо[1,2-а]бензімідазолів з арилфурановими замісниками.  
Наукові керівники: с.н.с. Горак Ю.І., проф. Обушак М.Д.
7. **Олена Петрова** (I курс, магістр) Дослідження 5-арилфурфуролів у реакції Біджинеллі.  
Наукова керівниця: доц. Муляк О.І.
8. **Сергій Бутенко** (I курс, магістр) Нові варіанти реакцій C- та N-арилування.  
Наукові керівники: с.н.с. Литвин Р.З, проф. Обушак М.Д.

ЗМІСТ

Вольтамперометричне визначення харчового барвника азорубіну <i>Дмухайло А.В.</i>	3
Вольтамперометричне визначення нікотину та його N-оксиду <i>Душина О.М.</i>	4
Особливості робенідину як об'єкта вольтамперометричних досліджень <i>Івах С.Р.</i>	6
Нові тернарні фосфіди у системах $Ln-Pd-P$ , де $Ln$ — важкий рідкісноземельний метал <i>Каричорт О.Р., Жак О.В.</i>	8
Хімічний та електрохімічний синтез полі(2-аміногіазолу) за наявності графен оксиду <i>Дубенська Л.В.</i>	9
Дослідження АМС на основі заліза як електродів реакції фентона при очищенні стічних вод <i>Івашко С.П., Бойчишин Л.М.</i>	10
Синтез і фізико-хімічні властивості полііндолу <i>Пришляк Х.А.</i>	11
Кристалічна структура нових сполук у системі $Li-Cu-Ga$ <i>Зайцева К.С., Дмитрів Г.С.</i>	12
Фазові рівноваги на перетині $ScGe_2-SmGe_2$ при 870 К <i>Іванушко А.А., Штирка З.М.</i>	13
Рентгенофазовий аналіз зразків системи $Pd-Mo-Ge$ <i>Коротошин Б.М., Муць Н.М., Гладішевський Р.Є.</i>	14

Неперервний ряд твердих розчинів $\text{NdSi}_x\text{Ge}_{2-x}$ <i>Кушнірчук О.А., Шпирка З.М.</i>	15
Система $\text{DyNi}_3\text{Al}_9 - \text{DyNi}_3\text{Ga}_9$ <i>Лесько О.Р., Муць Н.М., Гладішевський Р.Є.</i>	16
Електрохімічні властивості фаз $\text{GdFe}_{2-x}\text{M}_x$ ( $M = \text{Mn, Co, Ni, Zn, Mg}$ ) <i>Михайлович А.М., Зелінська О.Я., Кордан В.М., Павлюк В.В.</i>	17
Монокристалне дослідження сполуки $\text{GdPtIn}$ <i>Перун Р.Р., Гудзьо О.О., Ничипорук Г.П., Заремба В.І.</i>	18
Нові представники структурного типу $\text{Y}_3\text{NiAl}_3\text{Ge}_2$ <i>Пляцко Ю.О., Янів О.О., Пукас С.Я., Гладішевський Р.Є.</i>	19
Синтез та дослідження нових похідних 3,5-диметил-2,6-диціаноаніліну <i>Аксьонова М.В., Литвин Р.З.</i>	20
Нові варіанти реакцій С- та N-арилування <i>Бутенко С.О., Литвин Р.З., Обушак М.Д.</i>	22
Програма звітної студентської наукової конференції	23
<i>Засідання секції аналітичної хімії</i>	24
<i>Засідання секції фізичної та колоїдної хімії</i>	26
<i>Засідання секції неорганічної хімії</i>	27
<i>Засідання секції органічної хімії</i>	29

**Авторський показчик**

<b>А</b>		<b>Л</b>	
Аксьонова М.В.	20	Лесько О.Р.	16
		Литвин Р.З.	20,22
<b>Б</b>		<b>М</b>	
Бойчишин Л.М.	10	Михайлевич А.М.	17
Бутенко С.О.	22	Муць Н.М.	14,16
<b>Г</b>		<b>Н</b>	
Гладишевський Р.Є.	14,16,19	Ничипорук Г.П.	18
Гудзьо О.О.	18		
<b>Д</b>		<b>О</b>	
Дмитрів Г.С.	12	Обушак М.Д.	22
Дмухайло А.В.	3		
Дубенська Л.В.	9		
Душна О.М.	4		
<b>Ж</b>		<b>П</b>	
Жак О.В.	8	Павлюк В.В.	17
		Перун Р.Р.	18
		Пляцко Ю.О.	19
		Пришляк Х.А.	11
		Пукас С.Я.	19
<b>З</b>		<b>Ш</b>	
Зайцева К.С.	12	Шпирка З.М.	13,15
Заремба В.І.	18		
Зелінська О.Я.	17		
<b>І</b>		<b>Я</b>	
Іванушко А.А.	13	Янів О.О.	19
Івах С.Р.	6		
Івашко С.П.	10		
<b>К</b>			
Каричорт О.Р.	8		
Кордан В.М.	17		
Корогошин Б.М.	14		
Кушнірчук О.А.	15		







Студентська наукова конференція хімічного факультету

Пленарне засідання

(програма та тези доповідей)

В авторській редакції.

Комп'ютерне верстання

*Андрій Дмухайло*

*Богдан Коротошин*

*Лідія Дубенська*

*Анастасія Михайлевич*

*Софія Івах*

Підп. до друку 20.10.2021. 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

