

Сильне поглинання в області 698–642 cm^{-1} (криві 1, 2) пов'язано з коливанням зв'язків Si–CH₂. В ІЧ спектрі молекули 4S4GeEt₂ область поглинання зв'язку Ge–CH₂ сильно зміщена в бік менших частот, майже на 100 cm^{-1} і складає від 590 до 544 cm^{-1} з максимумом при 587 cm^{-1} (крива 3). Смуга 728 cm^{-1} середньої інтенсивності (розр.: 725 cm^{-1}) належить маятниковим коливанням метиленових груп етильних фрагментів. Відповідна лінія в ІЧ спектрі молекули 4S4GeEt₂ також значно зміщена в сторону менших частот (розр.: 686 cm^{-1} , крива 3). Розраховані в молекулі 4S4SiEt₂ скелетні коливання CH₂–CH₃ зв'язків етильних фрагментів утворюють смуги 1026 і 1007 cm^{-1} з інтенсивністю нижче середньої. В експериментальному спектрі їм відповідає широка смуга з максимумом 1004 cm^{-1} (крива 1). В розрахованому ІЧ спектрі молекули 4S4GeEt₂ відповідні смуги зміщені в область більших значень частот (1038 і 1020 cm^{-1} , крива 3). Широка експериментальна смуга з максимумом 944 cm^{-1} в ІЧ спектрі сполуки 4S4SiEt₂ належить деформаційним коливанням CH₂- і CH₃-груп. В розрахованому спектрі молекули 4S4SiEt₂ цей тип коливань проявляється в області 970–944 cm^{-1} , а в спектрі молекули 4S4GeEt₂ – в області 971–953 cm^{-1} . Неплоскі деформації всіх гетероциклів в ІЧ спектрі сполуки 4S4SiEt₂ утворюють експериментальну смугу 533 cm^{-1} (розр.: 535 cm^{-1} , крива 1, 2), на частоту і інтенсивність якої практично не впливає заміщення атома Силіцію в гетероциклах атомом Германію (крива 3). Коливання C^β–C^{β'} силіфенових (розр.: 1428 cm^{-1}) і гермафенових фрагментів (розр.: 1425 cm^{-1}) слабкоактивні і тому через передбачену низьку інтенсивність в експериментальному ІЧ спектрі сполуки 4S4SiEt₂ не спостерігаються. Симетричні деформаційні коливання метильних груп ($\delta_s\text{CH}_3$) (експ.: 1376 cm^{-1} , розр.: 1371 cm^{-1}) менш активні в ІЧ спектрі 4S4SiEt₂ в порівнянні з асиметричними ($\delta_{as}\text{CH}_3$) (експ.: 1456 cm^{-1} , розр.: 1457 cm^{-1}). Розраховані значення частот деформаційних коливань CH₃-групи близькі до експериментальних і характеристичних групових частот поглинання ($\delta_s\text{CH}_3$: 1385–1370 cm^{-1} , $\delta_{as}\text{CH}_3$: 1470–1435 cm^{-1} [5]), що підтверджує правильність наших розрахунків. Відмічені зміни в спектрі молекули 4S4GeEt₂ в порівнянні з молекулою 4S4SiEt₂ ми пов'язуємо із змінами довжин зв'язків C–X (X–Si або Ge), X–CH₂, CH₂–CH₃, а також кутів СХС (табл. 1).

Таблиця 1

Деякі структурні параметри молекул 4S4SiEt₂ і 4S4GeEt₂ за даними оптимізації методом B3LYP/6-31G(d, p)

Циркулен	C–X, Å	X–CH ₂ , Å	CH ₂ –CH ₃ , Å	СХС, град.
4S4SiEt ₂	1.871	1.895	1.538	87.72
4S4GeEt ₂	1.921	1.951	1.531	85.66

Список використаної літератури:

1. Electronic structure and spectral properties of heterocirculenes: monograph / B. F. Minaev, N. M. Karaulov-Karmazin, G. V. Baryshnikov, V. A. Minaeva. – Cherkasy: Published from Chabanenko Yu. A., 2018 – 300 p.
2. Serizawa Y. Synthesis of Tetrasilatetrathia[8]circulenes by a Fourfold Intramolecular Dehydrogenative Silylation of C–H Bonds / Y. Serizawa, S. Akahori, S. Kato, H. Sakai, T. Hasobe, Y. Miyake, H. Shinokubo // Chem. Eur. J. – 2017. – Vol. 23. – P. 6948–6953.
3. Akahori S. Synthesis and Photodynamics of Tetragermatetrathia[8]circulene / S. Akahori, H. Sakai, T. Hasobe, H. Shinokubo, Y. Miyake // Org. Lett. – 2018. – Vol. 20. – P. 304–307.
4. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. *et al.* Gaussian 16, Revision A.03, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016.
5. Socrates G. Infrared and Raman Characteristic Group Frequencies – Tables and Charts, 3rd ed. Chichester: J. Wiley & Sons, 2001. – 347 p.

Наукові керівники: д.х.н., професор Мінаєв Б. П., к.х.н., доцент Мінаєва В. О.

ОКИСНЮВАЛЬНА ПОЛІМЕРИЗАЦІЯ ФЕНОЛЬНИХ СПОЛУК – ЯК СПОСІБ ОДЕРЖАННЯ СИНТЕТИЧНИХ ФУЛЬВОКИСЛОТ

Окиснювальна полімеризація фенолів широко використовується для отримання синтетичних гумінових речовин. Вона здавна приваблювала дослідників простотою синтезу і схожістю властивостей одержуваного продукту полімеризації з природними гуміновими речовинами. При цьому можливість варіювання умов синтезу дозволяє контролювати властивості продукту полімеризації. Це дозволяє зрозуміти шляхи формування гумінових речовин в навколишньому середовищі і виявляти взаємозв'язок між їх структурою і властивостями. В літературі відомі методики одержання синтетичних гумінових речовин з гідрохінону, пірокатехіну, пірогалолу і п-бензохінону. При цьому окиснення проводили як на повітрі, так і з використанням різноманітних окисників (калій персульфату, аргентум(I) оксиду, пероксиду водню) і різних ферментів.

Нами запропоновано метод одержання синтетичних фульвокислот шляхом окиснення таніну (Рис. 1) молекулярним киснем у лужному середовищі. Для підтвердження подібності будови та властивостей одержаного продукту з природними фульвокислотами було проведено комплексне дослідження їх властивостей. Проведення елементного аналізу показало, що синтезована синтетична фульвокислота містить 59.7% Карбону, 3.0% Гідрогену

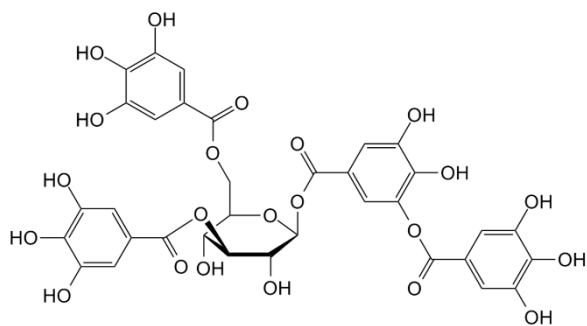


Рис. 1. Будова молекули таніну

і 37.3% Оксигену, що цілком узгоджується з даними одержаними для фульвокислот, вилучених з природних джерел [1]. Порівнюючи ІЧ-спектри синтетичних і природних фульвокислот [1] можна зробити висновок про однотипність їх хімічної структури. За даними рентгенодифракційного аналізу синтетичні фульвокислоти не мають кристалічної структури, але мають впорядковану сітчасту будову. Методом електронного-парамагнітного резонансу (ЕПР) було підтверджено наявність у одержаному продукті вільнорадикальних центрів семіхінонного типу, що узгоджується з даними для природних фульвокислот.

Список використаної літератури:

1. Перминова И. В. Анализ, классификация и прогноз свойств гумусовых кислот / И. В. Перминова // Диссертация на соиск. уч. степ. докт. хим. наук, – М.: МГУ, 2000. – 319 с.

Науковий керівник: к.х.н, доцент Литвин В. А.

А. О. Косімова
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

КОМПЕТЕНТІСНО-ОРІЄНТОВАНИЙ ПІДХІД ДО НАВЧАННЯ ХІМІЇ В ЗАГАЛЬНООСВІТНІХ НАВЧАЛЬНИХ ЗАКЛАДАХ

Одним із стратегічних напрямів розвитку освіти, визначених Державним стандартом базової та повної загальної середньої освіти, критеріями оцінювання навчальних досягнень учнів є реалізація компетентнісного підходу, який передбачає перенесення акцентів зі знань і вмінь як основних результатів навчання та формування в учнів системи компетентностей.