

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ



ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ
УНІВЕРСИТЕТ імені В. Н. КАРАЗІНА
НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ІНСТИТУТ **ХІМІЇ**



XVIII Всеукраїнська наукова
конференція студентів та аспірантів

ХІМІЧНІ КАРАЗІНСЬКІ ЧИТАННЯ – 2026

28 квітня 2026 р.

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

Харків – 2026

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет
імені В. Н. Каразіна
Навчально-науковий інститут Хімії

**XVIII Всеукраїнська наукова
конференція студентів та аспірантів
"Хімічні Каразінські читання - 2026"
(ХКЧ'26)**

Тези доповідей

28 квітня 2026 року

Харків
2026

УДК 54 (063)
Х 46

Реєстраційне посвідчення у ДНУ «УкрІНТЕІ» МОН України (№ 964 від 10 грудня 2025 р.)

Затверджено до друку рішенням науково-методичної ради Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна.

Тези доповідей представлені за теоретичними та практичними результатами наукових досліджень, виконаних студентами та аспірантами вищих навчальних закладів і науково-дослідницьких установ України.

Для науковців та студентів ВНЗ та НДІ України.

Тези доповідей подаються в авторській редакції.

ISBN

© Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, 2026



**НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ
ІНСТИТУТ ХІМІЇ**

**ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ
УНІВЕРСИТЕТ імені В. Н. КАРАЗІНА**

Організаційний комітет конференції:

Олег КАЛУГІН	голова комітету, директор Навчально-наукового інституту Хімії, кандидат хімічних наук, професор
Денис ЧУДАК	заступник голови, заступник директора Навчально-наукового інституту Хімії з наукової роботи, доцент кафедри органічної хімії та молекулярних матеріалів, доктор філософії (PhD, Хімія)
Наталія ЛЕОНОВА	заступник голови, доцент кафедри неорганічної та аналітичної хімії, кандидат хімічних наук
Ярослав КОЛЕСНИК	доцент кафедри неорганічної та аналітичної хімії, кандидат хімічних наук
Микита ПРУДЬ	аспірант кафедри неорганічної та аналітичної хімії
Владислав ТИХОНОВ	студент групи ХБ41, секретар студентського наукового товариства
Дар'я ХАРЧЕНКО	науковий співробітник кафедри фізичної хімії та хімічного матеріалознавства, доктор філософії (PhD, Хімія)

Науковий комітет конференції:

Олег КАЛУГІН	голова комітету, директор Навчально-наукового інституту Хімії, кандидат хімічних наук, професор
Микола МЧЕДЛОВ-ПЕТРОСЯН	завідувач кафедри фізичної хімії та хімічного матеріалознавства, доктор хімічних наук, професор, академік НАН України
Олександр КИРИЧЕНКО	завідувач кафедри неорганічної та аналітичної хімії, доктор хімічних наук, старший науковий співробітник
Валентин ЧЕБАНОВ	в.о. завідувача кафедри органічної хімії та молекулярних матеріалів, доктор хімічних наук, професор, академік НАН України
Андрій ДОРОШЕНКО	професор кафедри органічної хімії та молекулярних матеріалів, доктор хімічних наук, професор
Олександр КОРОБОВ	професор кафедри фізичної хімії та хімічного матеріалознавства, доктор хімічних наук, професор
Олег ЮРЧЕНКО	професор кафедри неорганічної та аналітичної хімії, доктор хімічних, наук, професор

ПРОГРАМА КОНФЕРЕНЦІЇ

«Хімічні Каразінські читання – 2026»

28 квітня 2026

Урочисте відкриття конференції: 14⁰⁰–14¹⁵

Тема: Хімічні Каразінські читання - 2026 (ХКЧ'26) - Відкриття конференції

Час: 28 квітня 2026 14:00

Підключитися до конференції Zoom

<https://us02web.zoom.us/j/8737984070?pwd=WkRuWDNOeGtmQ3lFK1oxYmdlY1BGdz09&omn=82570950020>

Ідентифікатор конференції: 873 798 4070 Код доступу: 0wuTZLm5

Відповідальний: доцент **Леонова** Наталія Олександрівна

Контакти. Телефон/Viber/Telegram: +380500455247

Робота в секціях: 14²⁰–17⁰⁰

Секція "Фізична хімія"

Тема: Хімічні Каразінські читання-2026 (ХКЧ'26) - Секція "Фізична хімія"

Час: 28 квітня 2026, 14.20

Підключитися до конференції

<https://meet.google.com/odi-jwmn-sko>

Відповідальний за роботу в секції: науковий співробітник, к.х.н. **Харченко** Дар'я Вікторівна

Контакти: Телефон/Viber/Telegram: +380979024358

Секція «Органічна хімія»

Тема: Хімічні Каразінські читання - 2026 (ХКЧ'26) - Секція «Органічна хімія»

Час: 28 квітня 2026, 14:20

Підключитися до конференції Zoom

<https://us02web.zoom.us/j/87656343732?pwd=MvrOTxNlH5ihL552pHcHXc4akm59Pb.1>

Ідентифікатор конференції: 876 5634 3732 Код доступу: avRD57vB

Відповідальний за роботу секції: доцент, к.х.н. **Нікішин** Олександр Олександрович Олегович

Контакти. Телефон/Viber/Telegram: +380506886851

Секція «Неорганічна та Аналітична хімія»

Тема: Хімічні Каразінські читання - 2026 (ХКЧ'26) - Секція «Аналітична хімія»

Час: 28 квітня 2026, 14:20

Підключитися до конференції Zoom

<https://us05web.zoom.us/j/4019330765?pwd=OTlHbDBZT1FTSUhCa3crZmI1RUptUT09>

Ідентифікатор конференції: 401 933 0765 Пароль: 5y4NPW

Відповідальний за роботу секції: доцент, к.х.н. **Нікітіна** Наталія Олександрівна

Контакти. Телефон/Viber/Telegram: +380996092743

Урочисте закриття конференції: 17³⁰–17⁴⁵

Тема: Хімічні Каразінські читання - 2026 (ХКЧ'26) - Закриття конференції

Час: 28 квітня 2026 17:30

Підключитися до конференції Zoom

<https://us02web.zoom.us/j/8737984070?pwd=WkRuWDNOeGtmQ3lFK1oxYmdlY1BGdz09&omn=82570950020>

Ідентифікатор конференції: 873 798 4070 Код доступу: 0wuTZLm5

Відповідальний: доцент **Леонova** Наталія Олександрівна

Контакти. Телефон/Viber/Telegram: +380500455247

Неорганічна та Аналітична хімія

Stovba Y. A., Chudak D. M. Radical-anion tcnq salts based on benzothiazole derivatives: synthesis and properties 14.20-14.35

Андрюшкевич С. А., Полтавець В. В. Розробка мікрофлюїдної системи типу lab-on-a-chip для амперометричного аналізу H_2O_2 на основі MnO_2 електродів..... 14.35-14.50

Бєляєв А. М., Шафорост Ю. А. Дослідження вибухових речовин методом ТШХ за методикою ATF USA (США)..... 14.50-15.05

Максименко Д. Д., Юрченко О. І. Атомно – абсорбційне визначення аналітів в дитячому харчуванні, косметичних препаратах, засобах гігієни та водах 15.05-15.20

Саєнко Л. Д., Терєбіленко К. В., Слободяник М. С. Вплив молібдат– та вольфрамат– йону на будову, люмінесценцію та області склоутворення у фосфатно-боратних системах..... 15.20-15.35

Тарадайка В. А., Бєляєв А. М., Шафорост Ю. А. Визначення вмісту $w(\%)$ $FeSO_4$ у зразку залізного купоросу методом потенціометричного титрування..... 15.35-15.50

Федяй В.Д., Гуцул Х.Р., Кириї С.О. Диференційоване визначення іонів заліза у воді за допомогою портативного крапельного методу 15.50-16.05

Шевченко І. Р., Юрченко О. І., Бакланов О. М. Надвисокочастотний ультразвук у визначенні вмісту свинцю та кадмію у молокопродуктах 16.05-16.20

Штефан С. О., Осипов А. В., Юрченко О. І. Атомно-абсорбційне визначення міді, цинку, свинцю та заліза в фармацевтичних субстанціях 16.20-16.35

Органічна хімія

Ващенко. А. П., Колосова О. С., Власенко Г. С., Чернишова О. С., Кривошей О. І., Татарець А. Л. Йодовані гептаметинові ціанінові барвники як фотосенсибілізатори для антимікробної фотодинамічної терапії в ближній інфрачервоній області..... 14.20-14.35

Демчук О. П., Ляшук О. С., Готинчан А. Г., Трачова В. В., Гришук О. В., Григоренко О. О. Флуородеборилування як новий метод одержання вінілфлуоридів..... 14.35-14.50

Коробка А. Ю., Збруєв О. І., Чебанов В. А. Дослідження комплексоутворення етил 5-метил-4,7-дигідро-[1,2,4]триазоло[1,5-а]піримідин-6-карбоксилату (DHP) з модифікованими β - та γ -циклодекстринами..... 14.50-15.05

<i>Нечесний Я. І., Кемський С. В., Вовк М. В.</i> 1,2,3,4-тетрагідропіроло[1,2-а]піразин-7-карбоксилати/карбонові кислоти: синтез та структурні модифікації.....	15.05-15.20
<i>Рашевський А. С., Чебанов В. А., Тімохін О. С., Кучер О. В., Москвіна В. С.</i> Синтез та ензиматичне розділення 2-флуоралкілзаміщених хроман-4-олів.....	15.20-15.35
<i>Семьошкіна О. Д., Якубовський В. П., Мельников К. П., Ляшук О. С., Григоренко О. О.</i> Синтез та модифікація функціоналізованих 2,3-дигідрохінолін-4(1H)-онів.....	15.35-15.50
<i>Сніжко А. Д., Гладков Є. С., Чепелева Л. В., Кириченко О. В.</i> Синтез та фотофізичні властивості нових похідних 3-гідроксифлавону з подовженим полієновим ланцюгом.....	15.50-16.05
<i>Горобець М. Ю., Терещенко А. Ю.</i> Синтез 5,10,15,20-тетра(піридин-3-іл)-хлорину, виходячи з 5,10,15,20-тетра(піридин-3-іл)-порфірину..	16.05-16.20
<i>Клименко Д. С., Оліфір О. С., Черних А. В., Ляшук О. С., Григоренко О. О.</i> Синтез та дослідження фізико-хімічних параметрів будівельних блоків на основі 6-(трифлуорометил)спіро[3.3]гептану.....	16.20-16.35

Фізична хімія

<i>Anokhin D. O., Panteleimonov A. V., Ivanov V. V.</i> Use of fuzzy linear regression in QSAR-problems.....	14.20-14.35
<i>Dikarieva K. S., Koverga V., Kalugin O. N.</i> Polarizability effects on microstructure and dynamics of LiFSI/DME electrolyte.....	14.35-14.50
<i>Курпа М. О., Іванов В. В.</i> Novel shape and dimensionality descriptors of molecular orbitals.....	14.50-15.05
<i>Morozova V. O., Kyrychenko A. V.</i> Benchmarking openfe for relative binding free energy predictions: a case study on JAK1 inhibitors.....	15.05-15.20
<i>Prud M. V., Kyrychenko A. V.</i> From docking scores to free energies: relative binding free energy in OpenFE.....	15.20-15.35
<i>Skliarova K. D., Haidar V. I., Zinin V. V., Polishchuk Yu. V., Mchedlov-Petrosyan N. O.</i> Colloidal stability and coagulation of graphene dispersions in water and organic solvents.....	15.35-15.50
<i>Бабай А. В., Гога С. Т., Чейнеш Т. О.</i> Вплив електролітів різної природи на колоїдні властивості аргентум еритрозинату у водних розчинах	15.50-16.05
<i>Довбня А. А., Водозазька Н. О.</i> Взаємодія нейтрального червоного з міцелами катіонних ПАВ та її вплив на pK_a : оцінювання констант зв'язування.....	16.05-16.20
<i>Ловчицька В. С., Ковалшин Я. С.</i> Полімеризація аніліну в присутності немодифікованого та модифікованого графіту.....	16.20-16.35
<i>Минка А. О., Єфімов П. В.</i> Аналіз волюмометричних властивостей водно-органічних розчинників.....	16.35-16.50

СЕКЦІЇ

Неорганічна та Аналітична хімія

<i>Stovba Y. A., Chudak D. M.</i> Radical-anion tenq salts based on benzothiazole derivatives: synthesis and properties	12
<i>Андріюшкевич Є. А., Полтавець В. В.</i> Розробка мікрофлюїдної системи типу lab-on-a-chip для амперометричного аналізу H_2O_2 на основі MnO_2 електродів.....	13
<i>Беляєв А. М., Шафорост Ю. А.</i> Дослідження вибухових речовин методом ТШХ за методикою ATF USA (США).....	15
<i>Гуріна Г. І., Білик Г. В., Лиска А. С.</i> Синтез гібридних пігментів на основі бентоніту та поліметинових барвників.....	17
<i>Блашко Н. М., Марчук О. В.</i> Фазові взаємодії у системах $\text{La}_2\text{Se}_3 - \text{In}_2\text{Se}_3 - \text{SiSe}_2$ та $\text{Pr}_2\text{Se}_3 - \text{Ga}_2\text{Se}_3 - \text{SiSe}_2$ за температури 770 К.....	19
<i>Васильків О. М., Ридчук П. В., Пацай І. О., Тимошук О. С.</i> N-[феніл(піридин-2іл)метиліден]гідроксиламін – фотометричний реагент для визначення кобальту	21
<i>Іванова А. О., Ридчук П. В.</i> Використання 3-(2-гідрокси-нафтален-1-іл-азо)-1-метил-1Н-піразол-4-етилкарбоксилату для фотометричного визначення цинку.....	22
<i>Козачук М. О., Микитин І. М., Прокіпчук І. В.</i> Порівняльний аналіз екстракції кофеїну з зеленого та чорного чаю залежно від умов заварювання.....	23
<i>Кочура Є. К., Большанина С. Б.</i> Дослідження вмісту органічного вуглецю у ґрунтах, що зазнали впливу бойових дій.....	24
<i>Красіцька А. М., Дармонук О. Т., Шпирка З. М., Кордан В. М., Павлюк В. В.</i> Синтез та електрохімічні властивості фаз $\text{Y}_{5-x}\text{Dy}_x\text{Ge}_3$, $\text{Y}_{5-x}\text{Sm}_x\text{Ge}_3$ та $\text{Ho}_{1-x}\text{Lu}_x\text{Ge}_2$	26
<i>Лесько Ю. Ю., Горин М. М., Логойда Л. С.</i> Розробка хроматографічної методики одночасного визначення левофлорсацину та міноцикліну	28
<i>Леднєй Р. Р., Донченко А. О., Васюк С. О.</i> Спектрофотометричне визначення метопрололу тартрату в таблетках.....	30
<i>Максименко Д. Д., Юрченко О. І.</i> Атомно – абсорбційне визначення аналітів в дитячому харчуванні, косметичних препаратах, засобах гігієни та водах.....	31
<i>Максимів Т. В., Ридчук П. В., Пацай І. О., Тимошук О. С.</i> Спектрофотометричне визначення Купруму з використанням N-[феніл(піридин-2іл)метиліден]гідроксиламіну	33
<i>Мечик П. О., Щеглов О., Кусяк А., Петрановська А., Горбик П.</i> Магніточутливий наноккомпозит на основі дибензо-18-краун-6 етеру	34
<i>Михальська А. А., Горин М. М., Логойда Л. С.</i> Розробка екологічної ВЕРХ методики визначення моксифлорсацину в ЛЗ.....	36

<i>Осипов А. В., Ханін В. А., Юрченко О. І.</i> Атомно-емісійне з індуктивно зв'язаною плазмою визначення міді, заліза, свинцю та цинку в фармацевтичних субстанціях	37
<i>Попенко Р., Христенко І., Іванов В.</i> Експериментальні та теоретичні дослідження спектральних властивостей люмінолу	38
<i>Саєнко Л. Д., Тереміленко К. В., Слободяник М. С.</i> Вплив молібдат– та вольфрамат– йону на будову, люмінесценцію та області склоутворення у фосфатно-боратних системах	40
<i>Слободенюк К. С., Коркуна О. Я.</i> Оптимізація умов реакції азосполучення цефепіму з орто-ваніліном для отримання ефективних аналітичних форм антибіотика	42
<i>Тарадайка В. А., Беляєв А. М., Шафорост Ю. А.</i> Визначення вмісту $w(\%)$ FeSO_4 у зразку залізного купоросу методом потенціометричного титрування	43
<i>Терпелюк І. С., Знов'як К. О., Амірханов В. М., Середюк М. Л.</i> Супрамолекулярна організація та спіновий перехід у псевдооктаедричному комплексі заліза(II) з бензофуран-вмісним лігандом	45
<i>Федяй В. Д., Гуцул Х. Р., Кирій С. О.</i> Диференційоване визначення іонів заліза у воді за допомогою портативного крапельного методу	47
<i>Чемна Х. І., Логойда Л. С., Рудюк В. В.</i> Аналітичне забезпечення контролю чистоти афі інозину пранобекс за показником «залишкові розчинники» ..	49
<i>Шевченко І. Р., Юрченко О. І., Бакланов О. М.</i> Надвисокочастотний ультразвук у визначенні вмісту свинцю та кадмію у молокопродуктах	51
<i>Штефан С. О., Осипов А. В., Юрченко О. І.</i> Атомно-абсорбційне визначення міді, цинку, свинцю та заліза в фармацевтичних субстанціях	53
<i>Яворська Х. Д., Горин М. М., Логойда Л. С.</i> Розробка ВЕРХ методики одночасного визначення лізиноприлу та амлодипіну в лікарських засобах	54

Органічна хімія

<i>Sham V. A., Borysov O. V., Mykhailiuk P. K.</i> New chemical reaction – gem-difluorinative ring expansion of alkenes	56
<i>Ващенко А. П., Колосова О. С., Власенко Г. С., Чернишова О. С., Кривошей О. І., Татарець А. Л.</i> Йодовані гептаметинові ціанінові барвники як фотосенсибілізатори для антимікробної фотодинамічної терапії в ближній інфрачервоній області	58
<i>Демчук О. П., Ляшук О. С., Готинчан А. Г., Трачова В. В., Грищук О. В., Григоренко О. О.</i> Флуородеборилування як новий метод одержання вінілфлуоридів	60
<i>Давтян А. С., Левченко О. О.</i> Порівняння каталітичної активності кислотномодифікованих алюмосилікатів в ацеталізації гліцерину бензальдегідом .	62

<u>Клименко Д. С., Оліфір О. С., Черних А. В., Ляшук О. С., Григоренко О. О.</u> Синтез та дослідження фізико-хімічних параметрів будівельних блоків на основі 6-(трифлуорометил)спіро[3.3]гептану	64
<u>Потапчук М. О., Корнієнко І. С., Свердліковська О. С.</u> Димерні іонні рідини як перспективний клас сполук для створення функціональних композицій.....	66
<u>Коробка А. Ю., Збруєв О. І., Чебанов В. А.</u> Дослідження комплексоутворення етил 5-метил-4,7-дигідро-[1,2,4]триазоло[1,5-а]піримідин-6-карбоксилату (ДНР) з модифікованими β- та γ-циклодекстринами.....	68
<u>Кравчук О. Ф., Коробка О. П., Горбаточкін Ю. О., Колос Н. М.</u> Багатокомпонентний синтез N-заміщених 1,5,6,7- тетрагідро-4н-індол-4-онів.....	70
<u>Криворучко А. Р., Кут Д. Ж., Кут М. М.</u> Регіоселективність галогенування 4-(бут-3-ен-1-ілокси)-5,6-диметил-2-(тіофен-2-іл)тієно[2,3-d]піримідину. 72	
<u>Нечесний Я. І., Кемський С. В., Вовк М. В.</u> 1,2,3,4-тетрагідропіроло[1,2-а]піразин-7-карбоксилати/карбонові кислоти: синтез та структурні модифікації.....	73
<u>Помалін М. С., Гись В. Ю., Мілохов Д. С., Добридень О. В., Воловенко Ю. М.</u> Синтез та властивості бензо[d][1,2]тіазепін-3-оксидів	75
<u>Потапчук М. О., Свердліковська О. С.</u> Димерні іонні рідини на основі тетрагідро-1,4-оксазину як перспективні функціональні матеріали.....	77
<u>Рашевський А. С., Чебанов В. А., Тімохін О. С., Кучер О. В., Москвіна В. С.</u> Синтез та ензиматичне розділення 2-флуоралкілзаміщених хроман-4-олів	79
<u>Романюк Ю. Р., Костик О. А., Будішевська О. Г.</u> Катіонний крохмаль для осадження бичачого сироваткового альбуміну	82
<u>Семьошкіна О. Д., Якубовський В. П., Мельников К. П., Ляшук О. С., Григоренко О. О.</u> Синтез та модифікація функціоналізованих 2,3-дигідрохінолін-4(1H)-онів.....	84
<u>Сніжко А. Д., Гладков Є. С., Чепелева Л. В., Кириченко О. В.</u> Синтез та фотофізичні властивості нових похідних 3-гідроксифлавону з подовженим полієновим ланцюгом.....	86
<u>Горобець М. Ю., Терещенко А. Ю.</u> Синтез 5,10,15,20-тетра(піридин-3-іл)-хлорину, виходячи з 5,10,15,20-тетра(піридин-3-іл)-порфірину.....	88
<u>Федякіна Н. А., Полтавець В. В.</u> Розробка ферментативного біосенсора на основі діоксиду мангану для кількісного визначення глюкози в мікрофлюїдному чипі.....	89

Фізична хімія

<i>Anokhin D. O., Panteleimonov A. V., Ivanov V. V.</i> Use of fuzzy linear regression in QSAR-problems.....	92
<i>Dikarieva K. S., Koverga V., Kalugin O. N.</i> Polarizability effects on microstructure and dynamics of LiFSI/DME electrolyte	94
<i>Курпа М. О., Іванов В. В.</i> Novel shape and dimensionality descriptors of molecular orbitals.....	96
<i>Morozova V. O., Kyrychenko A. V.</i> Benchmarking openfe for relative binding free energy predictions: a case study on JAK1 inhibitors	98
<i>Prud M. V., Kyrychenko A. V.</i> From docking scores to free energies: relative binding free energy in OpenFE	100
<i>Skliarova K. D., Haidar V. I., Zinin V. V., Polishchuk Yu. V., Mchedlov-Petrosyan N. O.</i> Colloidal stability and coagulation of graphene dispersions in water and organic solvents	102
<i>Sokoliuk D. R., Maruzhenko O. V., Misiura A. I., Mamunya Ye. P.</i> Thermal analysis of PVB-based films formed by solution casting technique.....	104
<i>Бабай А. В., Гога С. Т., Чейнеш Т. О.</i> Вплив електролітів різної природи на колоїдні властивості аргентум еритрозинату у водних розчинах	105
<i>Довбня А. А., Водолазька Н. О.</i> Взаємодія нейтрального червоного з міцелами катіонних ПАР та її вплив на pK_a : оцінювання констант зв'язування	107
<i>Ловчицька В. С., Ковалишин Я. С.</i> Полімеризація аніліну в присутності немодифікованого та модифікованого графіту	109
<i>Минка А. О., Єфімов П. В.</i> Аналіз волюмометричних властивостей водно-органічних розчинників.....	111
<i>Плотнікова І. В., Єльцов С. В.</i> Особливості перебігу деяких реакцій в розчинах, що використовуються в демонстраційному кінетичному експерименті.....	112

НЕОРГАНІЧНА ТА АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ

RADICAL-ANION TCNQ SALTS BASED ON BENZOTHAZOLE DERIVATIVES: SYNTHESIS AND PROPERTIES.

Stovba Y. A., Chudak D. M.

V. N. Karazin Kharkiv National University

stovbayar06@gmail.com

Nowadays, chemical sensors are important part of monitoring environment on the amount of toxic gas emissions and other hazardous substances. One of the multifunctional materials used in chemical sensors is radical-anion salts (RAS). The electrical and magnetic properties of RAS based on 7,7,8,8-tetracyanoquinodimethane (TCNQ) are of particular interest. This research work proposes a new series of synthesized TCNQ-based RAS.

TCNQ is a strong π -electron acceptor and has a highly delocalized electronic structure, which facilitates electron transfer and magnetically coupled interactions via π - π interactions along the crystal stacking direction of the RAS.

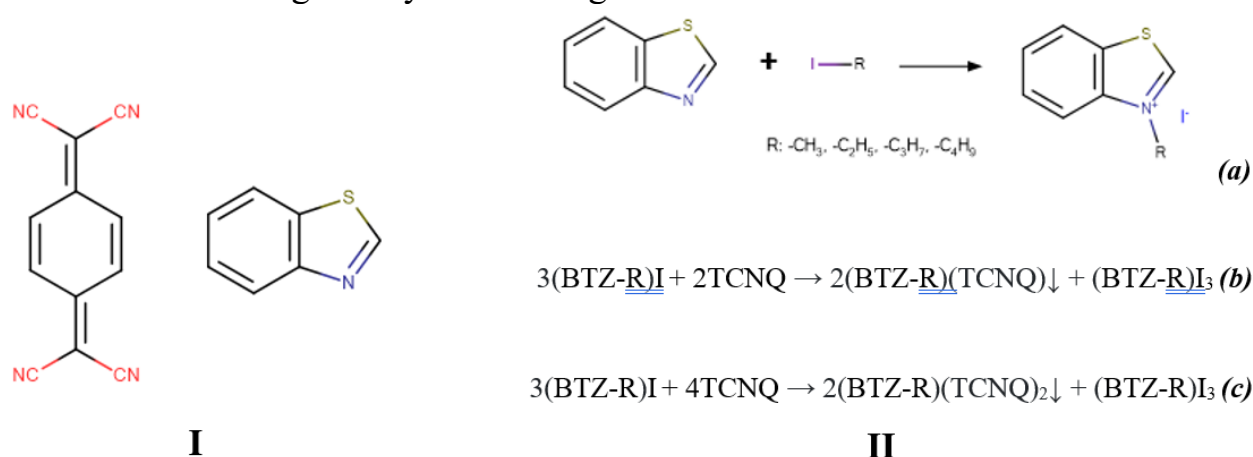


Fig. 1. I – The structures of precursors. II – Scheme of reactions for the synthesis of the compounds (a - Quaternary salts, b and c – simple and complex salts)

In this study, new RAS were synthesized based on the aromatic heterocyclic compound benzothiazole (BTZ) with alkyl derivatives. Syntheses were done for receiving simple and complex salts (Fig. 2-II(b, c)).

Firstly, quaternary salts were obtained from BTZ interacting with alkyl iodides. (Fig.2-II(a)). Then simple salts (1-1) were synthesized by reaction between quaternary salt and TCNQ in acetonitrile (CH₃CN) (Fig.2-II(b)). The synthesis of complex salts (2-1) was conducted similarly to the synthesis of simple salts, but with another ratio of reagents (Fig. 2-II(c)).

The composition of the synthesized simple and complex salts was confirmed by spectrophotometry. The resulting precipitates had either an amorphous or crystalline structure. The electrical conductivity of the resulting salts was also investigated.

РОЗРОБКА МІКРОФЛЮЇДНОЇ СИСТЕМИ ТИПУ LAB-ON-A-CHIP ДЛЯ АМПЕРОМЕТРИЧНОГО АНАЛІЗУ H_2O_2 НА ОСНОВІ MnO_2 ЕЛЕКТРОДІВ

Андрюшкевич Є. А., Полтавець В. В.

Дніпровський державний медичний університет

lizaand2007@gmail.com

Мета роботи полягає у розробці прецизійної методики вольтамперометричного визначення пероксиду водню в біологічних зразках з використанням мікрофлюїдного біосенсора [1]. Вибір H_2O_2 як цільового аналіту зумовлений його роллю ключового маркера антиоксидантної системи організму та універсального посередника у метаболічних перетвореннях, що має критичне значення для діагностики онкологічних та запальних процесів.

Ми використовуємо наноструктурований MnO_2 як специфічний та економічно ефективний каталізатор розкладання H_2O_2 , що є альтернативою дороговартісним системам на основі наночастинок золота (Au) [2]. Обмежене використання марганцевих електродів у проточних системах зумовлене специфікою механізму формування аналітичного сигналу та ризиком деградації активного шару. У даній роботі цю проблему вирішено шляхом розробки та оптимізації методики зупиненого потоку (stop-flow), яка забезпечує стабільність медіатора та високу відтворюваність результатів при аналізі складних біологічних матриць.

Мікрофлюїдний пристрій реалізовано у вигляді ПДМС-матриці (полідиметилсилоксан) з системою Т-подібних каналів (переріз 250×500 мкм) та двома входами для маніпуляції потоками робочих розчинів. Прецизійний контроль гідродинамічних параметрів здійснювався за допомогою насосної системи *Nemesys*. ПДМС-блок герметично поєднано зі скляною підкладкою, на якій сформовано трьохелектродну систему: робочий електрод на основі ІТО (оксиду індію-олова, опір 6–8 Ом/кв, товщина ~ 185 нм, *Biotain Crystal Co.*) (ширина 2 мм), графітовий допоміжний електрод та хлорсрібний електрод порівняння. Електрохімічні вимірювання проводили в амперометричному режимі при накладанні сталого робочого потенціалу +0,45 В (відн. Ag/AgCl). Використання мікрофлюїдики дозволило досягти значного посилення аналітичного сигналу завдяки гідродинамічному ефекту подачі аналіту до малої активної площі електрода, що забезпечило можливість детекції мікромольних концентрацій H_2O_2 .

Під час апробації системи було виявлено деградацію сенсорного шару: навіть при низьких швидкостях потоку (20 $\mu\text{l}/\text{s}$) відбувалося вимивання активної фази MnO_2 . Даний ефект зумовлений утворенням розчинних у воді проміжних сполук Mn^{3+} під час електрокаталітичного циклу. Механізм формування сигналу полягає у циклічному відновленні Mn^{4+} до Mn^{3+} при взаємодії H_2O_2 з подальшим електрохімічним окисненням мангану до вихідного стану. Нестабільність

поверхні перешкоджала виходу сигналу на стаціонарний стан, що унеможлиблювало побудову достовірних калібрувальних залежностей у проточному режимі. Вказаний недолік був нівельований переходом до розробленого протоколу stop-flow, що базується на реєстрації електрохімічного заряду Q у режимі зупиненого потоку. Суть методики полягає у фіксації інтегрального заряду, що проходить через електрод під час повного розкладання пероксиду водню, локалізованого в зоні сенсора після зупинки потоку аналіту.

На основі експериментальних даних встановлено оптимальний часовий регламент аналізу: промивання системи фосфатним буфером (200 с), подача H_2O_2 (30 с) та інкубація для проходження реакції (300 с) при сталій швидкості потоку 20 $\mu\text{л/с}$. Апробація методики проводилася на серії з 4-х електродів у діапазоні концентрацій пероксиду водню 5–40 $\mu\text{М}$. Отримані калібрувальні залежності ($Q = f(C_{H_2O_2})$) характеризуються високою лінійністю з коефіцієнтами кореляції від 0,96 до 0,99.

Важливою перевагою розробленої системи є можливість багаторазового використання скляної підкладки з ІТО. Встановлено, що після механічної деструкції використаного шару MnO_2 поверхня ІТО може бути повторно модифікована. Досвід експлуатації підтвердив стабільність характеристик підкладок протягом щонайменше 6 місяців при регулярному переосажденні каталізатора (раз на 1–2 тижні). Такий підхід суттєво знижує собівартість одиничного аналізу та відповідає принципам «зеленої хімії» завдяки мінімізації відходів.

[1] Guilhem Velve-Casquillas, Maël LeBerre, Matthieu Piel, Phong T. Tran, Microfluidic tools for cell biological research. *Nanotoday*, 2010, 5(1), 28-47 <https://doi.org/10.1016/j.nantod.2009.12.001>

[2] Dong, W.; Ren, Y.; Bai, Z.; Yang, Y.; Chen, Q. Fabrication of Hexahedral Au-Pd/Graphene Nanocomposites Biosensor and Its Application in Cancer Cell H_2O_2 Detection. *Bioelectrochemistry* 2019, 128, 274–282. <https://doi.org/10.1016/j.bioelechem.2019.04.018>.

ДОСЛІДЖЕННЯ ВИБУХОВИХ РЕЧОВИН МЕТОДОМ ТШХ ЗА МЕТОДИКОЮ ATF USA (США)

Бєляєв А. М., Шафорост Ю. А.

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

anton2007newernut@gmail.com

Вибухові речовини (ВР) – це клас речовин органічної та неорганічної природи, що при дії зовнішніх факторів розкладаються із утворенням газуватих продуктів [1]. У воєнний час на території України розповсюдження вибухових речовин стало проблемою, тому криміналісти запроваджують активне використання старих та запровадження нових методик дослідження. Тут приведено дослідження вибухових речовин за методикою ATF USA (США) для тонкошарової хроматографії (ТШХ), її апробацію, також визначено її переваги та недоліки в українських реаліях.

Дослідження (ВР) проводили методом тонкошарової хроматографії. Цей метод базується на здатності речовини до сорбції та десорбції при проходженні крізь шар сорбенту [2]. Основною характеристикою методу ТШХ є показник хроматографічної рухливості (R_f), що визначається такою формулою:

$$R_f = \frac{h_1}{h_0},$$

де h_1 – відстань, що пройшла речовина, см; h_0 – відстань, пройдена фронтом елюента, см.

Для роботи було використано хроматографічну пластинку TLC Silika gel 60 F₂₅₄, що мала алюмінієву основу. Хроматографування пластин відбувалося в двох системах елюентів: 1) ацетон : толуен : гексан (1:1:2); 2) бутилацетат : гексан (1:1). Виявлення хроматографічних зон відбувалося за допомогою розчину ДФА в етанолі та розчину концентрованої сульфатної (VI) кислоти (w(%) H₂SO₄ = 98). Об'єктами дослідження були розчини тротилу, ТЕНу, тетриллу, октогену та нітрогліцерину (НГ) в ацетоні.

Принцип визначення вмісту ВР за методикою ATF USA (США) заснований на взаємодії нітроорганічних сполук з дифеніламіном (ДФА) в присутності концентрованої сульфатної (VI) кислоти. Під час взаємодії утворюються сполуки, що мають яскраво-синє забарвлення. На рис.1 описаний процес взаємодії тринітротолуолу із ДФА.

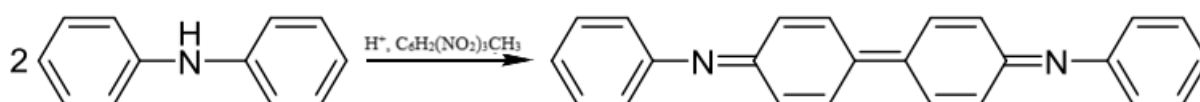


Рис. 1 Процес взаємодії тринітротолуолу із ДФА і середовищі концентрованої сульфатної кислоти

Результати значень R_f , отримані під час тонкошарової хроматографії наведені в таблиці 1.

Табл. 1 Значення R_f вибухових речовин

ВР	Забарвлення зон		Значення R_f	
	Обробка ДФА	Обробка H_2SO_4 (конц.)	Система 1 (1:1:2)	Система 2 (1:2)
Тротил	Помаранчеве	Синє	0,78	0,75
ТЕН	----	Синє	0,60	0,69
Гексоген	----	Синє	0,11	0,11
Тетрил	Жовте	Синє	0,42	0,32
Октоген	----	Синє	0,06	0,05
НГ	----	Синє	0,68	0,66

Примітка: Система 1* – ацетон : толуен : етилацетат; Система 2** – бутилацетат : гексан.

Проаналізувавши результати експерименту було визначено переваги та недоліки цієї методики. Переваги: швидкість виконання, дешевизна, універсальність у використанні будь-яких пластинок для ТШХ. Недоліки: використання сульфатної (VI) кислоти, що є агресивною речовиною, яка викликає опіки [3]. Дослідження вибухових речовин за методикою ATF USA (США) для ТШХ може використовуватися в українських воєнних реаліях, адже має ряд переваг, зазначених вище.

Дослідження, описане в цій роботі, було проведено на базі Черкаського НДЕКЦ МВС України. Беляєв А. щиро вдячний центру в допомозі виконання експериментальної частини роботи.

[1] AGRAWAL J.P., HODGSON R.D. Organic Chemistry of Explosives. Wiley, 2007. 384 p.

[2] Федорченко С. В., Курта С. А. Хроматографічні методи аналізу : навч. посіб. Івано–Франківськ: Прикарп. нац. ун–т ім. В. Стефаника, 2012. 146 с.

[3] Пасічник В. В., Шкурдода С. В. Аналіз ефективності найбільш поширених методик дослідження вибухових речовин (ВР) та продуктів вибуху методом тонкошарової хроматографії (ТШХ) Криміналістика і судова експертиза. 2016. № 58(2). С. 324-336.

СИНТЕЗ ГІБРИДНИХ ПІГМЕНТІВ НА ОСНОВІ БЕНТОНІТУ ТА ПОЛІМЕТИНОВИХ БАРВНИКІВ

Гуріна Г. І., Білик Г. В., Лиска А. С.

Харківський національний університет міського господарства ім. О.М. Бекетова

Galyna.Gurina@kname.edu.ua

Сучасні дослідження у галузі функціональних матеріалів спрямовані на створення стабільних, екологічно безпечних та високоефективних пігментів [1-3]. Особливу увагу привертають гібридні органо-неорганічні системи, сформовані на основі органічних барвників та мінеральних матриць, які не містять свинець у своєму складі, що актуально у зв'язку євроінтеграційними процесами в економіці України і заборонаю використання свинцевмісних пігментів у складі лакофарбових матеріалів [3]. Поліметинові барвники є одним з найпоширеніших класів синтетичних органічних барвників завдяки інтенсивному забарвленню, високій світлостійкості та широкому спектру застосувань. Водночас їх недоліками є низька термічна стабільність, розчинність та схильність до вимивання, що обмежує їх використання у вигляді пігментів. Одним із перспективних підходів до вирішення цієї проблеми є іммобілізація барвників у структурі шаруватого алюмосилікату монтморилоніту, що забезпечить стабілізацію молекул барвника та формування гібридних пігментних систем.

Метою цієї роботи є синтез гібридних пігментів на основі поліметинових барвників і монтморилоніту, дослідження їх властивостей та створення лакофарбових матеріалів із їх використанням. У роботі як органічні компоненти використовувалися барвники: тетраметил-4,4-діамінотрифенілметану хлорид - $C_{23}H_{25}ClN_2$, [9-(2-карбоксіфеніл)-6-діетиламіно-3-ксантеніліден]-діетиламоній хлорид - $C_{28}H_{31}ClN_2O_3$, тетраетил-4,4-діамінотрифенілметана оксалат - $C_{27}H_{34}N_2O_4$, що характеризуються наявністю катіонної хромофорної системи. Як неорганічну матрицю застосовано монтморилоніт, який характеризується розвиненою поверхнею та здатністю до іонного обміну. Синтез гібридних пігментів здійснювався інтеркаляційним методом із водних розчинів. Процес супроводжувався впровадженням молекул органічних барвників (інтеркалянтів) в міжшарові галереї неорганічної матриці. Синтез проводили в суспензії бентоніту у воді при співвідношенні 1:8 з додаванням водного розчину барвників при температурі 20 °С. Контролювали процес по зміні кольору бентоніту з наступними координатами кольору в колориметричній системі XYZ при використанні спектрофотометру NS800, джерела освітлення D_{65} : X=36,90; Y=46,00; Z=53,90 для $C_{27}H_{34}N_2O_4$; X=39,44; Y=47,87; Z=58,27 для $C_{23}H_{25}ClN_2$; X=46,00; Y=38,00; Z=35,00 для $C_{28}H_{31}ClN_2O_3$.

Для характеристики отриманих матеріалів застосовано методи ІЧ-спектроскопії (Specord IR-75), рентгенофазового аналізу (D-500, Siemens), електронної мікроскопії (ЕММА-2).

Отримані результати свідчать про ефективне закріплення молекул барвника у структурі алюмосилікатної матриці. Встановлено, що взаємодія між барвником і неорганічною матрицею реалізується завдяки донорно-акцепторній взаємодії. Подібний механізм взаємодії характерний для утворення інтеркаляційних систем.

Аналіз дифракційних даних підтверджує збільшення міжшарової відстані, що свідчить про інтеркаляцію молекул барвника. Зафіксовано зсув малокутових ліній на рентгенограмах інтеркальованої сполуки у бік малих кутів при інтеркаляції малахітового зеленого на 0,63 Å та 1,08 Å. Спектральні дослідження демонструють зсуви максимумів поглинання в ІЧ-області. Так, смуга при 3435,1 см⁻¹, що відповідає ν(OH) в спектрі бентоніту зсувається до менших хвильових чисел, а саме до 3400 см⁻¹, смуга ν (NR⁴⁺) з'являється при 3250 см⁻¹, що менше, ніж при 3400 см⁻¹ у спектрі малахітового зеленого. Досліджені зразки інтеркаляційних сполук за даними електронної мікроскопії мали розміри менше 100 нм.

Крім того, гібридні системи, що містять у своєму складі четвертинні амонійні солі, демонструють покращені тиксотропні та бактерицидні властивості, що відкриває можливості їх застосування не лише як пігментів, але й як функціональних добавок для тиксотропних і бактерицидних лакофарбових матеріалів.

Методом концентрованих паст одержано лакофарбову хімічно стійку емаль зеленого кольору при повній заміні пігментів на синтезовані в роботі безсвінцеві пігменти. Визначено властивості емалі та фізико-механічні властивості покриттів на її основі. Встановлено збільшення твердості покриттів з 0.2 до 0.25 ум. од. за маятниковим приладом типу ТМЛ, маятник типу А, (ДСТУ ISO 1522), стійкості покриттів до статичного впливу 25% розчину натрій гідроксиду з 12 до 15 год. при (60±2)°С (ДСТУ ISO 2812-1), при збереженні адгезії – 0 балів (ДСТУ ISO 4624), еластичності плівки при вигині - 1 мм (ДСТУ ISO 1519), міцності плівки при ударі за приладом У-1А -50 см (ДСТУ ISO 6272-2).

Таким чином, показано перспективність використання шаруватих алюмосилікатів як матриць для інтеркаляції поліметинових барвників. Отримані гібридні пігменти характеризуються покращеними експлуатаційними властивостями та можуть бути використані у екологічних технологіях лакофарбових матеріалів.

[1] A review of pretreatment and analytical methods for triphenylmethane dyes in environmental samples // Journal of Chromatography A, 2026.

[2] An organic cage-based adsorbent for removing triphenylmethane dyes // Journal of Environmental Chemical Engineering, 2025.

[3] Технічний регламент обмеження використання свинцю у лакофарбових матеріалах і сировинних компонентах <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/432-2021-%D0%BF#Text>

ФАЗОВІ ВЗАЄМОДІЇ У СИСТЕМАХ $\text{La}_2\text{Se}_3 - \text{In}_2\text{Se}_3 - \text{SiSe}_2$ ТА $\text{Pr}_2\text{Se}_3 - \text{Ga}_2\text{Se}_3 - \text{SiSe}_2$ ЗА ТЕМПЕРАТУРИ 770 К

Блашко Н. М., Марчук О. В.

Волинський національний університет імені Лесі Українки

Blashko.Nazarii@vnu.edu.ua

Актуальність вивчення складних халькогенідів на основі рідкісноземельних елементів (РЗЕ) зумовлена їхнім значним потенціалом для створення функціональних матеріалів із вираженими нелінійно-оптичними властивостями, зокрема для застосування в фотоніці, лазерній техніці та оптоелектроніці. Такі системи характеризуються широким спектром фізико-хімічних властивостей, що можуть цілеспрямовано модифікуватися шляхом варіювання складу та кристалічної структури. Аналіз квазітернарних систем $\text{R}_2\text{X}_3 - \{\text{Ga, In}\}_2\text{X}_3 - \text{D}^{\text{IV}}\text{X}_2$ ($\text{R} - \text{РЗЕ}$; $\text{D}^{\text{IV}} - \text{Si, Ge, Sn}$; $\text{X} - \text{S, Se}$) є ключовим етапом у встановленні загальних закономірностей фазових рівноваг, кристалохімії та умов утворення нових тетрарних сполук. Отримані результати сприяють не лише розширенню фундаментальних уявлень про взаємодію компонентів у багатокомпонентних халькогенідних системах, але й створюють наукове підґрунтя для прогнозування та цілеспрямованого синтезу матеріалів із заданими функціональними характеристиками.

Сплави квазітернарних систем синтезували з вихідних компонентів (простих речовин) високої чистоти ($\geq 99,99$ мас. %) у вакуумованих кварцових ампулах. Термічну обробку здійснювали в печі МП-30 за двостадійним режимом нагрівання (до температури 700 °С та до температури 1100 °С) із подальшим контрольованим охолодженням до 500 °С. Для досягнення фазової рівноваги зразки витримували за температури 500 °С впродовж 240 год, після чого піддавали гартуванню у воду кімнатної температури без розгерметизації контейнера.

Фазову приналежність зразків визначали методом рентгенофазового аналізу (РФА) у кутовому інтервалі 2Θ від 10 до 80°. Використання $\text{CuK}\alpha$ -випромінювання та пакету програмного забезпечення PowderCell [1] дало змогу зіставити експериментально отримані дифрактограми з розрахованими теоретичними моделями бінарних і тернарних сполук, що забезпечило коректну ідентифікацію фаз та точне визначення фазового складу досліджуваної системи. Додатково це дозволило оцінити наявність можливих домішкових фаз.

Ізотермічні перерізи квазітернарних систем $\text{La}_2\text{Se}_3 - \text{In}_2\text{Se}_3 - \text{SiSe}_2$ та $\text{Pr}_2\text{Se}_3 - \text{Ga}_2\text{Se}_3 - \text{SiSe}_2$ за температури 770 К наведено на рис. 1.

За температури відпалу сплавів у системі $\text{La}_2\text{Se}_3 - \text{In}_2\text{Se}_3 - \text{SiSe}_2$ встановлено існування трьох трифазних рівноваг $\{\text{La}_3\text{In}_{1,67}\text{Se}_7$ (ПГ $P6_3$) + $\text{La}_6\text{Si}_4\text{Se}_{17}$ (ПГ $P\bar{1}$)}, $\{\text{La}_3\text{In}_{1,67}\text{Se}_7$ (ПГ $P6_3$) + SiSe_2 (ПГ $Ibam$)} та $\{\text{SiSe}_2$ (ПГ $Ibam$) + $\text{La}_4\text{In}_{4,67}\text{Se}_{13}$ (ПГ $Pbam$)}, які триангулюють концентраційний трикутник і поділяють його на чотири трифазні області: $\{\text{La}_2\text{Se}_3$ (ПГ $I\bar{4}3d$) +

$\text{La}_3\text{In}_{1,67}\text{Se}_7$ (ПГ $P6_3$) + $\text{La}_6\text{Si}_4\text{Se}_{17}$ (ПГ $P\bar{1}$)}, $\{\text{SiSe}_2$ (ПГ $Ibam$) + $\text{La}_3\text{In}_{1,67}\text{Se}_7$ (ПГ $P6_3$) + $\text{La}_6\text{Si}_4\text{Se}_{17}$ (ПГ $P\bar{1}$)}, $\{\text{SiSe}_2$ (ПГ $Ibam$) + $\text{La}_3\text{In}_{1,67}\text{Se}_7$ (ПГ $P6_3$) + $\text{La}_4\text{In}_{4,67}\text{Se}_{13}$ (ПГ $Pbam$)} та $\{\text{In}_2\text{Se}_3$ (ПГ $P6_1$) + SiSe_2 (ПГ $Ibam$) + $\text{La}_4\text{In}_{4,67}\text{Se}_{13}$ (ПГ $Pbam$)}. Отримані результати свідчать про відсутність протяжних областей твердих розчинів у межах цієї системи.

За результатами РФА у системі $\text{Pr}_2\text{Se}_3 - \text{Ga}_2\text{Se}_3 - \text{SiSe}_2$ встановлено існування двох квазібінарних перерізів $\{\text{Pr}_3\text{Ga}_{1,67}\text{Se}_7$ (ПГ $P6_3$) + $\text{Pr}_3\text{Si}_{1,25}\text{Se}_7$ (ПГ $P6_3$)} та $\{\text{Ga}_2\text{Se}_3$ (ПГ $F\bar{4}3m$) + $\text{Pr}_3\text{Si}_{1,25}\text{Se}_7$ (ПГ $P6_3$)}, які діляють концентраційний трикутник на три трифазні області: $\{\text{Pr}_2\text{Se}_3$ (ПГ $I\bar{4}3d$) + $\text{Pr}_3\text{Ga}_{1,67}\text{Se}_7$ (ПГ $P6_3$) + $\text{Pr}_3\text{Si}_{1,25}\text{Se}_7$ (ПГ $P6_3$)}, $\{\text{Ga}_2\text{Se}_3$ (ПГ $F\bar{4}3m$) + $\text{Pr}_3\text{Ga}_{1,67}\text{Se}_7$ (ПГ $P6_3$) + $\text{Pr}_3\text{Si}_{1,25}\text{Se}_7$ (ПГ $P6_3$)} та $\{\text{Ga}_2\text{Se}_3$ (ПГ $F\bar{4}3m$) + SiSe_2 (ПГ $Ibam$) + $\text{Pr}_3\text{Si}_{1,25}\text{Se}_7$ (ПГ $P6_3$)}. Така схема фазових співвідношень також вказує на чітку стабілізацію тернарних сполук без формування складніших фазових утворень.

У досліджених системах тетрарні сполуки не утворюються, а розчинність на основі вихідних компонентів і тернарних фаз є практично відсутньою, що свідчить про обмежений характер взаємної розчинності та чітко виражену фазову сегрегацію.

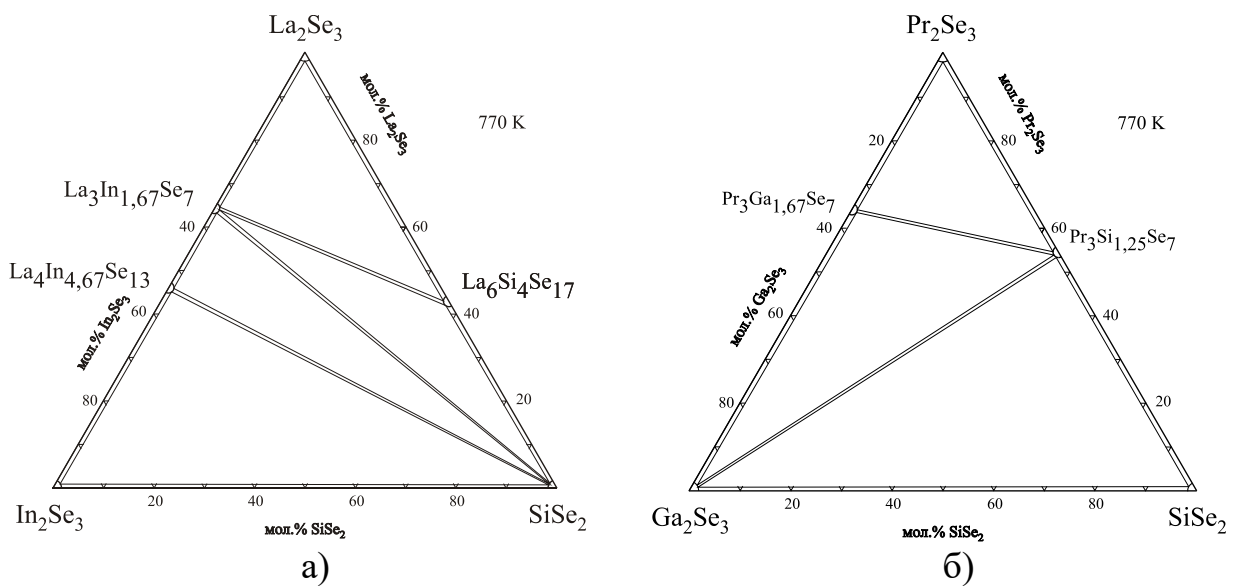


Рис. 1. Ізотермічні перерізи систем $\text{La}_2\text{Se}_3 - \text{In}_2\text{Se}_3 - \text{SiSe}_2$ та $\text{Pr}_2\text{Se}_3 - \text{Ga}_2\text{Se}_3 - \text{SiSe}_2$ побудовані за температури 770 К

[1] Kraus W., Nolze G. POWDER CELL – a program for the representation and manipulation of crystal structures and calculation of the resulting X-ray powder patterns. *J. Appl. Cryst.* 1996, 29(3), 301-303.

**N-[ФЕНІЛ(ПІРИДИН-2іл)МЕТИЛІДЕН]ГІДРОКСИЛАМІН –
ФОТОМЕТРИЧНИЙ РЕАГЕНТ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ КОБАЛЬТУ**

Васильків О. М., Ридчук П. В., Пацай І. О., Тимошук О. С.

Львівський національний університет імені Івана Франка

olha.vasylkiv@lnu.edu.ua

Розширене використання літій-іонних акумуляторів у різноманітних галузях промисловості, насамперед внаслідок російської агресії, збільшило попит на такий елемент як кобальт. Поряд з цим, шкідливий вплив надлишкових кількостей сполук кобальту на організм людини, який проявляється в ураженні серця, легень та нирок, робить актуальним завдання моніторингу вмісту цього елемента у поверхневих водах, ґрунтах та продуктах харчування. Найбільш ефективним вирішенням такого завдання є розробка надійних, чутливих та експресних методик визначення вмісту кобальту в об'єктах довкілля, щоб вчасно вжити необхідних заходів і попередити можливе отруєння місцевого населення. Розробка саме спектрофотометричних методик визначення кобальту є найбільш вдалим підходом для вирішення поставленого завдання, позаяк метод спектрофотометричного аналізу є одним з найбільш економічно доступних, експресних та простих в плані апаратурного забезпечення. Використання ж чутливих та селективних органічних аналітичних реагентів додатково покращить хіміко-аналітичні характеристики методик фотометричного визначення кобальту.

Для розробки чутливої та селективної методики запропонований органічний реагент N-[феніл(піридин-2іл)метиліден]гідроксиламін, який утворює з кобальтом комплексну сполуку жовтого кольору. Методом молярних відношень встановлено, що співвідношення метал:ліганд в утвореному комплексі відповідає складу CoL_2 . Встановлено, що в середовищі універсального буферного розчину з рН 7,0, а також за наявності аскорбінової кислоти (реагент вводять для стабілізації іона $Co(II)$) забарвлена сполука є стійкою впродовж тривалого часу. Розроблена методика є простою у виконанні, експресною та не вимагає додаткового концентрування з використанням токсичних органічних розчинників. Межі лінійності аналітичного сигналу розробленої методики перевищують один концентраційний порядок, при цьому розрахована межа визначення дорівнює 97 нг/мл. За оптимізованих умов спектрофотометричному визначенню кобальту з використанням запропонованого органічного реагента не заважають значні концентраційні надлишки іонів $Ca(II)$, $Sr(II)$, $Ba(II)$, $Mg(II)$, $Cu(II)$, $Al(III)$, $Zn(II)$, $Cd(II)$, $Pb(II)$, $Cr(III)$ та $Mn(II)$. Заважаючий вплив проявляють співмірні кількості іонів $Ni(II)$. Зважаючи на хіміко-аналітичні характеристики розробленої методики, її цілком можна рекомендувати для моніторингу вмісту кобальту в об'єктах довкілля.

ВИКОРИСТАННЯ 3-(2-ГІДРОКСИ-НАФТАЛЕН-1-ІЛ-АЗО)-1-МЕТИЛ-1Н-ПІРАЗОЛ-4-ЕТИЛКАРБОКСИЛАТУ ДЛЯ ФОТОМЕТРИЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ЦИНКУ

Іванова А. О., Ридчук П. В.

Львівський національний університет імені Івана Франка

amina.ivanova@lnu.edu.ua

Цинк є важливим біогенним елементом: його біохімічна функція полягає у діяльності різних металоферментів та активації металоферментних комплексів. Зараз відомо близько двадцяти цинквмісних ферментів, без яких неможливий гідроліз білків, полісахаридів, ліпідів та інших біологічно важливих органічних речовин. Дія цинку в рослинному організмі пов'язана з перетворенням сульфгідрильних груп, які мають велике значення у регулюванні окисно-відновних процесів. Добова потреба людини в цинку складає орієнтовно 15 мг. При цьому дефіцит цинку викликає уповільнення росту, розлад статевої функції, скорочення тривалості життя. Встановлено, що цинк необхідний для підтримки нормальної концентрації плазми. Порушення обміну цинку в організмі людини пов'язано також з такими хворобами, як лейкомія, атеросклероз, ендемічний зоб тощо. Натомість також є велика кількість даних, які свідчать про те, що підвищений вміст цього металу в організмі спричиняє канцерогенну дію. Отож, експресний моніторинг вмісту цинку в продуктах харчування є одним з важливих завдань для забезпечення здоров'я людей.

Спектрофотометричний метод аналізу володіє безперечною перевагою в плані простоти та експресності визначення, натомість використання нових гетероциклічних азореагентів дає змогу значно покращити чутливість фотометричних методик. Для розробки спектрофотометричної методики аналітичного контролю вмісту цинку в об'єктах довкілля запропоновано піразолілазобарвник 3-(2-гідрокси-нафтален-1-іл-азо)-1-метил-1Н-піразол-4-етилкарбоксилат (КЕМПАН). Встановлені оптимальні умови максимального виходу забарвленого комплексу цинку з КЕМПАН: природа буферного розчину, інтервал рН існування комплексу, надлишок органічного реагента, а також співвідношення вода-етанол у досліджуваному розчині, останнє пов'язане з малою розчинністю аналітичної форми у водних розчинах. Методом молярних відношень встановлено, що у забарвленому комплексі один іон цинку координується з двома молекулами азобарвника. Найбільш імовірно, що координування відбувається за участю азогрупи та гідроксогрупи нафтолу з утворенням шестичленного циклу. В оптимізованих умовах розроблено чутливу ($LOD = 40,3$ нг/мл), просту у виконанні та експресну методику фотометричного визначення цинку. Інтервал лінійності аналітичного сигналу перевищує один концентраційний порядок.

ПОРІВНЯЛЬНИЙ АНАЛІЗ ЕКСТРАКЦІЇ КОФЕЇНУ З ЗЕЛЕНОГО ТА ЧОРНОГО ЧАЮ ЗАЛЕЖНО ВІД УМОВ ЗАВАРЮВАННЯ

Козачук М. О., Микитин І. М., Прокіпчук І. В.

Карпатський національний університет імені Василя Стефаника

marianna.kozachuk.22@pnu.edu.ua

Кофеїн є одним із ключових біологічно активних компонентів чаю, що визначає його фізіологічний ефект та органолептичні властивості. Ефективність екстракції кофеїну суттєво залежить від умов заварювання, зокрема температури, тривалості та фізико-хімічних характеристик сировини.

Об'єктами дослідження були зразки чорного та зеленого чаю промислового виробництва. Водні настої готували з використанням 1,5 г зеленого чаю та одного пакетика чорного чаю на 100 мл дистильованої води при температурі ~90 °С. Заварювання проводили протягом 2, 5 і 10 хвилин для дослідження кінетики екстракції. Для підвищення точності визначення кофеїну застосовували рідинно-рідинну екстракцію етилацетатом. Процес здійснювали у ділильній лійці шляхом триразового екстрагування з подальшим об'єднанням органічних фаз. Після екстракції визначали концентрацію кофеїну методом УФ-спектрофотометрії при 270 нм із використанням калібрувального графіка.

У таблиці 1 наведено концентрації кофеїну у водних настоях чорного та зеленого чаю залежно від часу заварювання.

Табл. 1. Результати дослідження

Час заварювання, хв	Концентрація кофеїну у чорному чаї, мг/мл	Концентрація кофеїну у зеленому чаї, мг/мл
2	1,4	0,93
5	2,2	2,53
10	7,33	6,0

Встановлено пряму залежність між часом заварювання та концентрацією кофеїну у водних екстрактах чорного і зеленого чаю. Максимальні концентрації кофеїну досягнуті при 10 хвилин заварювання і становлять 7,33 мг/мл для чорного та 6,0 мг/мл для зеленого чаю. Чорний чай характеризується вищою ефективністю екстракції кофеїну, що зумовлено впливом ферментаційної обробки на структуру сировини.

Отримані результати узгоджуються з літературними даними [1], що підтверджує адекватність застосованої методики.

[1] Ayakdaş G., Ağagündüz D. Determination of L-Theanine and Caffeine Contents in Tea Infusions with Different Fermentation Degrees and Brewing Conditions Using the Chromatographic Method. *Foods*. 2025. Vol. 14, no. 13. P. 2313. <https://doi.org/10.3390/foods14132313>

ДОСЛІДЖЕННЯ ВМІСТУ ОРГАНІЧНОГО ВУГЛЕЦЮ У ГРУНТАХ, ЩО ЗАЗНАЛИ ВПЛИВУ БОЙОВИХ ДІЙ

Кочура Є. К., Большаніна С. Б.

Сумський державний університет

kochuraelizaveta3004@gmail.com

Актуальність дослідження зумовлена значним антропогенним навантаженням на природні екосистеми внаслідок бойових дій. Воєнні дії супроводжуються руйнуванням інфраструктури, вибухами боєприпасів, переміщенням військової техніки та виникненням пожеж, що призводить до порушення структури ґрунтового покриву та зміни його фізико-хімічних властивостей. Особливо важливим показником стану ґрунтів є вміст органічного вуглецю, який характеризує біологічну активність ґрунту та його здатність до відновлення після техногенного впливу.

Метою дослідження було визначення вмісту органічного вуглецю у ґрунтах територій, що зазнали впливу бойових дій, та аналіз варіації цього показника у відібраних пробах.

Об'єктом дослідження виступали зразки ґрунту, відібрані на територіях, що зазнали механічного та хімічного впливу внаслідок бойових дій. Предметом дослідження є вміст органічного вуглецю у ґрунтовому покриві. Визначення вмісту органічного вуглецю проводилось відповідно стандартних аналітичних методів дослідження ґрунтів [1].

Дослідний матеріал ми відібрали з воронок від FPV – дрону, реактивної системи залпового вогню (РСЗВ) типу «Град» та від керованої авіабомби (КАБ). З кожної вирви відбиралася верхня, частина шару ґрунту, бо саме верхня частина ґрунту є родючою, і саме вона зазнає найбільший вплив при ураженні. Для порівняння одержаних даних було також відібрано й контрольний зразок ґрунту – з неушкоджених ділянок з того самого поля. У ході експерименту було проаналізовано шість ґрунтових проб: 1а, 1б, 1в, 4а, 4б, 4в. Зразки ґрунтів відбиралися з неушкоджених ділянок – позначені номерами 1, та з ділянок які зазнали вплив військових дій – позначені номерами 4. Буквами позначені зразки ґрунтів, які потрапили під вплив конкретного озброєння, а саме: а – FPV – дрону; б – РСЗВ; в – КАБ. Результати проведених досліджень представлені на Рис. 1.

Найбільше зниження показника зафіксовано у зразках, відібраних із зон ураження FPV-дронами та керованими авіаційними бомбами (КАБ), де втрати органічного вуглецю можуть сягати 40–50 % відносно контрольних значень. У випадку впливу реактивних систем залпового вогню (РСЗВ) зниження є дещо меншим і становить орієнтовно 20–30 %, що може бути пов'язано з менш інтенсивним локальним термічним впливом.

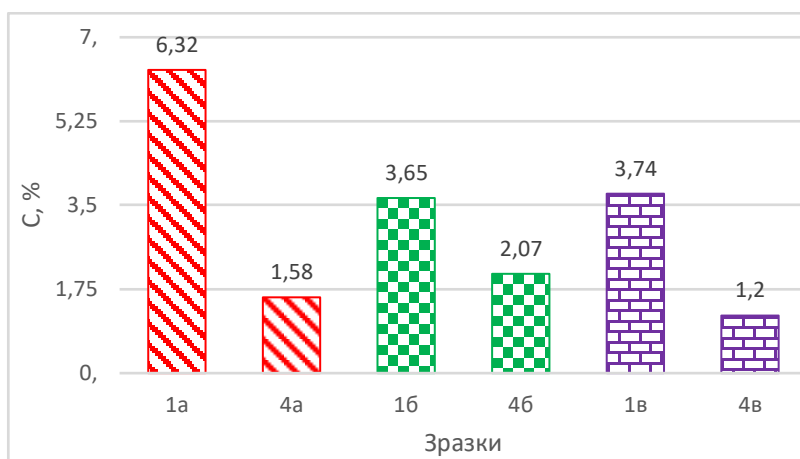


Рис. 1. Порівняльний вміст органічного вуглецю у пробах ґрунту, що зазнали впливу бойових дій.

Зменшення вмісту органічного вуглецю пояснюється термічним руйнуванням гумусових речовин, механічним порушенням ґрунтового профілю та зниженням біологічної активності. Додатково встановлено варіацію показників між паралельними зразками, яка не перевищує 10–15 %, що свідчить про природну неоднорідність ґрунтового покриву та локальні особливості впливу вибухових процесів.

Отримані кількісні результати підтверджують, що органічний вуглець є чутливим індикатором деградації ґрунтів і може використовуватись для оцінювання ступеня їх техногенного порушення.

Таким чином, проведене дослідження демонструє, що бойові дії можуть суттєво змінювати біогеохімічні характеристики ґрунтів, зокрема вміст органічного вуглецю. Отримані результати підкреслюють необхідність систематичного екологічного моніторингу територій, що зазнали впливу військових дій, а також розроблення ефективних заходів щодо рекультивації та відновлення ґрунтового покриву. Такі дослідження є важливою складовою оцінювання екологічних наслідків воєнних конфліктів і забезпечення сталого відновлення природних екосистем.

[1]. ДСТУ Б В.2.1-16:2009 Ґрунти. Методи лабораторного визначення вмісту органічних речовин.- К.:Мінрегіонбуд України, 2010.-12 с.

СИНТЕЗ ТА ЕЛЕКТРОХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ФАЗ $Y_{5-x}Dy_xGe_3$, $Y_{5-x}Sm_xGe_3$ ТА $Ho_{1-x}Lu_xGe_2$

Красіцька А. М., Дармонук О. Т., Шпирка З. М., Кордан В. М., Павлюк В. В.

Львівський національний університет імені Івана Франка

anna.krasitska@lnu.edu.ua

Сучасні хімічні джерела електричної енергії (ХДЕЕ), зокрема літій-іонні системи, потребують нових електродних матеріалів із вищою питомою ємністю, високою структурною стабільністю та швидкою дифузією літію. У зв'язку з цим актуальною залишається проблема пошуку альтернативних матеріалів, здатних ефективно акумулювати літій без руйнування вихідної кристалічної структури та з великою сорбційною ємністю.

Однією з перспективних груп таких матеріалів є інтерметалічні сполуки, що утворюються внаслідок хімічної взаємодії металів між собою, а також із напівметалічними елементами. Вони становлять основу багатьох функціональних матеріалів нового покоління та можуть бути використані як електродні матеріали літій-іонних і металогідридних акумуляторів. Відомо, що електродні матеріали на основі інтерметалідів у процесі інтеркаляції літію зазнають структурних змін, пов'язаних із деформаційними процесами [1, 2]. Основними вимогами до таких матеріалів є наявність тетраедричних і октаедричних пустот, достатніх для процесу інтеркаляції–деінтеркаляції, збереження кристалічної структури вихідного матеріалу та висока сорбційна ємність. Важливим чинником також є хімічна інертність електродів стосовно електроліту під час пропускання електричного струму [1].

Метою роботи є дослідження механізму інтеркаляції літію в інтерметалідах складу $Y_{5-x}Dy_xGe_3$, $Y_{5-x}Sm_xGe_3$ та $Ho_{1-x}Lu_xGe_2$ та визначення кількості інтеркальованого літію й оцінка перспектив їх застосування як матеріалів для ХДЕЕ нового покоління.

Синтезовано зразки складу $Y_{30}Dy_{32,5}Ge_{37,5}$, $Y_{40}Sm_{22,5}Ge_{37,5}$, $Y_{60}Sm_{2,5}Ge_{37,5}$, $Ho_{20}Lu_{14}Ge_{66}$ та $Ho_{10}Lu_{24}Ge_{66}$ масою 0,8–1,0 г із металів високої чистоти (вміст основного компонента > 99,7 мас. %). Для гомогенізації зразки відпалювали у вакуумованих кварцових ампулах упродовж 720 годин за 600 °С із подальшим гартуванням у холодній воді без руйнування ампул. Рентгенівські дифракційні дані одержано на автоматичному рентгенівському дифрактометрі ДРОН-2,0М (Fe K α -випромінювання). Фазовий аналіз анодних матеріалів до та після електрохімічного літіювання виконували з використанням програми PowderCell [3]. Електрохімічне літування/делітування здійснювали у двоелектродній моделі батареї “Swagelok-cell”. Як матеріал катода використовували порошок кераміки LiCoO₂. Анод і катод розділяли пресованою целюлозою, що виконувала функцію сепаратора. ЯЕлектролітом слугував 1 М розчин Li[PF₆] у суміші апротонних розчинників. Електрохімічні вимірювання проводили на двоканальному гальваностаті MТech G410-2 [4].

Рентгенівський фазовий аналіз синтезованих сплавів до та після електрохімічного літійовання засвідчив зміну параметрів елементарної комірки, що ізотропно зростають.

Інтеркаляції літію у фазах $Y_{5-x}Dy_xGe_3$, $Y_{5-x}Sm_xGe_3$ (структурний тип Mn_5Si_3 , символ Пірсона $hP16$) відбувається у два етапи. На першому етапі атоми Li займають октаедричні пустоти ($2b$) з утворенням $Li_xY_{2,4}Dy_{2,6}Ge_3$, $Li_xY_{3,6}Sm_{1,4}Ge_3$ та $Li_xY_{4,8}Sm_{0,2}Ge_3$. Другий етап характеризується частковим заміщенням атомів Ge літієм із утворенням фаз $Li_{x+y}Y_{2,4}Dy_{2,6}Ge_{3-y}$, $Li_{x+y}Y_{3,6}Sm_{1,4}Ge_{3-y}$ та $Li_{x+y}Y_{4,8}Sm_{0,2}Ge_{3-y}$. Після включення Li в октаедричні пустоти структура типу Mn_5Si_3 трансформується в надструктуру Hf_5CuSn_3 [5–8].

Для фаз $Ho_{1-x}Lu_xGe_2$ (структурний тип $ZrSi_2$, символ Пірсона $oS12$) процес електрохімічної інтеркаляції літію відбувається за комбінованим механізмом. Перший етап – включення Li та утворення фази $Li_yHo_{1-x}Lu_xGe_2$. На другому етапі відбувається часткове заміщення атомів Ge літієм з утворенням фази $Li_{y+k}Ho_{1-x}Lu_xGe_{2-k}Li_{m-k}Ge_k$. Спостерігається послаблення зв'язків Ge–Ge і посилення взаємодії між катіонами Li^+ і атомами Ge, що сприяє перебудові структури та утворенню нової фази. Структура $ZrSi_2$ ($oS12$) трансформується у структуру $CeNiSi_2$ ($oS16$) без зміни просторової групи *Стет*, змінюється кількість атомів в елементарній комірці. Катіон Li^+ входить у структурний фрагмент, приймає електрон і стає електронейтральним, стабілізуючи нову фазу.

Таким чином, електрохімічна інтеркаляція літію є ефективним альтернативним методом одержання інтерметалічних сполук, модифікації поверхонь чи аморфізації матеріалів для каталізу та відкриває нові можливості для створення високоефективних ХДЕЕ нового покоління.

- [1] Besenhard J. O. Handbook of battery materials. Wiley-VCH, Weinheim. 1999.
- [2] Vincent C. A., Scrosati B. Modern batteries an introduction to electrochemical power sources: 2nd edn. Arnold. London, 1997.
- [3] Kraus W., Nolze G. PowderCellfor Windows. Berlin, 1999.
- [4] <http://mtech-lab.com.ua/>
- [5] Stetskiv A., Kordan V., Tarasiuk I. et al. Structural peculiarities and electrochemical properties of R_5M_3 ($R = La, Gd; M = Ge, Sn$) doped by lithium // Chem. Met. Alloys. 2014. Vol. 7. P. 106–111.
- [6] Balińska A., Kordan V., Misztal R., Pavlyuk V. Electrochemical and thermal insertion of lithium and magnesium into Zr_5Sn_3 // J. Solid State Electrochem. 2015. Vol. 19(8). P. 2481–2490.
- [7] Stetskiv A., Kordan V., Kowalczyk G., Rożyńska-Kielbik B. Electrochemical lithiation and magnesiation of R_5Sn_3 ($R = Y, Gd$) alloys // Coll. Abstr. XV Scientific Conference “Lviv chemical reading–2015”. Lviv. 2015. P. 233.
- [8] Kowalczyk G., Kordan V., Stetskiv A., Pavlyuk V. Lithiation and magnesiation of R_5Sn_3 ($R = Y$ and Gd) alloys // Intermetallics. 2016. Vol. 70. P. 53–60.

РОЗРОБКА ХРОМАТОГРАФІЧНОЇ МЕТОДИКИ ОДНОЧАСНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ЛЕВОФЛОКСАЦИНУ ТА МІНОЦИКЛІНУ

Лесько Ю. Ю., Горин М. М., Логойда Л. С.

Тернопільський національний медичний університет
імені І. Я. Горбачевського МОЗ України

lesko_yulyur@tdmu.edu.ua

Вступ. Інфекційні захворювання залишаються однією з провідних причин захворюваності та смертності у світі. Левофлоксацин – синтетичний антибактеріальний засіб III покоління фторхінолонів. Міноциклін – напівсинтетичний антибіотик другого покоління тетрациклінового ряду. У зв'язку з частим клінічним застосуванням міноцикліну та левофлоксацину з'являється необхідність у розробці чутливих аналітичних методик кількісного визначення АФІ в лікарських формах для забезпечення їх належної ефективності. Тому, метою експерименту є розробка експресної та екологічної ВЕРХ методики визначення міноцикліну та левофлоксацину в ЛЗ та модельних сумішах.

Матеріали та методи. Рідинний хроматограф Shimadzu LC-2050 C з діодноматричним детектором та програмним забезпеченням LabSolution. ФСЗ міноцикліну та левофлоксацину (чистота $\geq 98\%$ (ВЕРХ)) виробництва Sigma-Aldrich Chemicals Co. (Сент-Луїс, Міссурі, США). Розчин для інфузій левофлоксацину 5 мг/мл по 100 мл та капсули міноцикліну 100 мг промислового виробництва. Метанол, трифтороцтова кислота (TFA) та вода ($\geq 99.9\%$ чистоти) марки Honeywell, Riedel-de Haen (Німеччина).

Результати. Для вивчення оптимальних хроматографічних умов проаналізовано різні підходи до співвідношення компонентів рухомої фази шляхом зміни об'ємів органічного розчинника та 0.05% трифтороцтової кислоти. Складність розробки методики полягала у забезпеченні ефективного розділення між двома аналітами із відмінною полярністю, а саме виходом гідрофільного левофлоксацину не в «мертвому об'ємі» колонки. Оскільки міноциклін ліпофільна молекула, то проблем з виходом на колонці Luna C18 не спостерігалось. Експериментальним шляхом встановлено, що найкраще елювання міноцикліну і левофлоксацину спостерігається при співвідношенні рухомої фази 70:30. Час утримування левофлоксацину та міноцикліну становив 3.649 та 2.053 відповідно. В процесі розробки методики встановлено робочі хроматографічні умови: швидкість потоку – 1.0 мл/хв, температура – 30°C, довжина хвилі – 270 нм. Для оцінки ефективності методу аналізували: кількість теоретичних тарілок (2711, 2130), коефіцієнт асиметрії (1.240, 1.239), площі піків (473242, 661773), розділення (6.426), для левофлоксацину та міноцикліну відповідно. Наступним етапом експерименту передбачено проведення валідації ВЕРХ методики для оцінки її придатності та надійності.

Висновки. Запропоновано методологічні підходи до аналізу двох АФІ різної полярності шляхом розробки ВЕРХ методики одночасного визначення левофлоксацину та міноцикліну.

[1] Kazakevich, Y. V., & Lobrutto, R. (2006). HPLC for pharmaceutical scientists. John Wiley & Sons.

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ МЕТОПРОЛОЛУ ТАРТРАТУ В ТАБЛЕТКАХ

Ледней Р. Р., Донченко А. О., Васюк С. О.

Запорізький державний медико-фармацевтичний університет

romaled1233@gmail.com

Стрімке розширення арсеналу сучасних лікарських засобів висуває нові вимоги до контролю їхньої якості, що робить удосконалення методів фармацевтичного аналізу пріоритетним завданням. На сьогодні спектрофотометричний метод залишається «золотим стандартом» за критеріями ціни, швидкості та екологічності. В контексті сталого розвитку та мінімізації використання токсичних реагентів, удосконалення цього методу має переваги в порівнянні із традиційною хроматографією. Тому створення нових високочутливих методик спектрофотометричного визначення є ключем до вирішення актуальних завдань сучасної фармацевтичної науки та практики.

Мета дослідження. Розробити та валідувати спектрофотометричну методику кількісного визначення метопрололу тартрату.

Матеріали і методи. В дослідженні використано робочий стандартний зразок метопрололу тартрату, діазоль червоний 2Ж, метанол кваліфікації (х.ч.). Аналітичне обладнання: спектрофотометр Specord 200, ваги електронні RADWAG XA 210.4Y, мірний посуд класу А.

Результати дослідження. Під час наукового пошуку було оптимізовано умови реакції між метопрололу тартратом та діазолем червоним 2Ж. Експериментально встановлено, що досліджувана реакція перебігає в середовищі метанолу протягом 25 хвилин за кімнатної температури. Максимальне значення оптичної густини зафіксовано за довжини хвилі 369 нм. Встановлено, що підпорядкування закону світлопоглинання спостерігається в діапазоні 2,56-3,84 мг/100 мл, а межа виявлення становить 1,55 мкг/мл. Апробація методики підтверджена на таблетованій формі «Метопрол» 100 мг (ПАТ «Київмедпрепарат», серія 0114306). Діапазон застосування методики складає 80-120%.

Висновки. Розроблено та валідовано спектрофотометричну методику кількісного визначення метопрололу тартрату, що базується на реакції з діазолем червоним 2Ж. Комплексна оцінка валідаційних параметрів – специфічності, лінійності, прецизійності, правильності, робастності та діапазону застосування підтверджує високу достовірність отриманих результатів. Завдяки відсутності потреби в екстракції та простоті виконання, дана методика є ефективною для рутинного контролю якості лікарських засобів метопрололу тартрату.

АТОМНО – АБСОРБЦІЙНЕ ВИЗНАЧЕННЯ АНАЛІТІВ В ДИТЯЧОМУ ХАРЧУВАННІ, КОСМЕТИЧНИХ ПРЕПАРАТАХ, ЗАСОБАХ ГІГІЄНИ ТА ВОДАХ

Максименко Д. Д., Юрченко О. І.

Харківський національний університет імені В.Н.Каразіна

daria.maksymenko@student.karazin.ua

В умовах сьогодення застосування наборів дитячого харчування, а також різних косметичних препаратів, засобів гігієни та вод різного походження є невід'ємною частиною людського буття. Однак через неналежні умови виробництва в ці продукти можуть потрапляти різні токсичні аналіти, які можуть спричинити погіршення здоров'я та самопочуття у людей, які будуть користуватися цими продуктами. Тому розробка різних методик із визначення аналітів є доволі важливою в умовах сучасності. Найбільш використовуваним є атомно-абсорбційний метод визначення токсичних аналітів у багатокомпонентних зразках, включаючи дитяче харчування, косметичні препарати, засоби гігієни та води різного походження.

Мета роботи: розробити методіку атомно-абсорбційного визначення аналітів у багатокомпонентних зразках із покращеними метрологічними характеристиками.

Для аналізу було вибрано наступні зразки: пюре фруктове «Чудо – чадо» Яблуко – персик, пюре фруктове «Elfik» Яблуко – персик та пюре фруктове «Elfik» Фрутовий салатік віком від 5 місяців, кондиціонер «Syoss deep conditioner», шампунь «Syoss intense oleo shampoo», спрей для волосся «estima lamination spray», шампунь «herbal essences», гель для вмивання «chistina», кондиціонер «herbal essences», шампунь «vieliy», гель для душу «Avon», крем «La Roche Posay», крем для бриття, шампунь «kallos», шампунь «head&sholders», води різного походження.

Методика експерименту: брали наважку зразків на електронних вагах масою 10 г (з похибкою 0,0001г). Розчиняли в конц HNO_3 до вологого залишку. До осаду додавали 10 мл 1,5% HNO_3 до осаду та обробляли на УЗ – бані протягом 25 хв. Фільтрували в мірні колби, до риски доводили 1,5% HNO_3 так як в атомно – абсорбційному аналізі нітратна кислота вказаної концентрації дає максимальний аналітичний сигнал. Проведено атомно – абсорбційне визначення аналітів в багатокомпонентних зразках. Правильність результатів аналізу проведено методом «виведено – знайдено». Показано, що систематична похибка не значна. Проведено порівняння отриманих результатів з ГДК [1,2]. Показано, що в аналізованих зразках перевищення концентрацій визначуваних елементів не виявлено.

[1] Khalil M. M. H., Khorshed M. A., Ghuniem M. M. Development of Analytical method for Determination of some essential and toxic elements in some canned and

Homemade baby food samples in Giza. *Research Journal of Chemical and Environmental Sciences*. 2016. Vol. 4, no. 5. P. 15–23.

[2] Determination of Heavy Metals in Selected Cosmetic Products sold in Nepal / N. B. Dangi et al. *Journal of Health and Allied Sciences*. 2023. Vol. 12, no. 2. P. 23–27. URL: <https://doi.org/10.37107/jhas.432> (date of access: 27.03.2026).

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ КУПРУМУ З ВИКОРИСТАННЯМ N-[ФЕНІЛ(ПІРИДИН- 2ІЛ)МЕТИЛІДЕН]ГІДРОКСИЛАМІНУ

Максимів Т. В., Ридчук П. В., Пацай І. О., Тимошук О. С.

Львівський національний університет імені Івана Франка

tetiana.maksymiv@lnu.edu.ua

Характерною особливістю обміну купруму в людському організмі є вузький діапазон між недостатнім надходженням (менше 2 мг/добу) та його надлишковими кількостями (більше 10 мг/добу), які спричиняють токсичний вплив. Гостре ж отруєння людини сполуками купруму супроводжується нудотою, блюванням, болем у животі, головним болем, появою гемоглобіну в плазмі крові та сечі. У важких випадках спостерігаються такі ускладнення, як тахікардія, гіпертензія, гемолітична анемія, сульфгемоглобінемія, білірубінемія, уремія, кома та навіть смерть внаслідок гострої ниркової недостатності. Зловживання купрумвмісними препаратами для захисту с/г рослин від грибкових захворювань, а також надмірне внесення кормових добавок для збільшення несучості курей може спричинити накопичення надлишкових кількостей купруму у продуктах харчування та напівфабрикатах. Тому моніторинг вмісту купруму в такого роду об'єктах залишається важливим завданням для забезпечення здоров'я населення. З метою зменшення економічних витрат, пов'язаних з регулярним моніторингом, найбільш зручним є використання спектрофотометрії. Адже безперечними перевагами цього методу є достатня чутливість визначення у поєднанні з економічною доступністю обладнання та простотою навчання задіяних працівників.

З метою забезпечення надійності спектрофотометричного визначення купруму в об'єктах довкілля як селективний спектрофотометричний реагент запропонований N-[феніл(піридин-2іл)метиліден]гідроксиламін. Цей аналітичний реагент утворює з Cu(I) сполуку жовтого кольору з максимумом світлопоглинання при 424 нм. Комплексна сполука, складу CuL₂, містить саме іон Cu(I) внаслідок введення в реакційне середовище аліквоти розчину аскорбінової кислоти. Аналітична реакція характеризується високою контрастністю, оскільки сам органічний реагент є безбарвним у видимій ділянці спектра. Розроблена методика є проста у виконанні, економічно доступна та не вимагає затрат токсичних органічних екстрагентів. Водночас запропонована методика характеризується чутливістю визначення на рівні 65 нг/мл та межами лінійності аналітичного сигналу понад один концентраційний порядок. Слід додатково підкреслити, що спектрофотометричному визначенню купруму з використанням N-[феніл(піридин-2іл)метиліден]гідроксиламіну в середовищі універсальної буферної суміші з рН 4,0 не заважають значні концентраційні надлишки практично всіх типових для об'єктів довкілля іонів супутніх металів.

МАГНІТОЧУТЛИВИЙ НАНОКОМПОЗИТ НА ОСНОВІ ДИБЕНЗО-18-КРАУН-6 ЕТЕРУ

Мечик П. О., Щеглов О., Кусяк А., Петрановська А., Горбик П.

Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка НАН України

pavelmechik41@gmail.com

Краун-етери є макроциклічними сполуками, що знайшли широке застосування у координаційній хімії, аналітичних методах і сенсорних технологіях завдяки здатності вибірково взаємодіяти з катіонами металів. Їх активно використовують в іон-селективних електродах для аналізу розчинів, а також у сорбційних матеріалах для вилучення іонів із водних і технологічних середовищ. У медичній сфері ці сполуки можуть виконувати роль компонентів систем спрямованої доставки лікарських засобів.

Особливий інтерес становлять дибензо-18-краун-6 та дибензо-24-краун-8 етери. Їх жорстка структура, зумовлена наявністю бензенових кілець, сприяє ефективному комплексоутворенню як у полярних, так і в неполярних середовищах. Відмінності у розмірах макроциклів забезпечують передумови для селективного зв'язування іонів[1].

Закріплення молекул краун-етерів на поверхні магнітних наночастинок дозволяє створювати селективні сорбенти, які легко вилучаються з розчинів під дією магнітного поля. У межах цієї роботи було розроблено підхід до функціоналізації дибензо-18-краун-6 шляхом введення карбоксильних груп з подальшим їх перетворенням у хлорангідридні. Перебіг реакцій та ступінь перетворення підтверджено методом ^1H -ЯМР-спектроскопії, що проявляється у зміні хімічних зсувів сигналів ароматичних кілець і незначних змінах сигналів етерних фрагментів та Мас-спектроскопія що показала відповідність молекулярних мас кожного з зразків[2].

Модифікування магнетиту здійснювали шляхом ацилювання гідроксильних груп його поверхні хлорангідридними похідними краун-етеру в присутності тріетиламіну в середовищі тетрагідрофурану. Отримані зразки фільтрували та промивали киплячим толуолом і висушували при температурі 85°C для усунення залишків розчинника.

Успішність модифікації підтверджена методом ІЧ-спектроскопії. Максимуми в районі 3000 см^{-1} свідчать про наявність бензенових кілець, сигнали в районі 1500 см^{-1} вказують про наявність $\text{C}=\text{O}$ зв'язків та в межах $1000\text{--}1300\text{ см}^{-1}$ $\text{C}-\text{O}$ та $\text{C}-\text{C}$ етерних груп на поверхні отриманого зразка. Та максимуми 553 та 1125 см^{-1} відповідають зв'язкам нанрозмірного магнетиту.

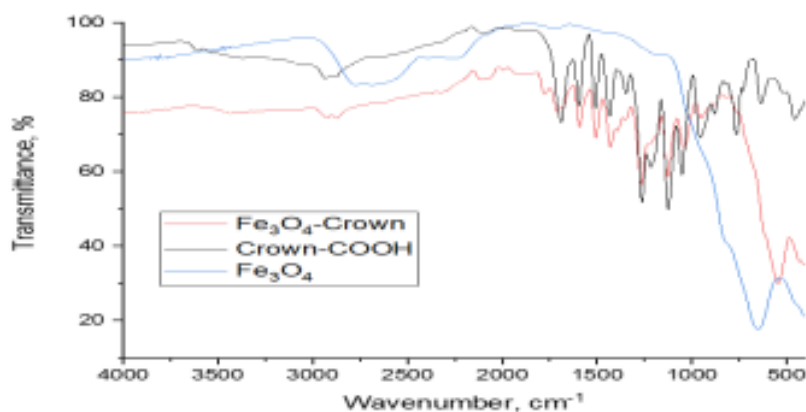


Рис. 1. ІЧ-спектр вихідних речовин: нанорозмірного магнетиту (Fe_3O_4) і диацилхлорид-добензо-18-краун-6, та продукту реакції – модифікованої наночастинки.

- [1] Kang, J., Ha, W., Zhang, H., & Shi, Y.-P. 4'-aminobenzo-18-crown-6 functionalized magnetic nanoparticles as a solid-phase extraction adsorbent for determination of Pb^{2+} . *Analytical Methods* – 2019.
- [2] UĞRAŞ, H. İ., ÇAKIR, Ü., AZİZOĞLU, A., KILIÇ, T., & ERK, Ç. Experimental, Theoretical and Biological Activity Study on the Acyl-Substituted Benzo-18-crown-6, Dibenzo-18-crown-6 and Dibenzo-24-crown-8. *Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry*, 2006. 159–165.

РОЗРОБКА ЕКОЛОГІЧНОЇ ВЕРХ МЕТОДИКИ ВИЗНАЧЕННЯ МОКСИФЛОКСАЦИНУ В ЛЗ

Михальська А. А., Горин М. М., Логойда Л. С.

Тернопільський національний медичний університет
імені І. Я Горбачевського МОЗ України

Вступ. Моксифлоксацин (Moxifloxacinum) — синтетичний протимікробний засіб із групи фторхінолонів, що належить до препаратів бактерицидної дії. Зважаючи на часте використання пацієнтами, для забезпечення належної якості лікарських засобів, що містять моксифлоксацин, необхідно застосовувати точні, відтворювані та безпечні методики кількісного визначення діючої речовини. Метою дослідження є розробка екологічно безпечної хроматографічної методики визначення моксифлоксацину в лікарських засобах.

Матеріали та методи. Рідинний хроматограф Shimadzu LC-2050 C з діодноматричним детектором та програмним забезпеченням LabSolution. ФСЗ моксифлоксацину (чистота $\geq 98\%$ (ВЕРХ)) виробництва Sigma-Aldrich Chemicals Co. (Сент-Луїс, Міссурі, США). Розчин для інфузій моксифлоксацину 400 мг в 250 мл промислового виробництва. Етанол, фосфорна кислота конц. та вода ($\geq 99.9\%$ чистоти) марки Honeywell, Riedel-de Haen (Німеччина).

Результати. Для забезпечення ефективних умов ВЕРХ аналізу проаналізовано різні підходи до співвідношення компонентів рухомої фази шляхом варіації об'ємів органічного розчинника фосфорної кислоти на колонці Luna C18. Зважаючи на те, що в основі дослідження лежить розробка саме екологічної методики здійснено заміну органічного компонента у складі рухомої фази (ацетонітрилу та метанолу на етанол). Для визначення моксифлоксацину, шляхом експерименту, обрано рухому фазу у складі етанол : 0,05 % фосфорна кислота (55:45). Час виходу моксифлоксацину становить 1.786. Під час експериментального аналізу досліджували швидкість потоку, температуру колонки та довжину хвилі. Оптимальними умовами хроматографування визначено: швидкість потоку 1 мл/хв, температура 30°C, довжина хвилі детектування 279 нм. Отримані результати придатності хроматографічної системи не перевищували референтні значення: кількість теоретичних тарілок 6291, коефіцієнт асиметрії 1.424, площа піку 2111236. Наступним етапом дослідження буде валідація розробленої методики, яка проводиться для підтвердження лінійності точності, прецизійності та робастності отриманих результатів.

Висновки. Розроблено ВЕРХ методику визначення моксифлоксацину в ЛЗ із врахуванням принципів «зеленої» хімії, шляхом використання етанолу (безпечного розчинника), оптимізації швидкості потоку та часу утримування.

[1.] Kazakevich, Y. V., & Lobrutto, R. (2006). HPLC for pharmaceutical scientists. John Wiley & Sons.

АТОМНО-ЕМІСІЙНЕ З ІНДУКТИВНО ЗВ'ЯЗАНОЮ ПЛАЗМОЮ ВИЗНАЧЕННЯ МІДІ, ЗАЛІЗА, СВИНЦЮ ТА ЦИНКУ В ФАРМАЦЕВТИЧНИХ СУБСТАНЦІЯХ

Осипов А. В., Ханін В. А., Юрченко О. І.

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

artur.osypov@student.karazin.ua

Наявність елементних домішок в складі лікарських засобів, обумовлена їхнім вмістом у вихідній сировині або допоміжних речовинах, що використовуються під час синтезу та виробничого процесу, критично впливає на якість та безпеку препарату для людини, а також його стабільність в процесі зберігання. Таким чином, вміст слідових кількостей металів підлягає суворому регулюванню відповідно до вимог Державної фармакопеї України та Настанови щодо елементних домішок ICH Q3D(R2).

У даній роботі було проведено розробку методики одночасного визначення міді, заліза, свинцю та цинку методом АЕС-ІЗП в зразках аскорбінової кислоти та заліза декстрану. Досліджено вплив поверхнево-активних речовин Тритон Х-100, натрію додецилсульфату, Твін-80 на підвищення чутливості визначення.

Встановлено, що підвищення концентрації ПАР приводить до зниження поверхневого натягу розчинів, що сприяє збільшенню дисперсності крапель та підвищує ефективність розпорошення аерозолу в плазму. Ультразвукова обробка випробовуваних розчинів для забезпечення повноти вилучення аналітів та використання градуювальних розчинів на основі ацетилацетонатів металів дозволили збільшити аналітичний сигнал та точність вимірювання в порівнянні з водними розчинами аналітів.

Під час апробації методики були отримані наступні результати визначення аналітів в аскорбіновій кислоті: Cu – 0,28 мг/кг; Fe – 2,2 мг/кг; у заліза декстрані: Cu – 0,25 мг/кг; Pb – 4,85 мг/кг; Zn – 11,74 мг/кг.

Також за результатами вимірювань було розраховано межі виявлення міді – $C_{\min} = 8,4 \cdot 10^{-4}$ мкг/мл, заліза – $C_{\min} = 1,6 \cdot 10^{-3}$ мкг/мл, свинцю – $C_{\min} = 2,3 \cdot 10^{-4}$ мкг/мл, цинку – $2,1 \cdot 10^{-4}$ мкг/мл.

ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ТА ТЕОРЕТИЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ СПЕКТРАЛЬНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ЛЮМІНОЛУ

Попенко Р., Христенко І., Іванов В.

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

xa12680610@student.karazin.ua

Галузі використання 5-аміно-2,3-дигідро-1,4-фталазиндіону, більш відомого під назвою люмінол (Рис. 1), включають біологічні та медичні дослідження, а також моніторинг навколишнього середовища та криміналістичний аналіз.

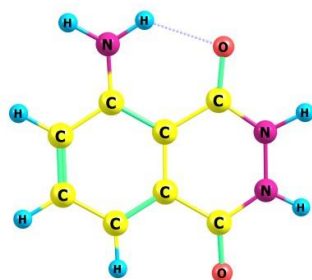


Рисунок 1. Будова молекули люмінолу

Сучасні напрямки дослідження хімії люмінолу орієнтовані на підвищення специфічності та чутливості похідних люмінола; створення портативних, ефективних мікродатчиків для діагностики середовища. Крім прикладних напрямків дослідження інтереси вчених поширюються на розуміння фундаментальних механізмів хемілюмінесценції люмінола на молекулярному рівні. Незважаючи на численні дослідження, присвячені механізму реакції люмінолу, розуміння природи проміжних стадій та сполук, що беруть участь у реакції, остаточно не з'ясовано.

В роботі проведено дослідження спектральних властивостей люмінолу в різних середовищах та теоретичні (квантовохімічні) розрахунки.

Експериментальні спектри люмінола біли виміряні на спектрофотометрі Shimadzu UV-2600. На Рис. 2 показано спектри поглинання реагенту в різних розчинниках.

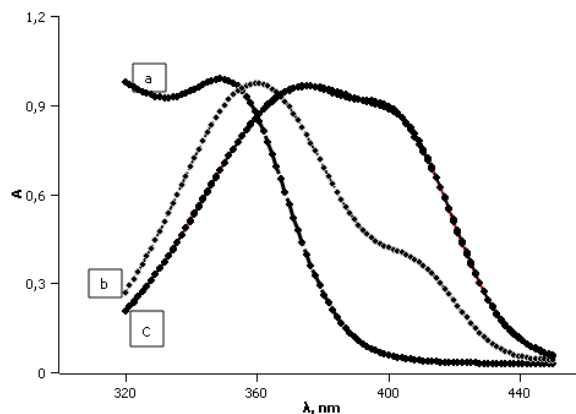


Рисунок 2. Спектр поглинання люмінолу в водно-лужному розчині (а), диметилсульфоксиді (б), етанолі (с)

Як відомо випромінювання світла, яке спостерігається при розпилюванні розчину, що містить люмінол та перекис водню, на плями крові, вже багато років використовується криміналістами для експрес визначення крові. При цьому виражена хемілюмінісценція пов'язана із рядом процесів в основному та збудженому станах структур, які виникають за певних умов проведення експерименту. Для теоретичної ілюстрації вказаних спектральних явищ нами було проведено ряд квантовохімічних розрахунків методом SAM-B3LYP/def2-TZVP. Вплив розчинника (вода, ДМСО) урахувався за поляризаційно-континуальною моделлю. Особливу увагу в розрахунках приділено двом формам із переносом протона, які виникають в процесі перетворення люмінолу (Рис. 3).

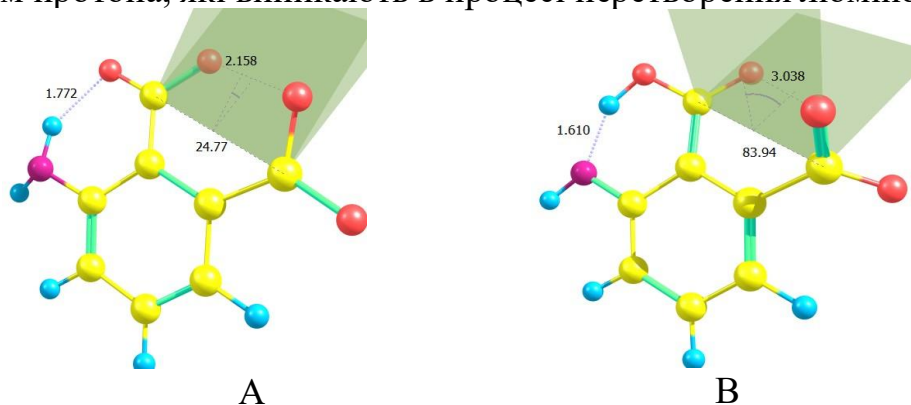


Рисунок 3. Дві таутомерні форми діаніону 3-амінофталату

Розрахунок показав, що хемілюмінісцентною формою є форма В. Згідно з нашими розрахунками довжина хвилі люмінісценції складає $\lambda = 419$ нм (сила осцилятора, $f = 0.2$), що добре узгоджується із експериментальними даними ($\lambda_{\text{exp}} = 425$ нм). Відповідна енергетична діаграма представлена на Рис.4.

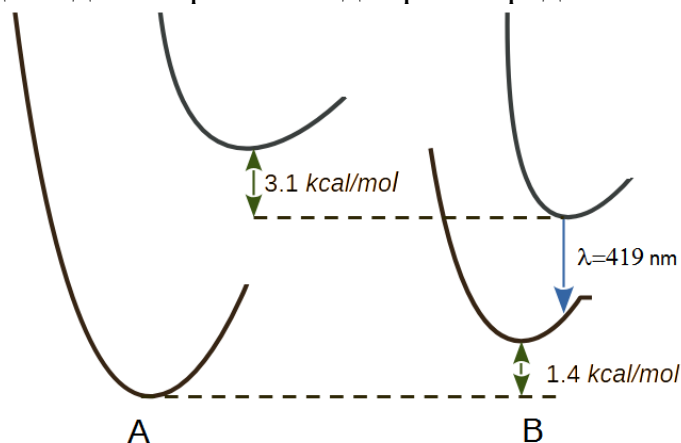


Рисунок 4. Схематичне представлення енергетичної діаграми для двох таутомерних форм 3-амінофталату.

В роботі також обговорюються можливості розробки нових сполук на базі люмінола із вираженою хемілюмінісценцією.

ВПЛИВ МОЛІБДАТ– ТА ВОЛЬФРАМАТ– ЙОНУ НА БУДОВУ, ЛЮМІНЕСЦЕНЦІЮ ТА ОБЛАСТІ СКЛОУТВОРЕННЯ У ФОСФАТНО- БОРАТНИХ СИСТЕМАХ

Саєнко Л. Д., Тереміленко К. В., Слободяник М. С.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

saenkolilia25@gmail.com

Розробка нових оксидних ізотропних матеріалів є надзвичайно актуальною на сьогоднішній день, зокрема у контексті створення сучасних люмінесцентних покриттів, що поєднують високу термічну й хімічну стійкість із відносно низьким вмістом люмінофорів. Борофосфатні стекла з різними модифікаторами є одним із перспективних напрямків досліджень в цій галузі, оскільки вони мають низку корисних властивостей.

Дуже важливими є системи, де MoO_3 та WO_3 виступають модифікаторами або склотвірними компонентами, утворюючи стійкі склоподібні структури в широкому діапазоні концентрацій. У цих матрицях оксиди молібдену та вольфраму здатні до зміни ступеня окиснення (з +6 до +5 і навпаки), що зумовлює одночасну присутність іонів металу в різних ступенях окиснення. Поєднання таких напівпровідникових властивостей із люмінесцентними відкриває широкі перспективи для функціонального дизайну новітніх оптичних матеріалів.

В представленій роботі розглядається можливість виготовлення стекел, склад яких модифіковано оксидами молібдену та вольфраму.

Скло $(45-0.5x)\text{P}_2\text{O}_5-x\text{B}_2\text{O}_3-10,0\text{MoO}_3-(45-0.5x)\text{Na}_2\text{O}$ ($x = 20,0-60,0$) та $(45-0.5y)\text{P}_2\text{O}_5-y\text{B}_2\text{O}_3-10,0\text{WO}_3-(45-0.5)\text{Na}_2\text{O}$ ($y = 1,0-50,0$) отримували методом плавлення високотемпературного розплаву з наступним швидким його охолодженням на мідному листі для загартування у випадку стекел з MoO_3 . Для системи з вольфрамом відбувалося охолодження у скловуглецевому тиглі.

Табл. 1 Склад скла $((45-0.5y)\text{P}_2\text{O}_5-y\text{B}_2\text{O}_3-10,0\text{WO}_3-(45-0.5)\text{Na}_2\text{O}$
($y = 1,0-50,0$) при 1000°C

Код зразку	Склад скла, % мол.				Співвідношення	
	P_2O_5	Na_2O	B_2O_3	WO_3	Na/B	B/W
SA30	44,5	44,5	1	10,00	44,5	0,1
SA31	42,5	42,5	5	10,00	8,5	0,5
SA32	40	40	10	10,00	4	1
SA33	37,5	37,5	15	10,00	2,5	1,5
SA34	35	35	20	10,00	1,75	2
SA35	32,5	32,5	25	10,00	1,3	2,5
SA36	30	30	30	10,00	1	3
SA37	25	25	40	10,00	0,625	4
SA38	20	20	50	10,00	0,4	5

Для дослідження координаційного оточення модифікаторів та люмінесцентних центрів використано ІЧ, КР та люмінесцентну спектроскопію. У якості люмінесцентного зонда, що визначає особливості організації аморфних матеріалів використано йон європію(III).

Зі збільшенням вмісту оксиду бору можемо спостерігати певні зміни в скляній сітці. При досягненні 40 % B_2O_3 , цей оксид не просто вбудовується в існуючу фосфатну сітку, а стає повноцінним склаутворювачем. Відмічено зміну забарвлення стекол при досягненні 20 % та 40% B_2O_3 для системи з WO_3 та MoO_3 відповідно. Це зумовлено частковим відновленням іонів металів (Me^{+6} до Me^{+5}) внаслідок підвищення кислотності розплаву при заміщенні фосфору бором.

Встановлено складний характер взаємовпливу боратних, молібдатних та вольфраматних груп у складі скла, що включає зміну координаційного оточення відповідної модифікуючої добавки та області самодовільного відновлення d^0 - перехідного елемента залежно від початкового складу розплавної системи. Отримані закономірності стануть основою для розробки нових люмінесцентних покриттів з підсиленою сенсibiliзаторами люмінесценцією.

ОПТИМІЗАЦІЯ УМОВ РЕАКЦІЇ АЗОСПОЛУЧЕННЯ ЦЕФЕПІМУ З ОРТО-ВАНІЛІНОМ ДЛЯ ОТРИМАННЯ ЕФЕКТИВНИХ АНАЛІТИЧНИХ ФОРМ АНТИБІОТИКА

Слободенюк К. С., Коркуна О. Я.

Львівський національний університет імені Івана Франка

kateryna.slobodeniuk@lnu.edu.ua

Розробка нових методик експрес-аналізу антибіотиків цефалоспоринового ряду залишається актуальним завданням фармацевтичної хімії. До таких антибіотиків належить цефепім – цефалоспориновий антибіотик IV покоління. Оскільки молекула цефепіму (ЦЕФП) містить первинну ароматичну аміногрупу, вона здатна утворювати солі діазонію, які за сполучення із азоскладовою утворюють забарвлені анілітичні форми придатні для спектрофотометричного визначення антибіотика. Серед фенольних реагентів особливу увагу привертає використання орто-ваніліну (2-гідрокси-3-метоксибензальдегіду) (о-Ван), переваги якого над класичними фенолами, зумовлені синергією функціональних груп: метоксигрупа активує ароматичне кільце для атаки катіона діазонію, прискорюючи реакцію, а альдегідна група забезпечує багатохромний зсув максимуму поглинання новоутвореної азогрупи у видиму область спектра. Це суттєво підвищує селективність визначення на фоні супутніх домішок.

Експериментально, методом спектрофотометрії, встановлено, що стадія діазотування ЦЕФП найефективніше протікає в середовищі 3 М хлоридної кислоти при 20-40 - кратному надлишку натрій нітриту впродовж 4-5 хв. Подальше азосполучення з о-Ван потребує лужного середовища для перетворення реагенту в активну форму фенолят-іона. Оптимальний вихід азобарвника досягається при кінцевій концентрації лугу в реакційному середовищі $8 \cdot 10^{-2}$ М та ≥ 30 -кратному надлишку реагенту орто-ваніліну.

З'ясовано, що лінійний характер залежності оптичної густини від концентрації ЦЕФП зберігається в межах 1,5 порядку: $4,5 \cdot 10^{-6}$ – $1,5 \cdot 10^{-4}$ моль/л; $C_{\text{мін}} = 3,42 \cdot 10^{-6}$ моль/л; $R = 0,9991$.

Висока стабільність о-Ван (понад 1,5 год) та широкі межі лінійності аналітичного сигналу дозволяють рекомендувати розроблену методику для визначення цефепіму у лікарських формах.

ВИЗНАЧЕННЯ ВМІСТУ $w(\%)$ FeSO_4 У ЗРАЗКУ ЗАЛІЗНОГО КУПОРОСУ МЕТОДОМ ПОТЕНЦІОМЕТРИЧНОГО ТИТРУВАННЯ

Тарадайка В. А., Беляєв А. М., Шафорост Ю. А.

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

taradaika.vladyslav2224@vu.cdu.edu.ua

У сучасному світі дуже важливим є зберігання первинного вигляду деревних виробів та конструкцій. Залізний купорос – засіб для захисту конструкцій від мохів, грибків та гнилі [1]. Метою роботи є визначення вмісту сульфату заліза (FeSO_4) в зразку $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ фірми ТОВ «Гарден Клуб».

Для визначення вмісту FeSO_4 було обрано метод цериметрії із потенціометричною індикацією точки еквівалентності. Вибір зумовлений високим Ок-Red потенціалом пари $\text{Ce}^{\text{IV}}/\text{Ce}^{3+}$ (1,61 В), великою стійкістю розчинів, відсутністю реагентів-прекурсорів [3]. Була проведена стандартизація робочого розчину $\text{Ce}(\text{SO}_4)_2$ за розчином солі Мора $(\text{NH}_4)_2\text{Fe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$ із молярною концентрацією 0,01232 моль/дм³ із використанням окисно-відновного індикатора фероїну. За результатом стандартизації робочого розчину $\text{Ce}(\text{SO}_4)_2$ було встановлено, що його концентрація дорівнює 0,0385 моль/дм³.

У роботі використовувався метод непрямой потенціометрії заснований на знаходженні точки еквівалентності за результатами обробки даних процесу титрування. Експеримент виконувався на потенціометрі рН-150ПІ, робочим електродом був платиновий електрод, допоміжним – хлор-срібний. На аналітичних терезах взяли наважку засобу ($\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$) перенесли з бюкса в хімічний стакан із дистильованою водою. В нього додали розчин H_2SO_4 (1:4). Бюретку заповнили розчином $\text{Ce}(\text{SO}_4)_2$. Титрування проводилося шляхом додавання до визначуваного розчину сталих об'ємів титранту (по 0,5 см³)[3]. На рис. 1 зображені інтегральна та диференціальна криві титрування.

Рівняння реакції:

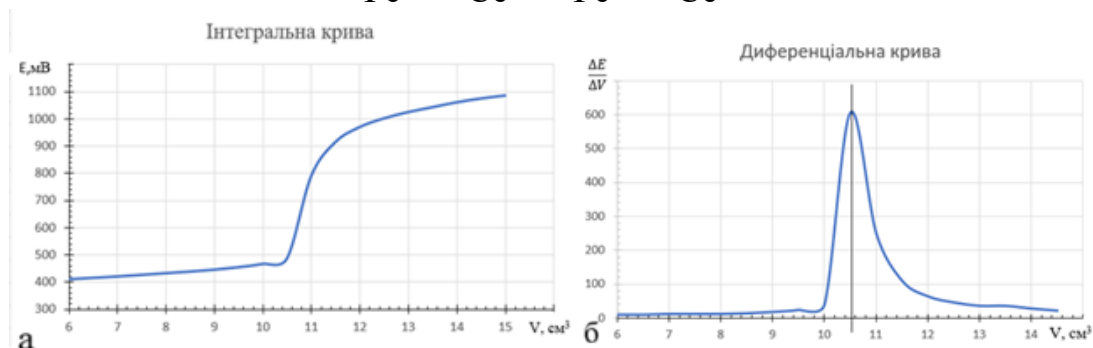
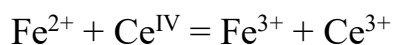


Рис. 1. а) інтегральна та б) диференціальна криві потенціометричного титрування

Після обробки інтегральної кривої потенціометричного титрування, було встановлено об'єм титранту в точці еквівалентності ($V_{\text{екв.}}=10,51 \text{ см}^3$). Далі за формулою (1) було розраховано вміст Fe^{2+} -йонів.

$$\omega(\%)(\text{FeSO}_4) = \frac{V(\text{Ce}(\text{SO}_4)_2) \cdot c(\text{Ce}(\text{SO}_4)_2) \cdot M(\text{FeSO}_4)}{10 \cdot m_{\text{H}}} \quad (1)$$
$$\omega(\%)(\text{FeSO}_4) = \frac{10,51 \cdot 0,0385 \cdot 151,91}{10 \cdot 0,1}$$
$$\omega(\%)(\text{FeSO}_4) = 61,47.$$

За результатами дослідження зразку залізного купоросу марки ТОВ «Гарден Клуб», було встановлено, що фактичний вміст FeSO_4 відповідає заявленому на упаковці.

Згадка ТОВ «Гарден Клуб» була зазначена в наукових цілях і не є рекламною агатацією.

[1] Господаренко Г. М. Агрохімія: підручник. Київ : Аграрна освіта, 2013. 406 с.

[2] Болотов В. В., Свечнікова О. М., Колісник С. В., Жукова Т. В. та ін. Аналітична хімія : Навч. посіб. для фармац. внз та ф-тів III–IV рівня акредитації. Харків : Вид-во НФау, 2004. 480 с.

[3] Сегеда А. С. Аналітична хімія. Кількісний аналіз : навч.-метод. посіб. Київ : Фітосоціоцентр, 2006. 544 с.

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНА ОРГАНІЗАЦІЯ ТА СПІНОВИЙ ПЕРЕХІД У ПСЕВДООКТАЕДРИЧНОМУ КОМПЛЕКСІ ЗАЛІЗА(II) З БЕНЗОФУРАН-ВМІСНИМ ЛІГАНДОМ

Терпелюк І. С., Знов'як К. О., Амірханов В. М., Середюк М. Л.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

illia.terpeliuk05@gmail.com

Координаційні сполуки заліза(II), які можуть перемикатися між низькоспіновим і високоспіновим станами, є одним із найперспективніших типів функціональних молекулярних матеріалів із керованими магнітними, оптичними та структурними властивостями [1]. Особливий інтерес до таких систем зумовлений тим, що характеристики спінового переходу (СП), зокрема його температура, різкість і наявність гістерезису, визначаються не лише природою координаційного вузла, а й тонкими особливостями молекулярної геометрії та кристалічного пакування [2]. Встановлення взаємозв'язку між будовою комплексів, їх супрамолекулярною організацією та проявом СП є важливою передумовою раціонального дизайну нових функціональних матеріалів.

У контексті пошуку нових сполук із гістерезисом спінового переходу [3] було синтезовано ліганд 2-(3-(бензофуран-6-іл)-1H-1,2,4-тріазол-5-іл)-6-(1H-піразол-1-іл)піридину (L), будову якого підтверджено даними ЯМР-, ІЧ-спектроскопії та мас-спектрометрії. На його основі синтезовано та виділено у кристалічному стані псевдооктаедричну координаційну сполуку $[\text{Fe}(\text{L})_2] \cdot 2\text{MeOH}$, схематичну будову якої наведено на рис. 1а.

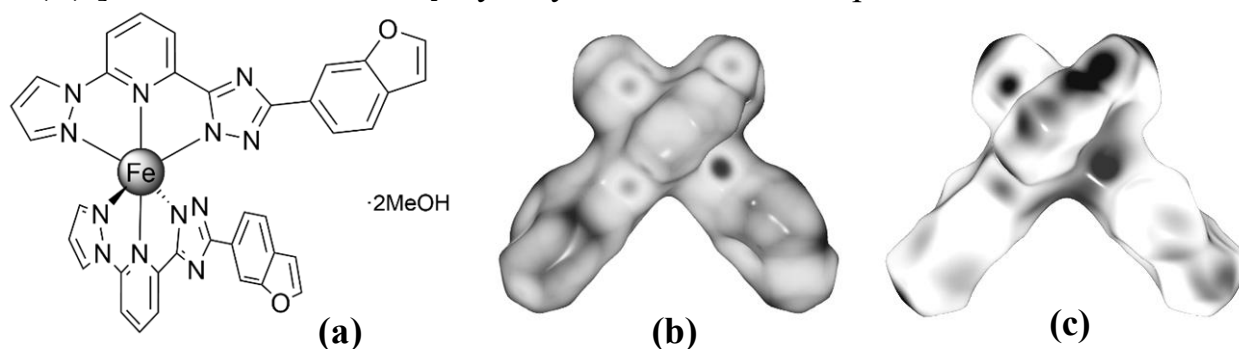


Рис. 1. (а) Молекулярна будова комплексу $[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{L})_2] \cdot 2\text{MeOH}$; (б) поверхня Гіршфельда та (с) розподіл електростатичного потенціалу (темніший – більш негативний).

За даними рентгеноструктурного аналізу встановлено, що геометрія комплексної молекули визначається просторовим розташуванням донорних гетероциклів і жорстких планарних бензофуранових замісників. У ґратці сусідні молекули поєднуються слабкими водневими зв'язками типу $\text{C}-\text{H} \cdots \pi$, формуючи одновимірні супрамолекулярні ланцюги. Додаткові слабкі контакти $\text{C}-\text{H} \cdots \text{N}/\text{C}$ зумовлюють асоціацію цих ланцюгів у двовимірні шари. Простір між шарами

займають молекули метанолу, які додатково стабілізують кристалічну ґратку завдяки системі сильних і слабких міжмолекулярних взаємодій.

Аналіз поверхні Гіршфельда (рис. 1b) дозволив оцінити відносні внески різних типів міжмолекулярних контактів, а квантово-хімічні розрахунки — визначити розподіл і локалізацію заряду в ліганді-аніоні (рис. 1c). Дослідження енергії взаємодій у кристалічному пакуванні методом енергетичних каркасів показало, що в межах супрамолекулярних ланцюгів і шарів переважають стабілізувальні взаємодії, тоді як міжшарові контакти характеризуються поєднанням слабких стабілізувальних і дестабілізувальних внесків.

Середня довжина зв'язку Fe–N, яка за даними РСтА становить 1,957 Å, відповідає низькоспіновому стану іона Fe(II) ($S = 0$) з електронною конфігурацією $t_{2g}^6e_g^0$. Під час нагрівання та десольватації комплекс переходить у високоспіновий стан ($S = 2$) з конфігурацією $t_{2g}^4e_g^2$, що супроводжується появою чотирьох неспарених електронів, зміною електронної будови, забарвлення та магнітних властивостей. Згідно з магнетохімічними даними, для сполуки спостерігається відтворений різкий перехід із низькоспінового у високоспіновий стан із центром при 380 К ($\sim 107^\circ\text{C}$).

Таким чином, у роботі встановлено зв'язок між молекулярною будовою, характером супрамолекулярної організації та реалізацією спінового переходу. Отримані результати розширюють уявлення про структурні чинники, що визначають поведінку СП-систем, і можуть бути використані як основа для конструювання нових функціональних матеріалів на основі координаційних сполук заліза.

[1] Coronado, E. Molecular magnetism: from chemical design to spin control in molecules, materials and devices. *Nat Rev Mater*, 2020, 5, 87–104.

[2] Linares, J.; Codjovi, E.; Garcia, Y. Pressure and Temperature Spin Crossover Sensors with Optical Detection. *Sensors* 2012, 12, 4479-4492.

[3] M. Seredyuk et al., 105 K wide room temperature spin transition memory due to a supramolecular latch mechanism, *J. Am. Chem. Soc.*, 2022, 144, 14297-14309.

ДИФЕРЕНЦІЙОВАНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ІОНІВ ЗАЛІЗА У ВОДІ ЗА ДОПОМОГОЮ ПОРТАТИВНОГО КРАПЕЛЬНОГО МЕТОДУ

Федяй В. Д., Гуцул Х. Р., Кирій С. О.

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

fediai.valerija@iill.kpi.ua

Залізо (Fe) у воді існує переважно у двох формах: двовалентній (Fe^{2+}) та тривалентній (Fe^{3+}). Двовалентне залізо є більш розчинним та біодоступним, надає воді металевий присмак і сприяє росту залізоокислювальних бактерій. Тривалентне залізо схильне до осадження у вигляді гідратованих оксидів і гідроксидів, що здатні адсорбувати важкі метали (наприклад, миш'як або свинець) та згодом вивільняти їх у воду [1]. Польовий контроль якості води є необхідним, оскільки в умовах аерування Fe^{2+} швидко окислюється до Fe^{3+} , що призводить до зниження його концентрації під час лабораторного аналізу [2].

В Україні триваючий збройний конфлікт завдав значної шкоди водопровідній інфраструктурі, позбавивши мільйони людей надійного доступу до безпечної питної води [3]. У таких умовах лабораторне тестування є логістично складним, тому портативні польові набори для швидкого визначення заліза набувають критичного значення.

Сучасні методи визначення заліза три так звані платформи: колориметричні методи засновані на реакціях Fe^{2+} або Fe^{3+} із хелатуючими хромофорами (1,10-фенантролін, ферозин, тіоціанат), що утворюють яскраво забарвлені комплекси [4]. Електрохімічні сенсори реєструють зміни струму або потенціалу внаслідок окисно-відновних перетворень іонів заліза на чутливому електроді [5]. Паперові тест-смужки та мікрофлюїдні пристрої це одноразові підкладки, просочені реагентами, що забезпечують недороге напівкількісне визначення безпосередньо на місці [6]. Усі платформи об'єднує спільна мета – портативність і мінімум обладнання, проте мають спільні виклики: інтерференція від супутніх іонів (Cu^{2+} , Mn^{2+} , Ca^{2+}) і змінного рН; труднощі з калібруванням поза лабораторією; нестабільність Fe^{2+} в присутності кисню, що вимагає негайного аналізу або диференціації форм заліза.

Мікрооб'ємний крапельний тест ґрунтується на реакції іонів заліза з тіоціанатом калію (KSCN): до мікропробірки додавали по 2 краплі 0,1 М KSCN і модельного розчину. Через 1-2 хвилини у присутності Fe^{3+} утворювався червоно-коричневий комплекс $\text{Fe}(\text{SCN})_n$, інтенсивність якого зростала з концентрацією, тоді як Fe^{2+} виразного забарвлення не давав. Для визначення Fe^{2+} проводили попереднє окислення, додаючи 2 краплі 1% $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$, після чого той самий KSCN-тест дозволяв оцінити початковий вміст Fe^{2+} за утвореним комплексом $\text{Fe}(\text{SCN})_3$.

Колір оцінювали візуально на білому тлі та фотографічно з вилученням HEX-кодів (табл. 1): зі зростанням концентрації Fe^{3+} забарвлення послідовно посилювалося від світло-жовтогарячого до темно-коричневого.

Введення окислювача до зразків з Fe^{2+} давало аналогічний результат, підтверджуючи ефективне перетворення $\text{Fe}^{2+} \rightarrow \text{Fe}^{3+}$.

Таблиця 1. Візуальне порівняння станів Fe^{3+} та Fe^{2+} при різних концентраціях іонів заліза

Форма Fe	Концентрація іонів заліза								
	0.01 мг/см ³	0.05 мг/см ³	0.1 мг/см ³	0.3 мг/см ³	0.5 мг/см ³	1.0 мг/см ³	2.0 мг/см ³	5.0 мг/см ³	10.0 мг/см ³
Окислена форма заліза (Fe^{3+})									
	#927c71	#9f7350	#a06f47	#962a00	#711000	#4f0810	#3a1213	#2e1415	#211517
Відновлена форма заліза (Fe^{2+})									
	#ffffff	#e0dfd8	#9f8d79	#948477	#8c7d71	#946f54	#a56937	#ac5609	#af4500
Окислення Fe^{2+}									
	#8a725a	#a87852	#a65714	#a82c00	#9c2600	#871300	#7f0900	#580a0a	#590000

Розроблено простий мікрооб'ємний крапельний тест на основі комплексоутворення Fe^{3+} з тіоціанатом, що забезпечує візуальне виявлення Fe^{3+} протягом 1-2 хвилин із мінімальним набором реагентів. Диференціацію $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ досягнуто шляхом введення контрольованого етапу окислення з персульфатом амонію, що дозволяє опосередковано кількісно оцінювати Fe^{2+} тим самим колориметричним методом. Розроблено напівкількісну кольорову шкалу, придатну для польового скринінгу якості питної води, зокрема в умовах гуманітарних криз.

- [1] Lytle, D. A., Magnuson, M. L., & Snoeyink, V. L.(2004).Effect of Oxidants on the Properties of Fe(III)Particles and Suspensions Formed from theOxidation of FE(II). Journal - American Water Works Association, 96(8), 112–124. <https://doi.org/10.1002/j.1551-8833.2004.tb10683.x>
- [2] Yilmaz, G., Bozkurt, U., & Magden, K.A.(2017).Effect of iron ions (Fe, Fe)on the formation and structureof aerobic granular sludge. Biodegradation, 28(1), 53–68.<https://doi.org/10.1007/s10532-016-9777-2>
- [3] Kyrii, S., Litynska, M., & Misevych, A.(2024).Thewar impact on Ukraine'smarine environment. Water and water purification technologies. Scientific and technical news, 38(1), 37–46. <https://doi.org/10.20535/2218-930012024316112>
- [4] Raiszadeh-Jahromi, Y., Rezazadeh-Bari, M., Majdinasab, M., & Amiri, S.(2025).Sensitive paper-based test strips for quantitativetermination of iron (Fe^{2+})in foodstuffs using optimized colorimetric reagents. Food Chemistry, 495, 146451.<https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2025.146451>
- [5] Motshakeri, M., Angoro, B., Phillips, A.R.J.et al.(2025).Advancements in mercury-free electrochemical sensors for iron detection: A decade of progress in electrode materials and modifications.Sensors, 25(5), 1474.<https://doi.org/10.3390/s25051474>
- [6] Thongchan, S., Sookpotarom, P., Praditweangkum, N.et al.(2025).A double-layered paper-based analytical device for speciation and simultaneous determination of iron in waters within single-shot analysis. Talanta Open, 100458.<https://doi.org/10.1016/j.talo.2025.100458>

АНАЛІТИЧНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ КОНТРОЛЮ ЧИСТОТИ АФІ ІНОЗИНУ ПРАНОБЕКС ЗА ПОКАЗНИКОМ «ЗАЛИШКОВІ РОЗЧИННИКИ»

Чемна Х. І.^{1,2}, Логойда Л. С.¹, Рудюк В. В.²

¹ Тернопільський національний медичний університет імені І.Я. Горбачевського
Міністерства охорони здоров'я України, Тернопіль, Україна

² Акціонерне товариство «Фармак», Київ, Україна

h.chemna@farmak.ua

У сучасній системі фармацевтичної розробки контроль органічних розчинників є обов'язковим складником відповідності принципам Належної виробничої практики (GMP) та вимогам провідних фармакопей світу [1, 2]. Чітке нормування вмісту летких домішок дозволяє підтвердити ефективність процесів очищення та сушіння під час синтезу активних фармацевтичних інгредієнтів (АФІ). А також, оскільки більшість із розчинників мають виражену токсичну, мутагенну або канцерогенну дію на організм людини, суворе дотримання лімітів їх вмісту в АФІ, встановлених міжнародною настановою ІСН Q3С [3], дозволяє нівелювати ризики розвитку побічних ефектів, що не пов'язані з основною дією препарату. У цьому контексті аналітичний контроль розчинників виступає ключовим інструментом захисту здоров'я пацієнта та забезпечення високої якості фармацевтичної продукції.

У класичному органічному синтезі для оперативного контролю вмісту розчинників зазвичай використовують метод ¹Н ЯМР-спектроскопії, проте для фармацевтичного аналізу АФІ цей підхід не забезпечує належної селективності та необхідної межі виявлення для багатьох розчинників [4]. Згідно з вимогами настанови ІСН Q3С, контроль розчинників 2-го класу, зокрема н-гексану, потребує точності вимірювань на рівні ppm, що робить метод газової хроматографії з полуменево-іонізаційним детектором (ГХ-ПІД) та парофазним пробовідбірником безальтернативним стандартом завдяки його високій селективності та здатності виявляти слідові кількості летких речовин.

Метою нашої роботи було розробити специфічну аналітичну методику визначення залишкових кількостей двох розчинників, а саме: 2-пропанолу та н-гексану, що використовуються під час синтезу субстанції Інозину Пранобекс, за допомогою ГХ-ПІД та парофазним пробовідбірником.

Як розчинник було обрано суміш води - *N,N*-диметилформаміду (5:1). Для досягнення високої роздільної здатності між неполярним н-гексаном та полярним 2-пропанолом методику було реалізовано з використанням кварцової капілярної хроматографічної колонки розміром 60 м x 0.25 мм з товщиною шару 1,4 мкм стаціонарної фази 6 % ціанопропілфенілу та 94 % полідиметилсилоксану (наприклад, DB-624, Agilent Technologies) з градієнтним режимом елюювання та швидкістю потоку 35 см/с. Поділ потоку становив 3:1, як газ-носії

використовували гелій для хроматографії Р. Час врівноваження зразків становив 20 хв за температури 105 °С, загальний час проведення аналізу – 43 хв.

На хроматограмі випробовуваного розчину (рис. 1) виявлено піки досліджуваних розчинників з часом утримування (RT): 2-пропанолу – 7,0 хв, н-гексану – 9,2 хв, а також додатковий пік з RT близько 19,3 хв, що виходить поряд з розчинником. Було встановлено, що пік належить *N,N*-диметиламіно-2-пропанолу, що є складовою АФІ Інозину Пранобекс.

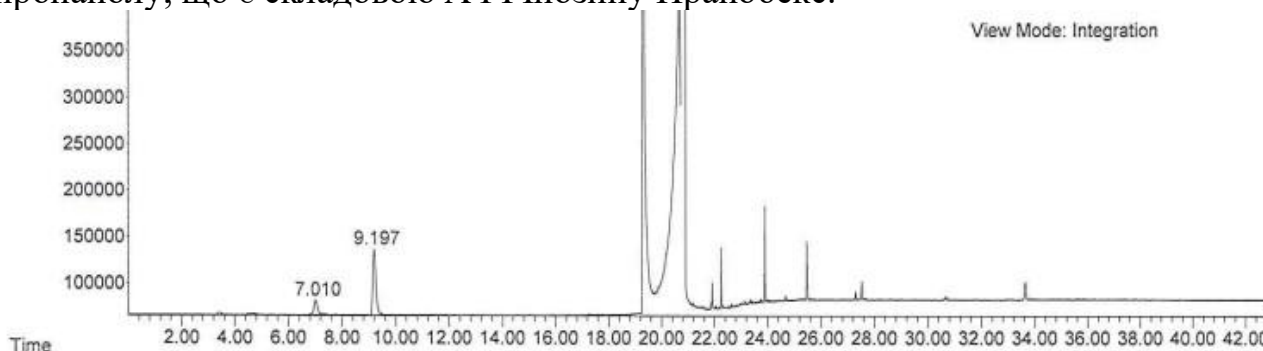


Рис. 1. Типова хроматограма випробовуваного розчину.

Роздільна здатність (R_s) між 2-пропанолом та н-гексаном встановлена на рівні близько 9,5, що значно перевищує фармакопейні вимоги ($R_s > 1,5$) [2], компоненти матриці та розчинник не заважають визначенню цільових розчинників, що забезпечує високу селективність методики.

Таким чином, розроблена методика є релевантним аналітичним інструментом для вирішення поставленої задачі, а її подальше впровадження у практику контролю якості АФІ можливе після експериментального підтвердження її валідаційних характеристик.

[1] European Pharmacopoeia. 12th ed., European Directorate for the Quality of Medicines and HealthCare (EDQM), Strasbourg, 2024.

[2] Державна Фармакопея України: в 3 т., 2-е вид., Державне підприємство «Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів», Харків, 2015.

[3] ICH, Impurities: Guideline for Residual Solvents Q3C(R8), International Council for Harmonisation of Technical Requirements for Pharmaceuticals for Human Use, 2021. URL: https://database.ich.org/sites/default/files/ICH_Q3C-R8_Guideline_Step4_2021_0422.pdf.

[4] K. Grodowska, A. Parczewski, Organic solvents in the pharmaceutical industry, Acta Pol. Pharm. 67 (2010) 3–12.

НАДВИСОКОЧАСТОТНИЙ УЛЬТРАЗВУК У ВИЗНАЧЕННІ ВМІСТУ СВИНЦЮ ТА КАДМІЮ У МОЛОКОПРОДУКТАХ

Шевченко І. Р., Юрченко О. І., Бакланов О. М.

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

ivan.shevchenko333@gmail.com

Свинець та кадмій відносяться до токсичних мікроелементів, їхній вміст нормується у харчових продуктах, зокрема у молокопродуктах. Вміст кадмію та свинцю в молоці не повинен перевищувати, згідно норм України, Європейського союзу та ФАО/ВОЗ 0.01 та 0.020 мг/кг відповідно. У кисломолочних продуктах вміст свинцю не повинен перевищувати 0.10 мг/кг, а кадмію 0.03 мг/кг [1].

Пряме визначення свинцю та кадмію у молокопродуктах, навіть таким чутливим методом, як атомно-абсорбційною спектрометрією не є можливим внаслідок значних матричних впливів [1]. У зв'язку з чим, використовують мінералізацію. При чому, при аналізі молокопродуктів найбільш часто використовують мокру мінералізацію, яка більш експресна, на відміну від сухої мінералізації. Однак мокра мінералізація також є тривалою - займає від 5 до 8 год. [1].

В запропонованій роботі нами було досліджено можливість використання для інтенсифікації мокрої мінералізації молокопродуктів надвисокочастотного ультразвуку частотою від 8 до 14 МГц при інтенсивності від 12 до 18 Вт/см².

Наважку молокопродукту масою 2,00 г (зважено з похибкою 0,0001 г) (при аналізі молока, вершків жирністю до 8 % та кисломолочних продуктів) або 1,00 г (при аналізі вершкового масла, сиру, вершків жирністю понад 8 %) приливали 3 см³ нітратної кислоти (1:1) та діяли ультразвуком частотою від 8 до 14 МГц при інтенсивності від 12 до 18 Вт/см² протягом 2 - 5 хв.

Мінералізат розбавляли бідистильованою водою до об'єму – 6 см³. В отриманому, таким чином розчині, визначали вміст свинцю та кадмію полум'яним атомно-абсорбційним методом, згідно [1].

Частота ультразвуку суттєво впливала на ступінь вилучення свинцю та кадмію. Найбільший ступінь вилучення досягається при обробці аналізованих проб ультразвуком частотою 10-12 МГц. При цьому ступінь вилучення свинцю та кадмію при аналізі молока пастеризованого була 97-98 % та 98-99% відповідно, а при аналізі вершків «Президент» жирністю 20 % для свинцю 95-97 %, а при аналізі кадмію 96-97%. Саме при частоті ультразвуку від 8 до 14 МГц утворюється для даної системи переважаюча більшість малих сферичних кавітаційних пухирців, при схлопуванні саме яких інтенсифікуються дані процеси. Про утворення переважаючої більшості саме малих сферичних кавітаційних пухирців свідчить наявність у вторинному шумі переважаючої кількості (більш 55 %) інфразвукової складової частотою 7-15 Гц [1].

Також експериментально встановлено, що визначальним фактором інтенсифікуючої дії надвисокочастотного ультразвуку на процеси інтенсифікації

мокрої мінералізації є кавітаційні процеси за участю радикалів. Так, при насичені проби газами, розчинними у воді, кавітація неможлива, завдяки тому, що розчинені у воді гази проникають всередину кавітаційного пухирця та запобігають електричній пробі та нівелюють збуджені стани [1]. Так, при насичені CO_2 ступінь вилучення свинцю при оптимальних параметрах ультразвуку не перевищував 12 %, а кадмію 18 %, у той же час за відсутності насичення проби CO_2 ступінь вилучення становив для свинцю 96- 97% та для кадмію 97 - 98 %. При цьому інтенсивність ультразвуку повинна бути 14-17 Вт/см².

Розроблено методика атомно-абсорбційного визначення вмісту свинцю та кадмію у молокопродуктах. Правильність методики перевіряли методом «введено-знайдено», а також аналізом одних і тих же проб альтернативною методикою (табл.). В якості якої було використано методика атомно-абсорбційного визначення вмісту свинцю та кадмію в молокопродуктах після мокрої мінералізації з інтенсифікацією ультразвуком низької частоти [1].

Таблиця Результати атомно-абсорбційного визначення свинцю та кадмію

Найменування продукту	введено Pb і Cd по мг/кг		Знайдено мікроелементів, мг/кг Відносне стандартне відхилення (n = 6. p=0,95).			
	Pb	Cd	Pb	Sr	Cd	Sr
Визначення з використанням надвисокочастотного ультразвуку						
Молоко пастеризоване фермерське, 3,2%	0	0	0.0041	0.064	0.0016	0.052
Кефір, 1%	0.010	0.010	0.0139	0.067	0.0114	0.058
Молокія	0	0	0.0075	0.063	0.0011	0.057
Вершки «Президент», жирністю 20%	0.010	0.010	0.0163	0.061	0.0109	0.059
Вершки «Президент», жирністю 20%	0	0	0.0078	0.067	0.0017	0.057
	0.010	0.010	0.0173	0.071	0.0101	0.062
Визначення з використанням низькочастотного ультразвуку						
Молоко пастеризоване фермерське, 3,2%	0	0	0.0033	0.100	0.0012	0.098
Кефір, 1%	0.010	0.010	0.0118	0.107	0.0101	0.096
Молокія	0	0	0.0061	0.100	0.0008	0.100
Вершки «Президент», жирністю 20%	0.010	0.010	0.0145	0.102	0.0097	0.102
Вершки «Президент», жирністю 20%	0	0	0.0069	0.109	0.0017	0.108
	0.010	0.010	0.0160	0.105	0.0101	0.109

[1] Yurchenko O., Baklanov A., Chernozhuk T.. Chemical applications of ultrasound. On the use of ultrasound in the analyses and technology of brains and sodium chloride solutions. Lambert academic publishing, 2021.

АТОМНО-АБСОРБЦІЙНЕ ВИЗНАЧЕННЯ МІДІ, ЦИНКУ, СВИНЦЮ ТА ЗАЛІЗА В ФАРМАЦЕВТИЧНИХ СУБСТАНЦІЯХ

Штефан С. О., Осипов А. В., Юрченко О. І.

Харківський національний університет ім. В. Н. Каразіна
sofiia.shtefan@student.karazin.ua

Вміст елементарних домішок в фармацевтичних субстанціях та допоміжних речовинах, які використовуються при виробництві лікарських засобів, регулюються вимогами Державної фармакопеї України, Європейської фармакопеї, фармакопеї Сполучених Штатів, а також настанові щодо елементарних домішок ICH Q3D(R2).

Аскорбінова кислота є важливим водорозчинним антиоксидантним вітаміном для людського організму, бере участь в багатьох біохімічних реакціях. Заліза декстран є історично першим і одним із найбільш значущих синтетичних аналогів феритину. Препарати заліза декстрану забезпечують швидке та ефективно відновлення рівня гемоглобіну, що має критичну важливість для пацієнтів, які не засвоюють пероральні форми заліза або потребують негайного поповнення його запасів. Сорбіт використовується як допоміжна речовина у фармацевтичних препаратах. Широко застосовується в косметиці та харчових продуктах.

Необхідність визначення мікроелементів в фармацевтичних субстанціях потребує розробки методики з покращеними метрологічними характеристиками. Для цього використовують новітні розчини на основі поверхнево-активних речовин та новітні стандартні зразки складу на основі ацетилацетонатів металів.

Мета роботи – розробити, оптимізувати та оцінити методику атомно-абсорбційного визначення міді, цинку, свинцю та заліза, яка відповідає вимогам зеленої хімії, із застосуванням сучасних способів пробопідготовки з поліпшеними метрологічними характеристиками.

Досліджено вплив неіоногенної поверхнево-активної речовини Тритон Х-100 на величину аналітичного сигналу під час атомно-абсорбційного визначення міді, цинку, свинцю та заліза в фармацевтичних субстанціях. Підвищено чутливість та прецизійність визначення аналітів за рахунок використання розчинів Тритон Х-100 ($\omega=5\%$), градувальних розчинів на основі ацетилацетонатів металів та обробці аналізованих зразків ультразвуком протягом 20 хв. Чутливість атомно-абсорбційного визначення міді підвищується в 1,80 рази, цинку – в 1,60 рази, свинцю – в 1,50 рази, заліза – в 1,50 рази. Визначено вміст аналітів в фармацевтичних субстанціях атомно-абсорбційним методом. Проведена перевірка правильності результатів аналізу шляхом варіювання маси наважки зразку та методом «введено-знайдено». Показано, що значна систематична похибка відсутня. Атомно-абсорбційним методом визначено межу виявлення аналітів. Показано, що вона нижче літературних даних.

Зараз проводиться валідація методики атомно-абсорбційного визначення аналітів в фармацевтичних субстанціях.

РОЗРОБКА ВЕРХ МЕТОДИКИ ОДНОЧАСНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ЛІЗИНОПРИЛУ ТА АМЛОДИПІНУ В ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБАХ

Яворська Х. Д., Горин М. М., Логойда Л. С.

Тернопільський національний медичний університет
імені І. Я. Горбачевського МОЗ України

yavorska_hrydmy@tdmu.edu.ua

Вступ. Для досягнення стабільного контролю артеріального тиску та зниження ризику серцево-судинних ускладнень, зумовлених артеріальною гіпертензією (АГ), у клінічній практиці широко застосовується комбінована фармакотерапія, що передбачає поєднання лікарських засобів (ЛЗ) із різними механізмами дії. Однією з таких комбінацій є поєднання лізиноприлу та амлодипіну. Важливим при використанні комбінованих ЛЗ є ретельний аналітичний контроль, який забезпечує точність дозування, стабільність лікарського препарату та безпеку пацієнтів. Оскільки хроматографічні методи аналізу є одними з найперспективніших інструментів аналітичного забезпечення якості ЛЗ, тому актуальною є розробка валідованих ВЕРХ методик для одночасного визначення лізиноприлу та амлодипіну в ЛЗ.

Матеріали та методи. Рідинний хроматограф Shimadzu LC-2050 C з діодноматричним детектором та програмним забезпеченням LabSolution. ФСЗ лізиноприлу та амлодипіну (чистота $\geq 98\%$ (ВЕРХ)) виробництва Sigma-Aldrich Chemicals Co. (Сент-Луїс, Міссурі, США). Таблетки «Екватор» (10 мг лізиноприлу та 5 мг амлодипіну) промислового виробництва. Триетиламін (ТЕА), етанол, фосфорна кислота конц. та вода ($\geq 99.9\%$ чистоти) марки Honeywell, Riedel-de Haen (Німеччина).

Результати. Розробка хроматографічної методики одночасного аналізу сполук з різною ліпофільністю вимагає методологічного та комплексного підходу, що включає оптимізацію складу та рН рухомої фази та типу нерухомої фази. Експериментальним шляхом встановлено, що найкраще елюювання амлодипіну та лізиноприлу спостерігається при використанні рухомої фази в складі буфер триетиламіну (ТЕА) доведеним до рН 3.7 фосфатною кислотою та етанолу у співвідношенні 85-15. Час утримування лізиноприлу та амлодипіну становив 3.25 та 4.39, відповідно. В процесі експериментальних досліджень встановлено оптимальні параметри хроматографування: швидкість потоку – 1.0 мл/хв, температура – 35°C, довжина хвилі детектування – 215 нм. Параметри придатності хроматографічної системи: кількість теоретичних тарілок (3827, 5965), коефіцієнт асиметрії (1.465, 1.261), площі піків (743126, 241648), розділення (5.071) для лізиноприлу та амлодипіну, відповідно.

Висновки. Розроблено ВЕРХ методику одночасного визначення амлодипіну та лізиноприлу в лікарських засобах, що може використовуватись лабораторіями аналітичного спрямування.

[1] Kazakevich, Y. V., & Lobrutto, R. (2006). HPLC for pharmaceutical scientists. John Wiley & Sons

ОРГАНІЧНА ХІМІЯ

NEW CHEMICAL REACTION – GEM-DIFLUORINATIVE RING EXPANSION OF ALKENES

Sham V. A.^{1,2}, Borysov O. V.^{1,2}, Mykhailiuk P. K.^{1,3}

¹ Enamine Ltd, Winston Churchill Str. 78, 02094 Kyiv, Ukraine.

² Institute of Organic Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine

³ Chemistry Department, Taras Shevchenko National University of Kyiv

VadimGuba@gmail.com

The unique properties of fluorine have facilitated its incorporation from pharmaceuticals and agrochemicals to functional materials. The incorporation of fluorine atoms into drug candidates has been acknowledged as successful strategy to enhance their pharmacokinetic and physicochemical attributes by fine-tuning potency, polarity, pKa-value, lipophilicity, and metabolic stability.

During our work by introduction of a C–F bond into aliphatic systems the new reaction of ring expansion has been developed (Fig 1A)[1]. This reaction was driven by various stabilizing forces such as hyperconjugation, dipole-dipole, and charge-dipole interactions, so we have found formation of other products of this reaction (Fig 1B).

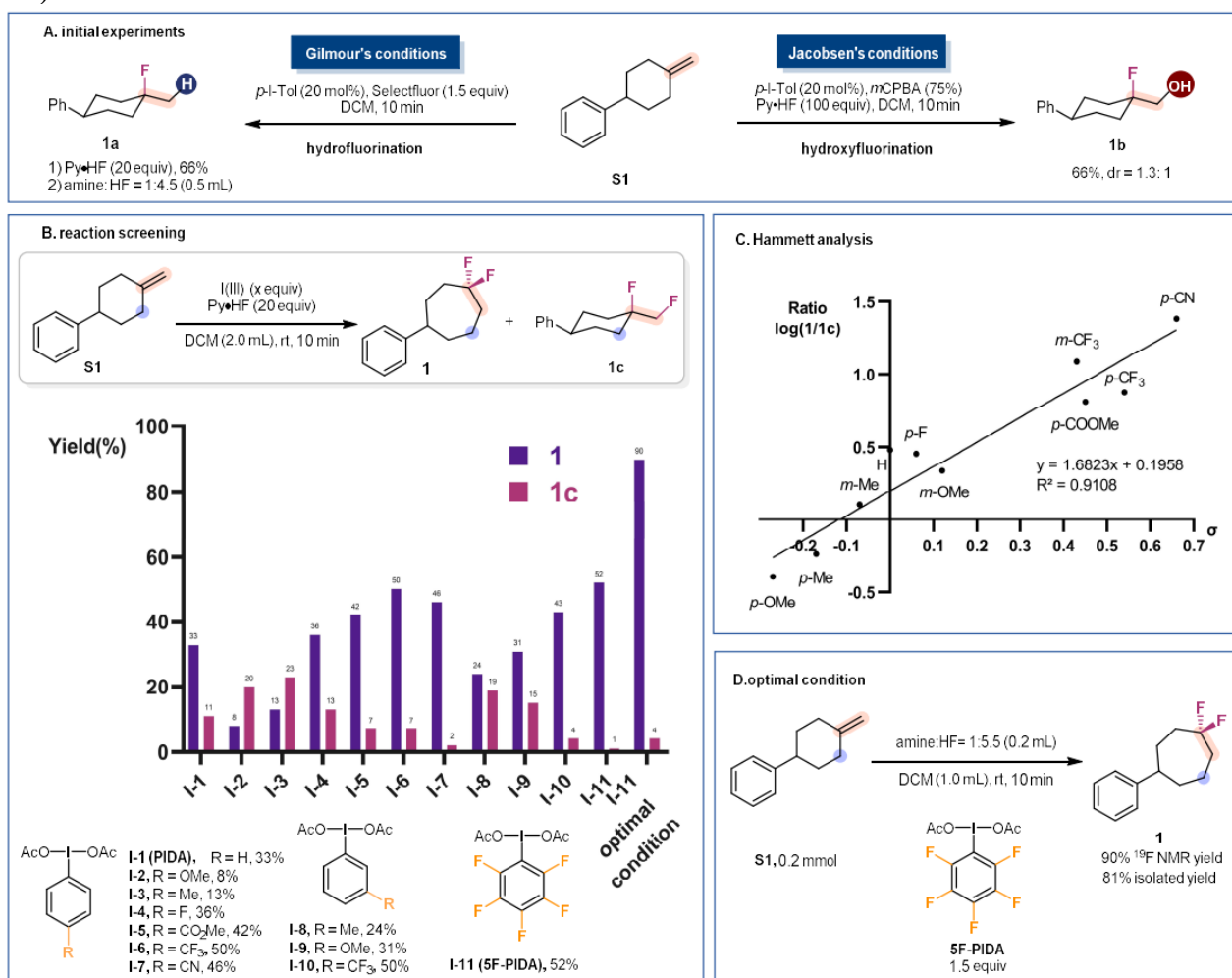


Fig 1. Basic reaction and validation protocol.

We detail how fine-tuning the electronic properties of I(III) species (Fig. 1B) allows us to mitigate undesired ring size-retained hydrofluorination and 1,2-difluorination products, enabling the productive synthesis of ring-enlarged difluorinated rings. We have proposed mechanism of this reaction (Fig. 2B) which was based on well-known oxidative ring expansion (Fig. 2A). The method efficiently constructs a diverse array of rings, including macro-, fused-, spiro-, bridged- as well as natural product-derived structures. The reaction is rapid and practical, as demonstrated by decagram scale of adamantane derivative within 30 minutes (Fig. 2E). It was found that 5F-PIDA (Fig. 2D) showed best results for the ring expansion reaction.

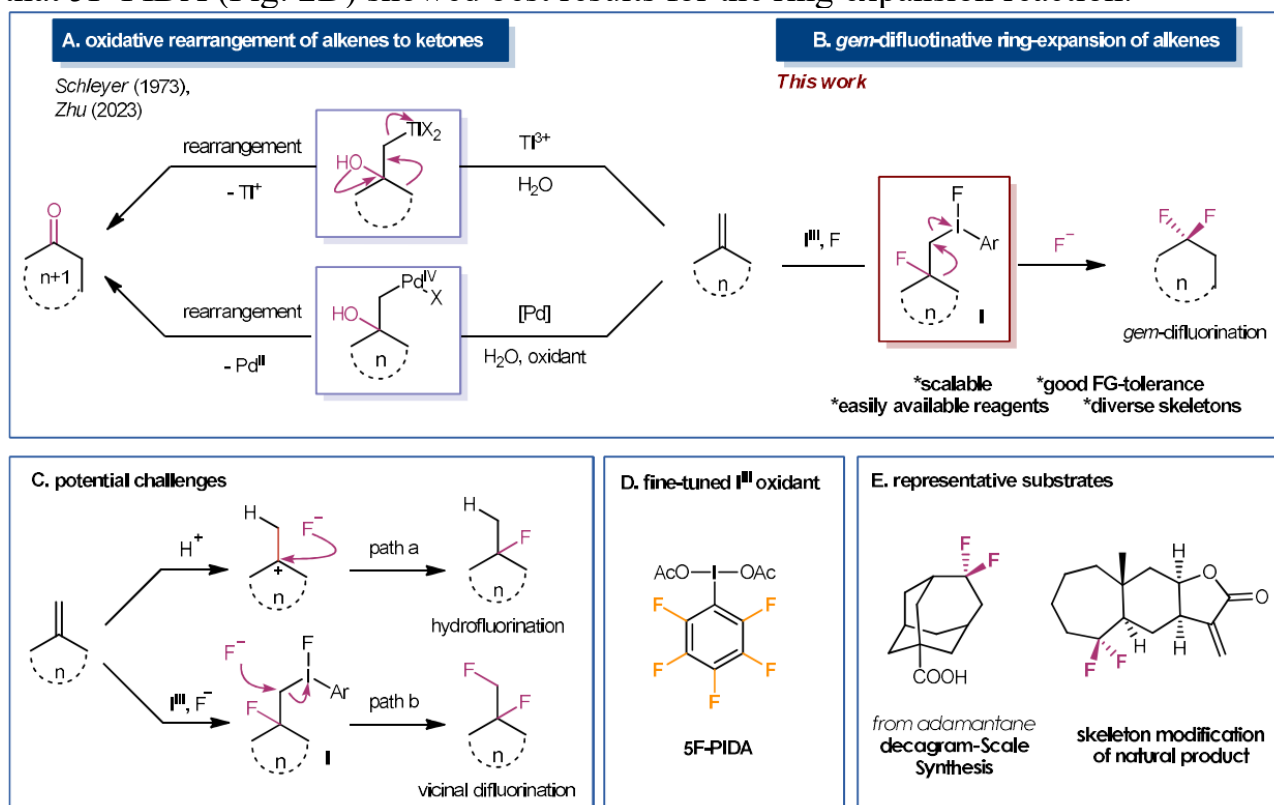


Fig 2. Mechanism of oxidative fluorination and potential of the reaction.

[1] Y.Li, X.-B.Liu, V.Sham, I.Logvinenko, J.-H.Xue, J.-Y.Wu, J.-L.Fu, S.Lin, Y.Liu, Q.Li, P. K.Mykhailiuk, H.Wang, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2025, 64, e202422899. <https://doi.org/10.1002/anie.202422899>

ЙОДОВАНІ ГЕПТАМЕТИНОВІ ЦІАНІНОВІ БАРВНИКИ ЯК ФОТОСЕНСИБІЛІЗАТОРИ ДЛЯ АНТИМІКРОБНОЇ ФОТОДИНАМІЧНОЇ ТЕРАПІЇ В БЛИЖНІЙ ІНФРАЧЕРВОНІЙ ОБЛАСТІ

Ващенко. А. П., Колосова О. С., Власенко Г. С., Чернишова О. С., Кривошей О. І., Татарець А. Л.

ДНУ «НТК «Інститут монокристалів» НАН України

xa13121136@student.karazin.ua

Швидке поширення бактерій, що мають резистентність до антибіотиків, вимагає нових терапевтичних стратегій, серед яких важливе місце посідає антимікробна фотодинамічна терапія (АФДТ) [1]. У АФДТ для створення цитотоксичних перпаратів використовують органічні фотосенсибілізатори (ФС), які активуються під дією світла. У клінічній практиці наразі домінують ФС на основі порфіринів [2], проте ці сполуки не дуже ефективні в терапевтично значущому ближньому інфрачервоному діапазоні (БІЧ). Альтернативою є ціанінові барвники, які, навпаки, сильно поглинають у БІЧ, але на заваді їх використанню у АФДТ стає їх зазвичай незадовільна фототоксичність. Нещодавно показано, що введення атомів йоду у ціанінові хромофори може значно підвищувати їхню активність у АФДТ [3], що істотно поліпшує перспективи створення більш ефективних ФС із сильним поглинанням у БІЧ.

У цій роботі ми синтезували серію гептаметинових ціанінових барвників **nI-Cy7** ($n = 2, 4, 6$), що містять сульфонові сольобілізуючі групи та різну кількість атомів йоду, порівняли спектральні та фотофізичні властивості отриманих барвників з відомими нейодованими (**Cy7**, **НІТС**) та йодованими (**nI-НІТС**) барвниками (рис), а також оцінили вплив замісників на фотодинамічну інактивацію грампозитивних (*S. aureus*) та грамнегативних (*E. coli*) бактерій.

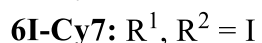
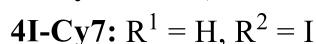
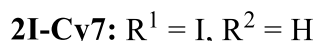
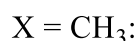
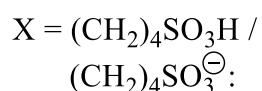
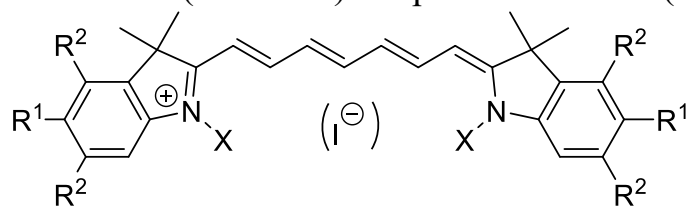


Рис. Структурні формули йодованих ціанінів

Всі барвники поглинають та випромінюють у БІЧ (740—796 нм), мають високі коефіцієнти екстинкції ($210000\text{—}260000\text{ M}^{-1}\cdot\text{cm}^{-1}$) і не виявляють агрегації в метанолі при концентраціях до 5 мкМ. Квантові виходи генерації синглетного кисню (Φ_{Δ}) зростають із збільшенням кількості атомів йоду в ряду: **Cy7** ~ **НІТС** < **2I-Cy7** \approx **4I-Cy7** < **6I-Cy7**.

При концентраціях до 100 мкМ усі барвники виявляють незначну темнову цитотоксичність проти *S. aureus* та *E. coli*. **4I-Cy7** демонструє виражену фототоксичність проти грампозитивних (при 50 мкМ) та грамнегативних (при 100 мкМ) бактерій. В той же час, **2I-Cy7** характеризується зниженою активністю проти *S. aureus* та відсутністю активності проти *E. coli*, ймовірно, через його більшу розчинність у воді та зменшену ефективність взаємодії з бактеріальними клітинами. Тетра- та гексайодовані похідні (**4I-Cy7**, **6I-Cy7**) поведуться подібно один до одного при дозі світла 50 Дж/см² або 100 Дж/см².

Одержані результати створюють основу для розроблення поліметинових фотосенсибілізаторів наступного покоління з високою фототоксичною ефективністю.

[1] Soares, J. M.; Corrêa, T. Q.; Barrera Patiño, C. P.; et al. Synergistic Paradigms in Infection Control: A Review on Photodynamic Therapy as an Adjunctive Strategy to Antibiotics. *ACS Infect. Dis.* 2025, 11, 2671–2691. <https://doi.org/10.1021/acsinfecdis.5c00369>.

[2] Amos-Tautua, B.; Songca, S.; Oluwafemi, O. Application of Porphyrins in Antibacterial Photodynamic Therapy. *Molecules* 2019, 24, 2456. <https://doi.org/10.3390/molecules24132456>.

[3] Semenova, O.; Kobzev, D.; Yazbak, F.; et al. Unexpected effect of iodine atoms in heptamethine cyanine dyes on the photodynamic eradication of Gram-positive and Gram-negative pathogens. *Dyes Pigm.* 2021, 195, 109745. <https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2021.109745>.

ФЛУОРОДЕБОРИЛЮВАННЯ ЯК НОВИЙ МЕТОД ОДЕРЖАННЯ ВІНІЛФЛУОРИДІВ

Демчук О. П.^{1,2}, Ляшук О. С.^{3,4}, Готинчан А. Г.^{2,3}, Трачова В. В.^{1,4},
Гришук О. В.^{1,4}, Григоренко О. О.^{1,3,4}

¹ Enamine Ltd., Київ

² Інститут органічної хімії НАН України, Київ

³ ПУ «НДІ Єнамін», Київ

⁴ Київський національний університет імені Тараса Шевченка

a.hotynchan@enamine.net

За останні десятиліття введення атома Флуору в органічні молекули стало важливим інструментом для зміни їхніх фізико-хімічних параметрів, а саме кислотності та ліпофільності. Найчастіше замісники, що містять атом Флуору, розглядаються як метаболічно стабільні ізостери природних фрагментів [1]. Зважаючи на це, фрагмент вінілфлуориду є перспективним замісником амідного фрагменту, що служить конформаційним блокаторм пептидних зв'язків [2].

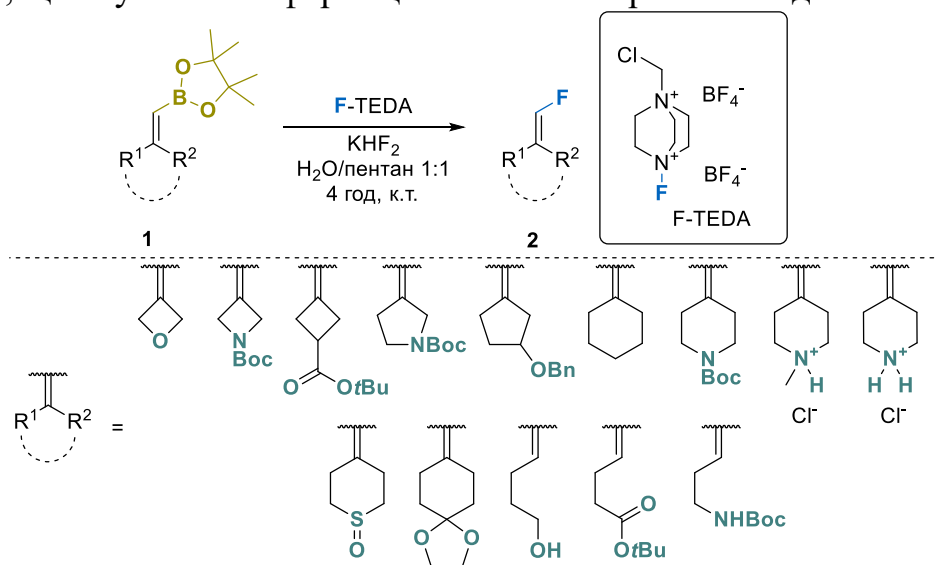


Рис. 1. Загальна методика синтезу вінілфлуоридів та отримані субстрати.

Дане дослідження ґрунтувалось на розробці нового синтетичного підходу в отриманні похідних вінілфлуоридів, який полягав у взаємодії вініленборопінаколатів **1** із F-TEDA за наявності трьох еквівалентів KHF₂ у системі пентан-вода (1:1) за кімнатної температури. Розроблений протокол дозволяє одержувати низку вінілфлуоридів **2** як аліфатичного так і ароматичного ряду з виходами від 40 до 80 % (Рис.1). Також встановлено, що дане перетворення можна проводити із субстратами, що містять незахищені гідроксильну, вторинну та третинну аміногрупи, а також толерує захищені гідроксильні, карбонільні та карбоксильні фрагменти.

Механістичне обґрунтування спостережуваних результатів синтезу було встановлено шляхом додаткових експериментів на модельних субстратах та квантово-хімічними розрахунками.

Роботу представлено в рамках виконання гранту Національного фонду досліджень України №2025.05/0009

- [1] Meanwell, N. A. Fluorine and Fluorinated Motifs in the Design and Application of Bioisosteres for Drug Design. *J. Med. Chem.* 61, 5822–5880 (2018).
- [2] Kumari, S., Carmona, A. V., Tiwari, A. K. & Trippier, P. C. Amide Bond Bioisosteres: Strategies, Synthesis, and Successes. *J. Med. Chem.* 63, 12290–12358 (2020).

ПОРІВНЯННЯ КАТАЛІТИЧНОЇ АКТИВНОСТІ КИСЛОТНО-МОДИФІКОВАНИХ АЛЮМОСИЛКАТІВ В АЦЕТАЛІЗАЦІЇ ГЛІЦЕРИНУ БЕНЗАЛЬДЕГІДОМ

Давтян А. С., Левченко О. О.

Фізико-хімічний інститут ім. О.В. Богатського НАН України, Одеса

araksya2103@gmail.com

В сучасних умовах зростає інтерес до розробки ефективних та екологічно безпечних каталізаторів для переробки відновлюваної сировини. Одним із перспективних напрямів є використання гліцерину – побічного продукту виробництва біодизелю [1], для синтезу цінних органічних сполук, зокрема ацеталів, які знаходять широке застосування в хімічній, фармацевтичній промисловостях та як добавки до палив. У зв'язку з цим, актуальним є дослідження каталітичних властивостей природних алюмосилкатів, модифікованих кислотами, як доступних та ефективних каталізаторів процесів ацеталізації гліцерину.

В даній роботі зіставлені каталітичні властивості модифікованих сірчаною кислотою природних алюмосилкатів українських родовищ: бентоніту (H-Bent), кліноптилоліту (H-CLI) і трепелу (H-Tr) в ацеталізації гліцерину бензальдегідом.

Виявлено, що утворюються п'яти- і шестичленні циклічні ацеталі, *цис*-конфігурації п'ятичленний ацеталь та *цис*- і *транс*-конфігурації шестичленний що погоджується з даними літератури [2]. Селективність продуктів реакції не змінюється незалежно від умов реакції і складають 58% п'ятичленний циклічний ацеталь *цис*-конфігурації, 34% і 7% шестичленний циклічний ацеталь *цис*- і *транс*-конфігурації, відповідно.

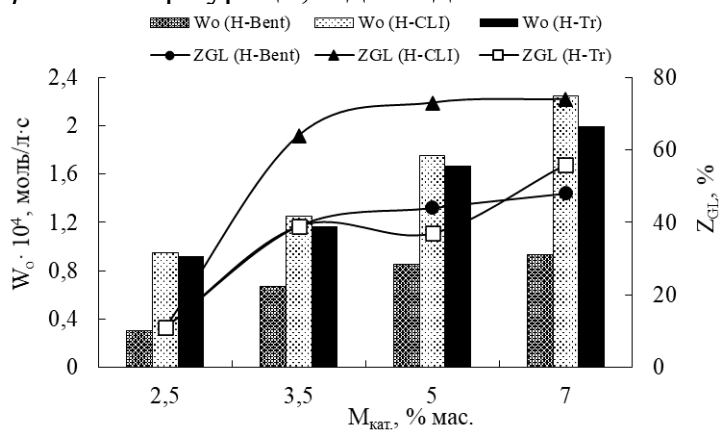


Рис. 1. Вплив масової частки каталізатора на конверсію гліцерину і початкову швидкість його витрати

За величинами початкової швидкості (W_0) витрати гліцерину, зразок H-Bent поступається активністю H-CLI і H-Tr, а за величинами конверсії гліцерину (Z_{GL}) – є більш активним. Але слід зазначити, що у випадку H-Bent реакцію проводили при меншому надлишку бензальдегіду (1:2), а у присутності H-CLI і H-Tr – при більшому (1:5), оскільки

останні не досить активні при співвідношенні 1:2.

Зі збільшенням температури реакції ($50 \div 60^\circ\text{C}$), у присутності H-Bent швидкість зростає у п'ять разів і практично не змінюється з подальшим

зростанням температури ($60 \div 70^\circ\text{C}$). У присутності H-CLI і H-Tr при збільшенні температури реакції в діапазоні $50 \div 60^\circ\text{C}$ початкова швидкість витрати гліцерину майже не змінюється та зростає вдвічі при збільшенні температури в діапазоні $60 \div 70^\circ\text{C}$. В процесі реакції H-Bent витримує три цикли роботи, H-CLI – чотири, а H-Tr лише два цикли.

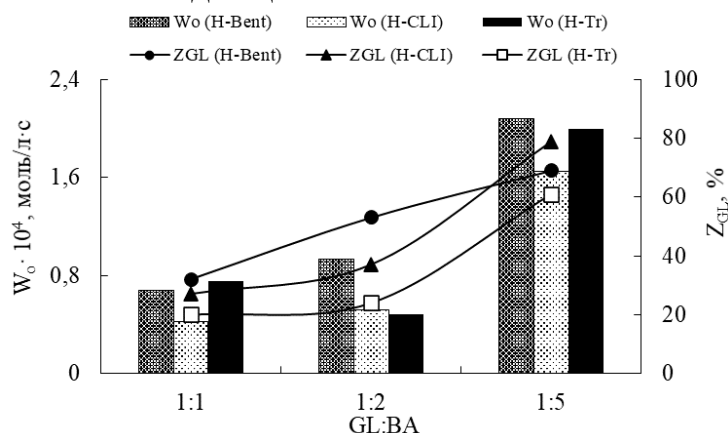


Рис. 2. Вплив мольного співвідношення GL:BA на конверсію гліцерину і початкову швидкість його витрати

У присутності трьох каталізаторів, при збільшенні мольного співвідношення реагентів від 1:1 до 1:2, початкова швидкість витрати гліцерину істотно не змінюється та лише при більшому надлишку бензальдегіду (1:5) швидкість суттєво зростає. Конверсія зростає лінійно та як помітно, при еквімольному співвідношенні реагентів, активність каталізаторів

практично подібна. При подвійному надлишку бензальдегіду, активніший H-Bent, а при значному надлишку активність каталізаторів знову ж таки практично схожа, але швидкості реакції вищі.

Реакцію умовно досліджували відповідно до моделі Міхаеліса-Ментен. Визначено концентраційний порядок реакції за гліцерином: у присутності H-Bent він становить 1,5, тоді як у присутності H-CLI і H-Tr наближається до другого порядку. Отримані результати свідчать про складний механізм процесу, ймовірно пов'язаний із адсорбцією реагентів на активних центрах каталізаторів та їх подальшою взаємодією на поверхні. Відмінності у порядку реакції зумовлені кислотністю та структурно-адсорбційними характеристиками каталізаторів.

Таким чином, показано, що кислотно-модифіковані алюмосилікати проявляють каталітичну активність в ацеталізації гліцерину бензальдегідом із утворенням п'яти- та шестичленних циклічних ацеталів. Показано, що активність каталізаторів залежить від їх структури і умов проведення реакції. Найвищу ефективність за конверсією гліцерину продемонстрував H-Bent, тоді як H-CLI та H-Tr потребують більшого надлишку бензальдегіду для досягнення високих швидкостей реакції. Отримані результати свідчать про перспективність використання модифікованих сірчаною алюмосилікатів як доступних і ефективних каталізаторів у процесах переробки гліцерину.

[1] Almeida E. L., Olivo J. E., Andrade C. M. G. Production of biofuels from glycerol from the biodiesel production process – A brief review. *Fermentation*. 2023. Vol. 9. P. 869-887.

[2] Graphene-promoted acetalisation of glycerol under acid-free conditions / N. Oger, F. L. Yuting, E. Le Grogne, etc. // *Green Chem*. 2016. Vol. 18. P. 1531-1537.

СИНТЕЗ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ФІЗИКО-ХІМІЧНИХ ПАРАМЕТРІВ БУДІВЕЛЬНИХ БЛОКІВ НА ОСНОВІ 6-(ТРИФЛУОРОМЕТИЛ)СПІРО[3.3]ГЕПТАНУ

*Клименко Д. С.^{2,3}, Оліфір О. С.^{1,2}, Черних А. В.^{2,3},
Ляшук О. С.^{2,3}, Григоренко О. О.^{2,3}*

¹ Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії імені В.П. Кухаря НАН України

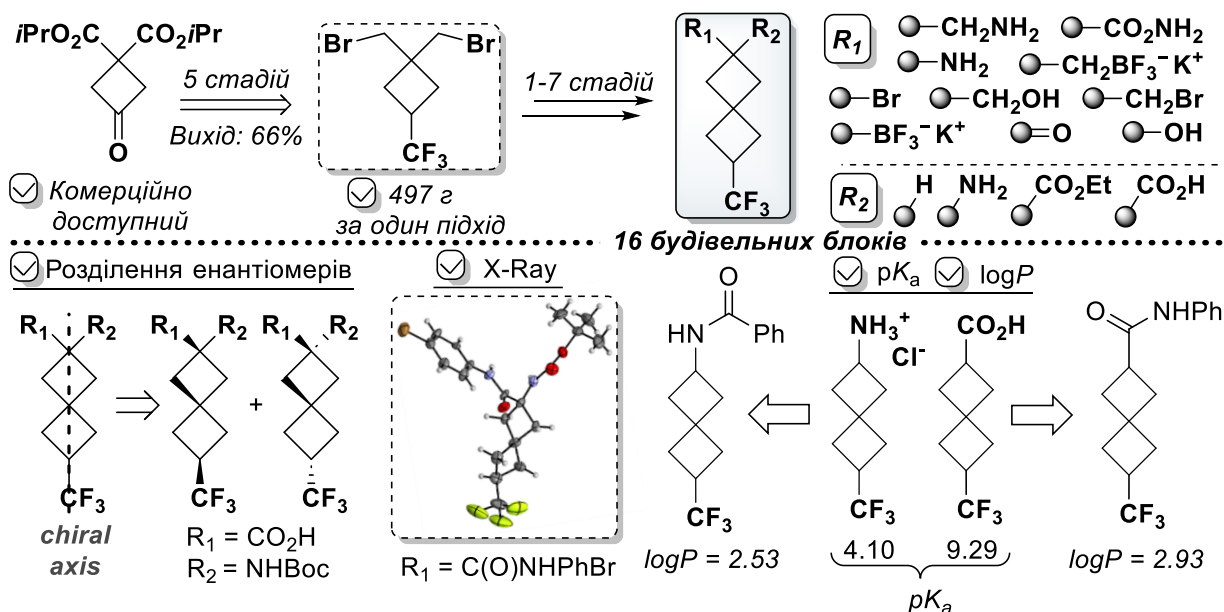
² Enamine SRI, 02094, Київ, вул. Вінстона Черчіля 67;

³ Київський національний університет імені Тараса Шевченка

klymenkodaria0@gmail.com

Оптимізація властивостей біологічно активних молекул часто базується на використанні конформаційно обмежених каркасів та введенні спеціалізованих замісників (зокрема, флуоровмісних). Раніше було продемонстровано, що 6,6-дифлуоро- та 6-флуорозаміщені похідні спіро[3.3]гептану на основі спіро[3.3]гептану можуть виступати у ролі біоізостерів циклоалканів;^{1,2} у межах даної роботи досліджено синтез CF₃-вмісних будівельних блоків на основі вищевказаного спіроциклічного каркасу.

Розроблений підхід до синтезу монофункціоналізованого 6-(трифлуорометил)спіро[3.3]гептанового скафолду та подальша функціоналізація дозволили отримати низку моно- і біфункціональних похідних, зокрема спирти, аміни, броміди, трифлуороборати, *N*-Вос-захищені амінокислоти та їх гомологи. Фізико-хімічні параметри (кислотність (pK_a) і ліпофільність (LogP)) було визначено експериментально і порівняно з відповідними значеннями найближчих аналогів.



[1] Malashchuk, A.; Chernykh, A. V; Dobrydnev, A. V; Grygorenko, O. O. Fluorine-Labelled Spiro[3.3]Heptane-Derived Building Blocks: Is Single Fluorine the Best?

Eur. J. Org. Chem. 2021, 2021 (35), 4897–4910. <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/ejoc.202100804>.
[2] Olifir, O. S.; Chernykh, A. V; Dobrydnev, A. V; Grygorenko, O. O.; Moroz, Y. S.; Voitenko, Z. V; Radchenko, D. S. Multigram Synthesis of Advanced 6,6-Difluorospiro[3.3]Heptane-Derived Building Blocks. Eur. J. Org. Chem. 2021, 2021 (47), 6541–6550. <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/ejoc.202000432>.

ДИМЕРНІ ІОННІ РІДИНИ ЯК ПЕРСПЕКТИВНИЙ КЛАС СПОЛУК ДЛЯ СТВОРЕННЯ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ КОМПОЗИЦІЙ

Потапчук М. О., Корнієнко І. С., Свердліковська О. С.

Навчально-науковий інститут «Український державний хіміко-технологічний університет» Українського державного університету науки і технологій

o.sverdlikovska@gmail.com

Димерні іонні рідини є перспективним класом функціональних сполук, у яких поєднуються висока полярність, низька леткість, структурна варіативність і можливість цілеспрямованого регулювання комплексу експлуатаційних характеристик. На відміну від мономерних аналогів, димерна організація катіонної частини забезпечує більшу щільність функціональних центрів у межах однієї молекулярної системи, що створює передумови для посилення міжфазної взаємодії, адсорбції на поверхні твердих тіл і реалізації поліфункціональної дії у складі композицій різного призначення.

На підставі напрацювань щодо морфолінійвмісних димерних іонних рідин показано, що вирішальне значення для формування властивостей мають природа органічних замісників, наявність етерних і гідроксильних фрагментів, а також співвідношення між полярними та гідрофобними структурними елементами. Морфолінієвий катіонний центр забезпечує виражену спорідненість до полярних поверхонь, здатність до іон-дипольних і донорно-акцепторних взаємодій, тоді як ароматичні, бензильні або оксипропіленові фрагменти визначають сумісність із органічним середовищем, рухливість і характер самоорганізації у дисперсних та багатофазних системах.

Завдяки такій будові димерні іонні рідини можуть розглядатися як ефективні компоненти функціональних композицій для технічних систем. Для мастильних матеріалів особливий інтерес становлять сполуки з оксипропіленовими фрагментами, оскільки вони поєднують достатню органофільність із можливістю формування адсорбційного граничного шару на металічній поверхні. Наявність полярного катіонного центра сприяє закріпленню на поверхні тертя, а органічний радикал забезпечує сумісність із вуглеводневою основою. Унаслідок цього димерні іонні рідини можуть виконувати функції протизношувальних, антифрикційних і термостабілізуювальних добавок у складі мастильних композицій.

Не менш перспективним є використання димерних іонних рідин у композиціях для очищення палив від сірковмісних сполук. За наявності бензильних, дибензильних та алкілароматичних замісників зростає спорідненість іонної рідини до ароматичних компонентів паливної фази та створюються кращі умови для специфічної взаємодії з тіофеновими й бензотіофеновими структурами. Це дозволяє розглядати такі сполуки як селективні екстракційні середовища або як функціональні добавки, здатні підвищувати ефективність десульфуризації.

Для електрохімічних композицій димерні іонні рідини цікаві завдяки поєднанню низької леткості, іонної природи та регульованої рухливості зарядоносіїв. Найбільш доцільними є структури з відносно менш жорсткою організацією та фрагментами, що знижують температуру склування і в'язкість системи. Такі сполуки можуть виступати пластифікувальними іонопровідними компонентами рідких електролітів, покривних композицій і гібридних електролітних матеріалів.

Перспективність димерних іонних рідин для створення функціональних композицій зумовлена також їхньою здатністю впливати на реологію, змочування, диспергування та стабілізацію міжфазних меж. У поліграфічних і суміжних матеріалах це відкриває можливість використання їх як антистатичних агентів, модифікаторів в'язкості та допоміжних диспергаторів пігментів. У біоактивних композиціях для рослинництва димерні іонні рідини можуть виконувати роль носіїв функціональних компонентів і регуляторів поверхневих властивостей робочих розчинів, що потребує окремого експериментального підтвердження, але є структурно обґрунтованим.

Отже, димерні іонні рідини морфолінієвого типу слід розглядати як перспективний клас сполук для створення функціональних композицій різного призначення. Їх переваги визначаються поєднанням полярного іонного центра, варійованої органічної оболонки та димерної будови, що забезпечує гнучке регулювання сумісності, адсорбційної здатності, транспортних і технологічних характеристик. Подальший розвиток цього напрямку пов'язаний із цілеспрямованим добором катіонно-аніонних комбінацій для конкретних прикладних систем.

ДОСЛІДЖЕННЯ КОМПЛЕКСОУТВОРЕННЯ ЕТИЛ 5-МЕТИЛ-4,7-ДИГІДРО-[1,2,4]ТРИАЗОЛО[1,5-А]ПРИМІДИН-6-КАРБОКСИЛАТУ (ДНР) З МОДИФІКОВАНИМИ β - та γ -ЦИКЛОДЕКСТРИНАМИ

Коробка А. Ю.^{1,2}, Збруєв О. І.², Чебанов В. А.^{1,2}

¹ Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

² Інститут хімії функціональних матеріалів
НТК «Інститут монокристалів» НАНУ

annakorobka23@gmail.com

Циклодекстрини (ЦД) – це родина природних циклічних олігосахаридів, що складаються з шести або більше залишків α -D-глюкопіранози та широко використовуються для створення комплексів із біологічно активними речовинами. Інкапсуляція таких сполук у внутрішню порожнину макроциклу дозволяє вирішити ключові проблеми: підвищити розчинність та біодоступність малорозчинних ліків, захистити речовини від окиснення чи фотодеструкції, а також забезпечити їх пролонговане вивільнення.

Однак застосування природних ЦД часто обмежене їхньою недостатньою власною розчинністю, особливо у випадку β -ЦД, та відсутністю специфічних груп для взаємодії з молекулами-гостями. Шляхом функціоналізації первинного обода β - та γ -ЦД у даній роботі було синтезовано пер-(2-гідроксиетил)аміноциклодекстрини (рис. 1 (**1a** та **1b**)) та гідрохлориди пер-6-аміноциклодекстринів (рис. 1 (**2a** та **2b**)) з метою створення ефективних водорозчинних рецепторів.

Молекулою «гостя» обрано етил 5-метил-4,7-дигідро-[1,2,4]триазоло[1,5-а]піримідин-6-карбоксилат (ДНР), структура якого наведена на рис. 1 (**3**). ДНР виявляє антимікробну активність [1], проте має обмежену розчинність у воді. Утворення супрамолекулярних комплексів ДНР з циклодекстринами може значно покращити його розчинність та біодоступність.

Для порівняння зв'язування ДНР з немодифікованими та модифікованими макроциклами було апробовано різні умови та молярні співвідношення реагентів. Супрамолекулярні комплекси було синтезовано кип'ятінням у воді суміші ДНР та відповідного макроциклу (β - та γ -ЦД, **1a** та **1b**, **2a** та **2b**) в молярному співвідношенні 1:1 протягом п'яти годин. Знайдено, що за цих умов з β - та γ -ЦД зв'язувалось 40-45% ДНР. Кількість незв'язаного ДНР визначали методом екстракції дихлоретаном (у якому розчинний лише «гість», тоді як «хазяїн» та комплекс залишаються в осаді) з подальшим аналізом концентрації методом високоефективної рідинної хроматографії (ВЕРХ).

Результати порівняльного аналізу свідчать про значне зростання комплексоутворювальної здатності модифікованих макроциклів порівняно з їх природними аналогами. Зокрема, використання рецепторів **2a** та **2b** за аналогічних умов дозволяє зв'язати 60% та 77% ДНР відповідно, тоді як для сполук **1a** та **1b** цей показник сягає 86% та 92%. Збільшення часу

комплексоутворення до 8 годин для рецептору **1b** дозволило досягти практично кількісного (98%) зв'язування субстрату, що доводить ефективність модифікацій макроциклів і відкриває перспективи для їх подальшого використання в супрамолекулярній, медичній та фармацевтичній хімії.

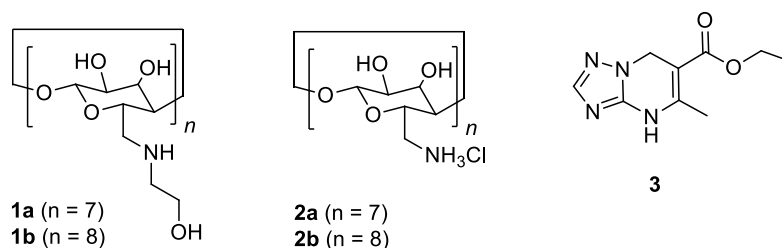


Рис. 1. Структурні формули модифікованих циклодекстринів (**1a-b**, **2a-b**) та DHP (**3**).

[1] Komykhov, S. A.; Tkachenko, I. G.; Musatov, V. I.; Diachkov, M. V.; Chebanov, V. A.; Desenko, S. M. Multicomponent Hot-Water Synthesis of 7-Unsubstituted 4,7-Dihydro-1,2,4-triazolo[1,5-a]pyrimidines and Their Antimicrobial and Antifungal Activity. *Arkivoc* 2016, 2016 (4), 277–287.

БАГАТОКОМПОНЕНТНИЙ СИНТЕЗ N-ЗАМІЩЕНИХ 1,5,6,7-ТЕТРАГІДРО-4Н-ІНДОЛ-4-ОНІВ

Кравчук О. Ф., Коробка О. П., Горбатюк Ю. О., Колос Н. М.

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

oleg.f.kravchuk@gmail.com

Сполуки тетрагідроіндолонового ряду (4,5,6,7-тетрагідроіндол-4-они) є насиченими аналогами індолу з підвищеним вмістом sp^3 -гібридизованих атомів, що робить їх привабливими об'єктами медичної хімії. Відомо, що заміна плоского ароматичного каркасу на більш насичені фрагменти сприяє покращенню зв'язування з активними центрами ферментів та підвищенню розчинності сполук.

One-pot синтез за участю енамініонів циклічних 1,3-дикетонів, арилглюксалів та β -дикарбонільних сполук дозволяє ефективно отримувати похідні тетрагідроіндол-4-онів, функціоналізовані за пірольним циклом [1,2].

У даній роботі досліджено синтез похідних тетрагідроіндол-4-онів із використанням ароматичних глюксалів **1**, метиленактивних компонент **2** і **3**, а також енамініонів циклічних 1,3-дикетонів, модифікованих за положенням **5** (сполуки **4**, **5**). Енамінони були одержані за оригінальними методиками конденсацією відповідних 1,3-дикетонів з алкіламінами та алкоксиалкіламінами.

Покрокове введення реагентів з хроматографічним контролем перебігу реакції дозволяє отримувати цільові продукти **6a–c** з високими виходами. Структуру синтезованих сполук підтверджено методами ЯМР ^1H , ^{13}C та HRMS.

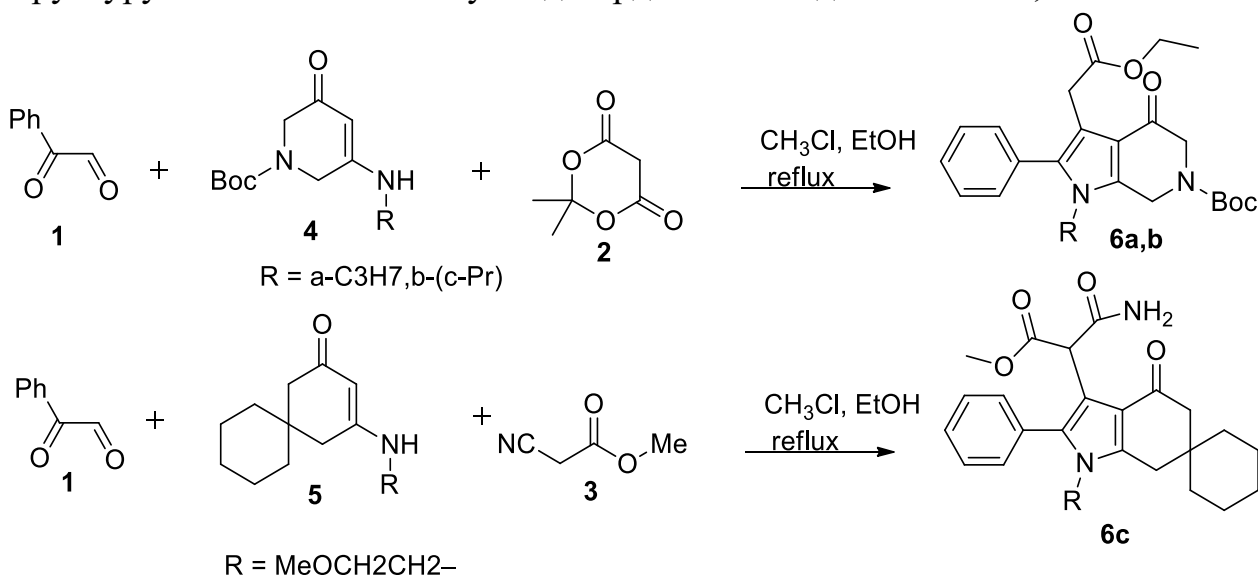


Рис.1. Схеми однореакторних синтезів похідних тетрагідроіндол-4-ону на основі різних енамініонів.

У ході реакції за участю метил 2-ціаноацетату спостерігається гідроліз нітрильної групи, що відкриває можливості для подальших функціоналізацій молекули за участю як естерної, так і амідної груп (рис. 1).

[1] Zhang, F.; Li, C.; Yang, Z.; Shao, L.; Qi, C.; Shen, Z. Solid acid-catalyzed one-pot multi-step cascade reaction: Multicomponent synthesis of indol-3-yl acetates and indol-3-yl acetamides in water. *Tetrahedron* 2022, 117–118, 132839.

[2] Kateryna I. Marchenko, Nadiia N. Kolos. Multicomponent synthesis of 1,5,6,7-tetrahydro-4H-indol-4-one derivatives. *Chemistry of Heterocyclic Compounds* 2023, 59(11/12), 717–722.

РЕГІОСЕЛЕКТИВНІСТЬ ГАЛОГЕНУВАННЯ 4-(БУТ-3-ЕН-1-ІЛОКСИ)-5,6-ДИМЕТИЛ-2-(ТІОФЕН-2-ІЛ)ТІЄНО[2,3-d]ПІРИМІДИНУ

Криворучко А. Р., Кут Д. Ж., Кут М. М.

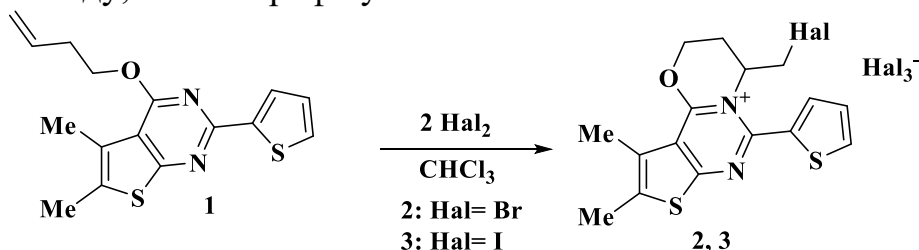
ДВНЗ «Ужгородський національний університет»

kryvoruchko.arsen@student.uzhnu.edu.ua

Реакції електрофільної внутрішньомолекулярної гетероциклізації широко використовуються для побудови різних гетероциклічних сполук. Процес анелювання додаткового циклу залежить від таких основних та важливих факторів, як поляризація кратного зв'язку, природа нуклеофільного центру, наявність стеричних факторів у молекулі субстрату, природа електрофільного реагенту, полярність розчинника та довжина алкенільного(алкінільного) замісника. Метою наведеного дослідження є вивчення регіоселективності галогенування 4-(бут-3-ен-1-ілокси)-5,6-диметил-2-(тіофен-2-іл)тієно[2,3-d]піримідину під дією таких галогенуючих агентів як бром та йод.

Досліджуваний бутенільний етер **1**, містить в своїй структурі один алкенільний фрагмент та нуклеофільний центр — атом нітрогену N³ тієнопіримідинового циклу. Наявність таких структурних особливостей досліджуваного етеру **1** робить його придатним для використання та дослідження в реакціях гетероанелювання.

Доведено, що дія броду чи йоду на 4-(бут-3-ен-1-ілокси)-5,6-диметил-2-(тіофен-2-іл)тієно[2,3-d]піримідин **1** приводить до регіоселективного утворення тригалогенідів 4-(галогенометил)-9,10-диметил-6-(тіофен-2-іл)-3,4-дигідро-2H-тієно[2',3':4,5]піримідо[6,1-b][1,3]оксазин-5-ію **2**, **3**. Найкращими умовами проведення реакції між бутенільним субстратом **1** та галогенами виявились використання хлороформу в якості розчинника та двократний надлишок галогенуючого електрофільного реагенту. Вихід отриманих ангулярних тригалогенідних солей складав 89% у випадку бродування, та 79% при використанні йоду, як електрофілу.



Таким чином, в результаті галогенування 4-(бут-3-ен-1-ілокси)-5,6-диметил-2-(тіофен-2-іл)тієно[2,3-d]піримідину відбувається анелювання оксазинового циклу до остова тієнопіримідину з утворенням ангулярних тригалогенідів тієно[2',3':4,5]піримідо[6,1-b][1,3]оксазин-5-ію.

1,2,3,4-ТЕТРАГІДРОПІРОЛО[1,2-*a*]ПІРАЗИН-7-КАРБОКСИЛАТИ/КАРБОНОВІ КИСЛОТИ: СИНТЕЗ ТА СТРУКТУРНІ МОДИФІКАЦІЇ

Нечесний Я. І., Кемський С. В., Вовк М. В.

Інститут органічної хімії НАН України, Київ

nechesnyu.yaroslav@gmail.com

Азотовмісні гетероциклічні структури займають ключові позиції в хімічному просторі органічних сполук, що обумовлено широкими можливостями їх практичного застосування у розробці нових фармацевтичних. Важливе місце в їх масиві посідають конденсовані піролазинові системи – піроло[1,2-*a*]піразини, зокрема їх гідровані аналоги – 1,2,3,4-тетрагідропіроло[1,2-*a*]піразини, серед яких знайдені сполуки із антиаритмічною, антигіпоксичною, антиепілептичною, антигіпертензивною та антибактеріальною активністю [1-2].

З огляду на викладене вище, актуальною видається розробка зручних методів синтезу нових похідних 1,2,3,4-тетрагідропіроло[1,2-*a*]піразинів, додатково функціоналізованих по положенню 7 естерними/карбоксилатними групами, які можуть бути вдало використані в різноманітних трансформаціях. Запропонований нами підхід до їх конструювання (рис. 1) передбачає добудову 1,2,3,4-тетрагідропіразинового ядра до препаративно доступних естерів пірол-3-карбонових кислот **1a, b**. N-алкілуванням останніх 1-азидо-2-(метилсульфоніл)етаном **2** отримували 1-(2-азидоетил)заміщені похідні **3a, b**, каталітичне гідрування яких воднем у метанолі приводить до гідрохлоридів 1-(2-аміноетил)заміщених похідних **4a, b**. Реакцією останніх з ароматичними та аліфатичними альдегідами **5a-i** в оцтовій кислоті отримували естери 2-заміщених 1,2,3,4-тетрагідропіроло[1,2-*a*]піразин 7-карбонових кислот **6a-j**.

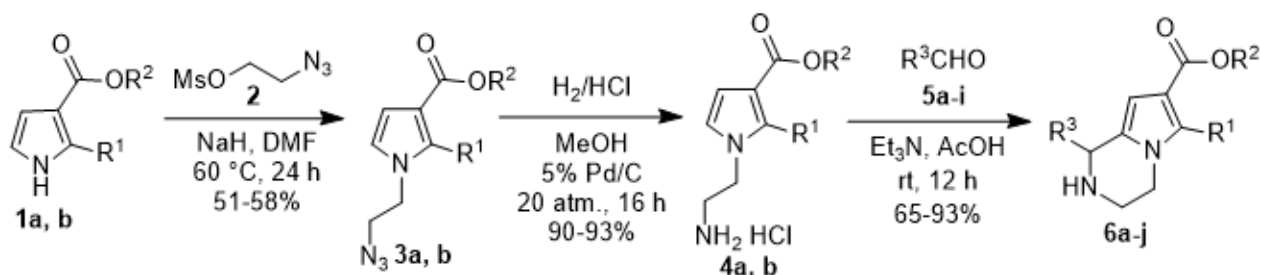


Рис. 1. Схема синтезу естерів 1-заміщених 6-метил(феніл)-1,2,3,4-тетрагідропіроло[1,2-*a*]піразин-7-карбонових кислот **6a-j**

Отримані естери **6a-j** піддавали структурним модифікаціям за естерною та аміногрупою (рис. 2). Гідроліз естерної функції пірольного ядра був використаний для одержання відповідних 7-карбонових кислот **7a-j** у вигляді гідрохлоридів. У свою чергу, функціоналізацією аміногрупи типовими електрофільними реагентами синтезована низка N-Вос-, N-ацил- та N-

сульфонілпохідних **11a-f**, м'який гідроліз яких дав можливість отримати відповідні 7-карбонові кислоти **12a-f**.

Розроблено раніше невідомий метод структурної трансформації 2-заміщених 6-метил(феніл)-1,2,3,4-тетрагідропіроло[1,2-а]піразин-7-карбоксилатів **6a-j** у відповідні 3,4-дигідропохідні **8a-j**, що ґрунтується на селективному окисненні R³CH-NH-фрагмента піразинового циклу діацетоксидобенzenом (PIDA). Їх гідроліз був використаний для одержання гідрохлоридів 3,4-дигідропіроло[1,2-а]піразин-7-карбонових кислот **9a-g**. Варто зауважити, що у випадку флуорометильних замісників у положенні 1 біциклічної системи для таких похідних в умовах реакції гідролізу відбувається дегідрофлуорування, що приводить до повної ароматизації гетероциклічної системи з утворенням кислот **10a-c**. Будову всіх синтезованих сполук підтверджено методами ЯМР-спектроскопії на ядрах ¹H, ¹³C та ¹⁹F.

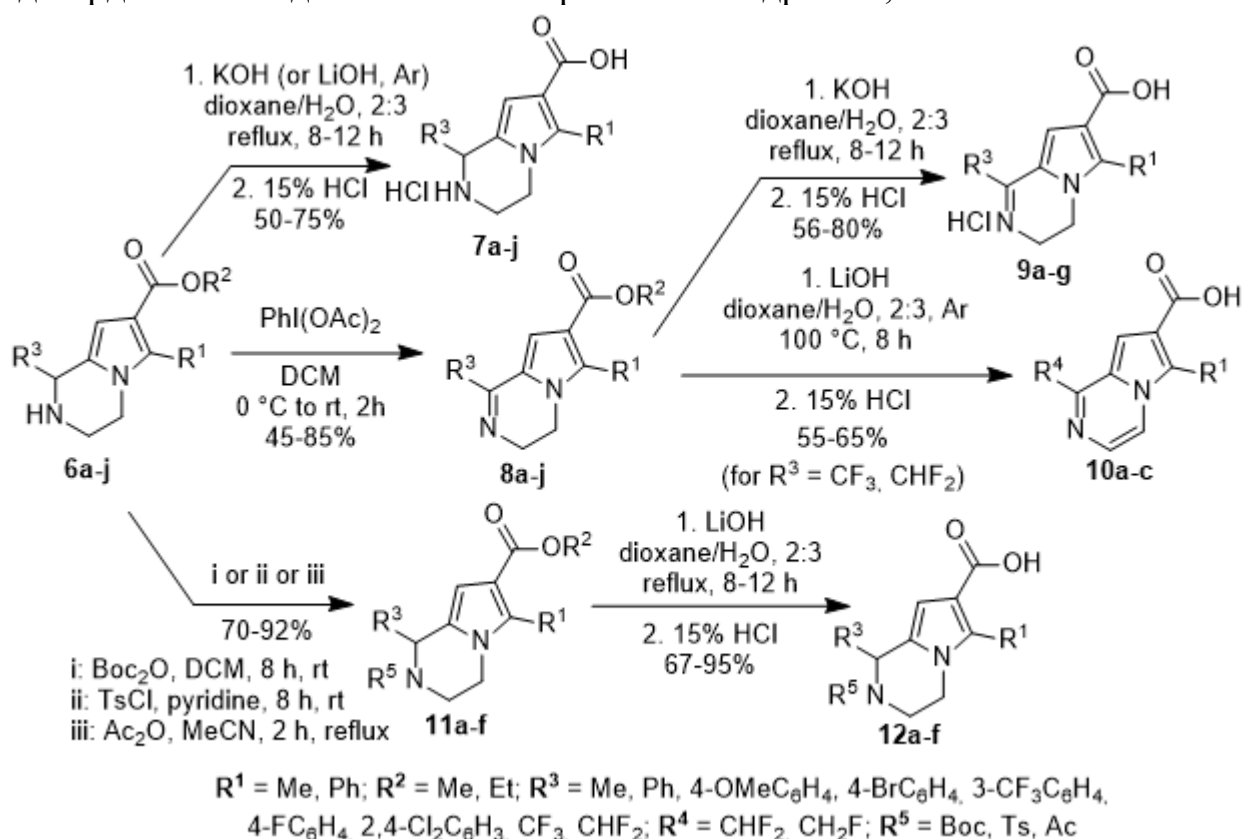


Рис. 2. Структурні модифікації естерів 6-метил(феніл)-1,2,3,4-тетрагідропіроло[1,2-а]піразин 7-карбонових кислот **6a-j**

[1] Y. He, M. Lin, Z. Li, X. Liang, G. Li, and J. C. Antilla, "Direct synthesis of chiral 1,2,3,4-tetrahydropyrrolo[1,2-a]pyrazines via a catalytic asymmetric intramolecular aza-Friedel-Crafts reaction," *Org. Lett.*, vol. 13, no. 17, pp. 4490–4493, 2011, doi: 10.1021/ol2018328.

[2] C. Sanaboina, S. K. Mandal, and S. Jana, "Metal Free Simple and Efficient Synthesis of Tetrahydropyrrolo[1,2-a]-Pyrazine Based on a Cascade Strategy," *Lett. Org. Chem.*, vol. 20, no. 10, pp. 916–921, 2023, doi: 10.2174/1570178620666230327114033.

СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ БЕНЗО[*d*][1,2]ТІАЗЕПІН-3-ОКСИДІВ

Помалін М. С., Гись В. Ю., Мілохов Д. С., Добриденєв О. В., Воловенко Ю. М.

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

potalin@ukr.net

Сульфоксиміни привертають значну увагу медичної хімії та залишаються актуальною темою досліджень останніх десятиліть. Завдяки своїм структурним і електронним особливостям сульфоксиміновий фрагмент надає молекулам унікальне поєднання полярності, здатності до утворення водневих зв'язків, тривимірності та хіральності на атомі сірки, що дає змогу виходити за межі «плоских» структур і модулювати фармакологічний профіль сполук.

Наше дослідження присвячене малодослідженим семичленним ендоециклічним сульфоксимінам, зокрема їх бензоконденсованим похідним, анельованим по [*d*]-грані. У літературі описано лише два підходи до синтезу заміщених бензо[*d*][1,2]тіазепін-3-оксидів [1]. У цій роботі запропоновано простий та універсальний метод синтезу, що ґрунтується на осново-індукованій циклізації із застосуванням стратегії *CSIC* (*carbanion-mediated sulfonamide intramolecular cyclization*). Розроблений підхід дає змогу одержувати бензоконденсовані ендоециклічні кетосульфоксиміни, заміщені алкільними, арильними та гетероарильними групами при атомі сірки (рис. 1).

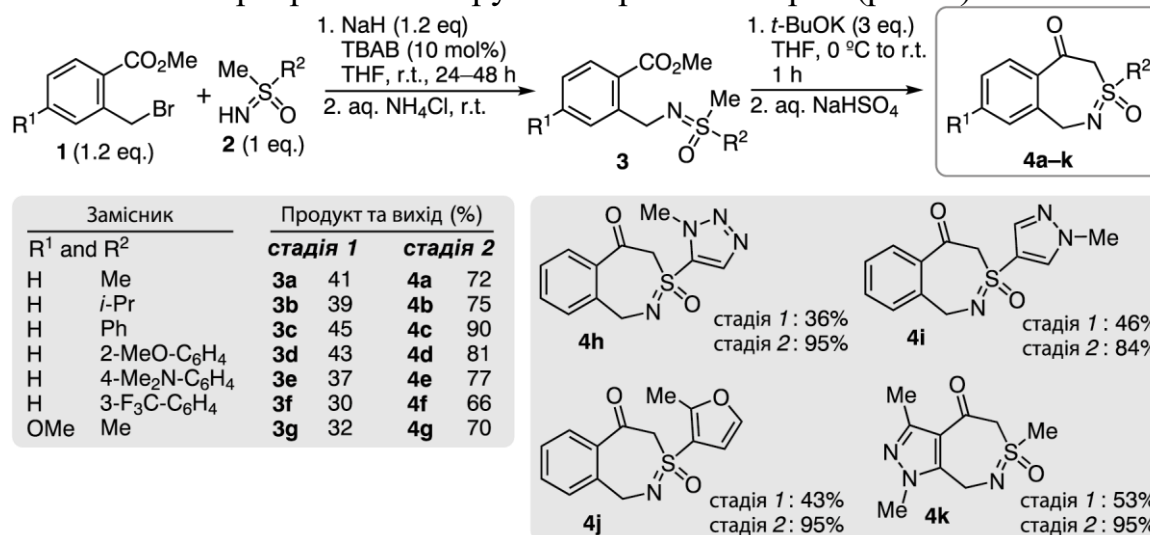
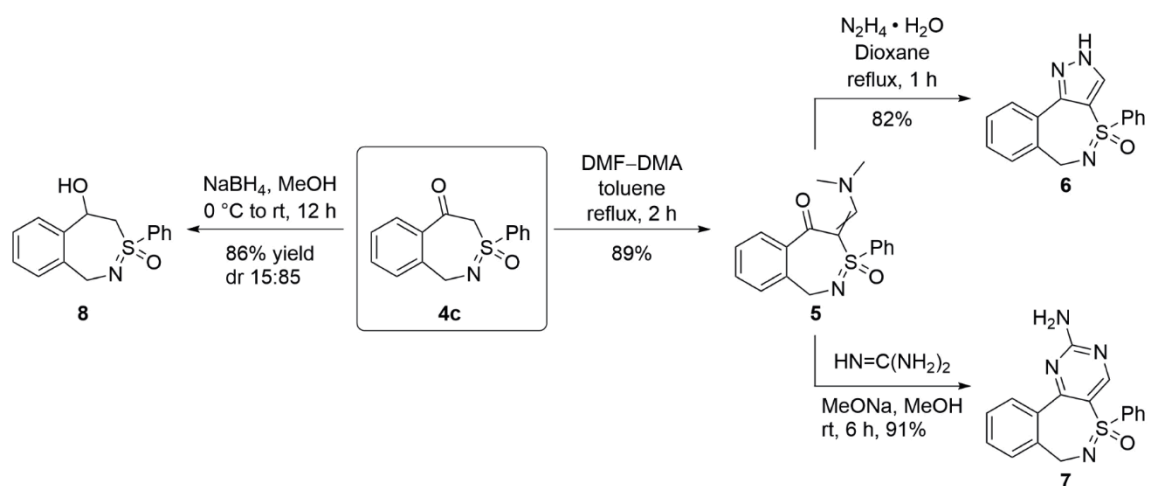


Рис. 1 Схема синтезу бензо[*d*][1,2]тіазепін-3-оксидів **4a-k**

Продемонстровано синтетичну цінність циклічних кетосульфоксимінів шляхом проведення подальших перетворень на модельній сполуці **4c**. Зокрема, взаємодія з DMF-DMA приводила до утворення цінного синтетичного прекурсора **5** з високим виходом, який надалі використовували в реакціях гетероциклізації з *N,N*-бінуклеофілами. Відновлення кетосульфоксиміну **4c** боргідридом натрію, як і очікувалося, приводило до утворення спирту **8** у вигляді суміші діастереомерів (*dr* 15:85) (рис. 2).

Рис. 2 Модифікації бензо[*d*][1,2]тіазепін-3-оксиду 4с

[1] (a) Füger, B.; Bolm, C. *Synlett* 2009, 1601. (b) Ren, Y.; Mo, L.; Wang, Y.; Yu, L.; Yin, M.; Xiong, Z.; Teng, F.; He, Y. *J. Org. Chem.* 2024, 89, 3345.

[2] Milokhov, D. S.; Pomalin, M. S.; Lutsiuk, T. M.; Hys, V. Y.; Virych, P. A.; Poliudov, A. O.; Popova, M.; Shishkina, S.; Volovenko, Y. M.; Dobrydnev, A. V. *Synlett* 2025, 36, 2615

ДИМЕРНІ ІОННІ РІДИНИ НА ОСНОВІ ТЕТРАГІДРО-1,4-ОКСАЗИНУ ЯК ПЕРСПЕКТИВНІ ФУНКЦІОНАЛЬНІ МАТЕРІАЛИ

Потапчук М. О., Свердліковська О. С.

ННІ «Український державний хіміко-технологічний університет» Українського державного університету науки і технологій

o.sverdlikovska@gmail.com

Димерні іонні рідини на основі тетрагідро-1,4-оксазину становлять перспективний клас функціональних сполук, для яких практична придатність визначається збалансованістю полярності, органофільності, термічної стабільності, міжфазної активності та рухливості іонів. На відміну від полімерних аналогів, саме димерні системи поєднують достатньо високу концентрацію іонних центрів із відносно низькою в'язкістю, що робить їх доцільними як добавки або робочі середовища в процесах, де вирішальними є масоперенесення, адсорбція на межі поділу фаз і транспорт заряду.

Для мастильних композицій найбільший інтерес становлять димерні іонні рідини серій С-4-х та С-5-х, що містять фрагменти $-O-CH(CH_3)-CH_2-$. Їх ефективність зумовлена поєднанням морфолінієвого катіонного центра, здатного до донорно-акцепторної взаємодії з поверхневими оксидами металів, та органічних замісників, сумісних із вуглеводневим середовищем. Унаслідок цього на межі «метал – олива» формується орієнтований адсорбційний шар, який зменшує безпосередній контакт мікронерівностей і сприяє стабілізації захисного трибохімічного шару. Підвищена термічна стабільність цих систем дозволяє розглядати їх як перспективні функціональні присадки до моторних оливо.

У процесах десульфуризації палива найперспективнішими є димерні іонні рідини з бензильними, дибензильними та алкілароматичними замісниками, зокрема сполуки типу С-1-2-2, С-1-3-3, С-2-2-2, С-2-3-3, С-3-2-2, С-3-3-3. Їх дія пояснюється селективною сольватацією ароматичних сірковмісних компонентів унаслідок поєднання полярного морфолінієвого центра та π -спорідненості ароматичних замісників до тіофенових, бензотіофенових і дибензотіофенових структур. Такі сполуки концентруються на межі поділу фаз і полегшують масоперенесення сірковмісних молекул із паливної фази в іоннорідинну, що робить їх перспективними екстракційними середовищами для очищення палив від сірки.

Для електрохімічних пристроїв суттєвими є висока іонна провідність, низькі температури фазових переходів, низька леткість і термічна стабільність. Димерні іонні рідини на основі тетрагідро-1,4-оксазину відповідають цим вимогам завдяки достатній рухливості іонів та слабшій міжіонній асоціації порівняно з більш жорсткими макромолекулярними системами. Найперспективнішими є сполуки з алільними, оксиетиленовими, бензильними, дибензильними та алкілароматичними фрагментами, а також системи з меншою відстанню між іонними центрами, оскільки саме для них встановлено найкраще

поєднання високої провідності та низької температури склування. Такі димерні сполуки можуть бути використані як рідкі або низьков'язкі електроліти для сучасних електрохімічних систем.

Отже, саме димерні іонні рідини на основі тетрагідро-1,4-оксазину є найбільш універсальними серед дослідженого ряду для застосування як функціональні добавки до моторних оливо, екстракційні середовища для десульфуризації палива та компоненти електролітів. Їх перспективність визначається не окремою властивістю, а поєднанням структурних чинників: природою замісника, відстанню між іонними центрами, наявністю етерних і гідроксильних груп, а також здатністю до міжфазної взаємодії.

СИНТЕЗ ТА ЕНЗИМАТИЧНЕ РОЗДІЛЕННЯ 2-ФЛУОРАЛКІЛЗАМІЩЕНИХ ХРОМАН-4-ОЛІВ

*Рашевський А. С.¹, Чебанов В. А.², Тімохін О. С.^{3,4},
Кучер О. В.^{3,4}, Москвіна В. С.^{4,5}*

¹ Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

² ДНУ НТК «Інститут монокристалів» НАН України, Харків

³ ТОВ "НВП "УКРОРГСИНТЕЗ", Київ

⁴ Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім В.П. Кухаря НАН України, Київ

⁵ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ

rashevskyandrew@gmail.com

Гетероциклічна система хроману (бензодигідропірану) займає особливе місце в сучасній медичній хімії, оскільки вона є структурною основою широкого спектра біологічно активних сполук. У природі цей скаффолд представлений у токоферолах (вітамінна група Е), відомих своїми антиоксидантними властивостями, а також у численних флавоноїдах. Завдяки здатності хроманового ядра до різноманітної функціоналізації, його похідні демонструють протизапальну, антибактеріальну та протипухлинну активність. Одночасно з цим, у дизайні сучасних лікарських засобів критично важливу роль відіграє модифікація молекул атомами флуору. Введення флуоралкільних замісників дозволяє не лише покращити метаболічну стабільність сполук, але й модулювати їхні фізико-хімічні параметри, такі як ліпофільність та здатність до утворення водневих зв'язків.

Дана робота базується на розвитку та розширенні універсальної методології хемоензиматичного розділення, яка раніше була успішно апробована нашою науковою групою для серій 2-алкільних та спіроциклічних хроман-4-олів [1] та гетероциклічних аналогів флаван-4-олів [2]. У поточному дослідженні цей підхід було застосовано до одержання енантімерно чистих 2-флуоралкільзаміщених похідних, що відкриває шлях до створення нових флуорованих скаффолдів із заданою стереохімією. Синтетична стратегія включала декілька послідовних стадій, починаючи від конденсації 2-гідроксіацетофенону з відповідними флуорованими естерами. Отримані таким чином 2-флуоралкільхромони **1a-f** піддавали діастереоселективному відновленню натрій боргідридом, що дозволило виділити виключно *cis*-ізомери відповідних спиртів **2a-f** із високими виходами [3].

Основним етапом дослідження стало кінетичне розділення рацемічних ацетатів за допомогою естерази печінки свині (*PLE*). Вибір даного ферменту був обумовлений його високою толерантністю до об'ємних замісників та здатністю ефективно працювати у двофазних системах «органічний розчинник - буферний розчин». Було встановлено, що процес підпорядковується емпіричному правилу Казлаускаса (*Рис. 1*), забезпечуючи селективний гідроліз одного з енантімерів. Це дозволило отримати обидва антиподи - спирт та ацетат – із високою оптичною

чистотою, що досягає 99% *ee*. Такий енантіодивергентний підхід є надзвичайно вигідним з точки зору економічної ефективності та масштабованості процесу, оскільки дозволяє мінімізувати втрати цінного хірального матеріалу.

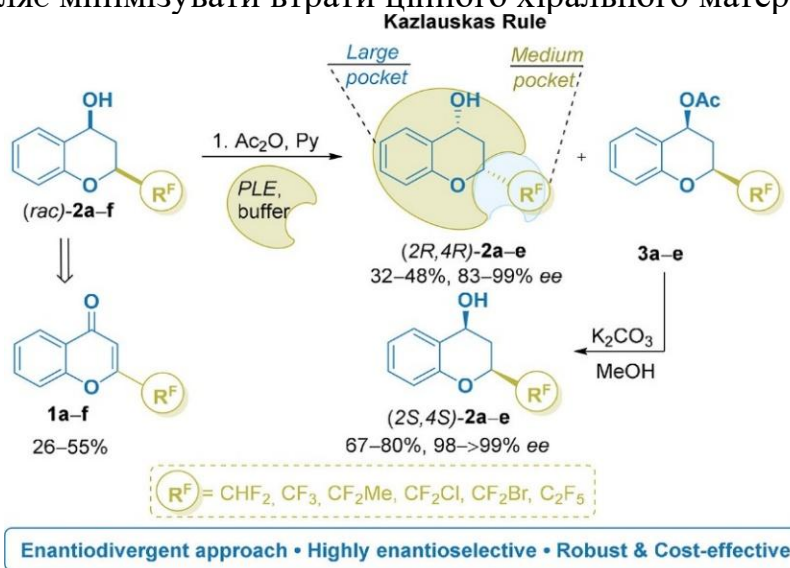


Рис.1. Загальна схема синтезу та PLE-каталізованого кінетичного розділення 2-флуоралкілхроман-4-олів.

Крім синтетичних аспектів, значну увагу було приділено аналізу фізико-хімічних властивостей отриманих сполук, зокрема їхньої ліпофільності (LogP), яка є важливим фактором ADME-профілю майбутніх лікарських засобів. Дослідження методом ВЕРХ-індексу гідрофобності виявило нетипову поведінку флуорованої серії сполук. Було помічено, що на відміну від класичних алкільних аналогів, де перетворення кето-групи в гідроксильну майже не впливає на ліпофільність, у випадку 2-флуоралкілхроманів відновлення призводить до суттєвого зниження значень LogP .

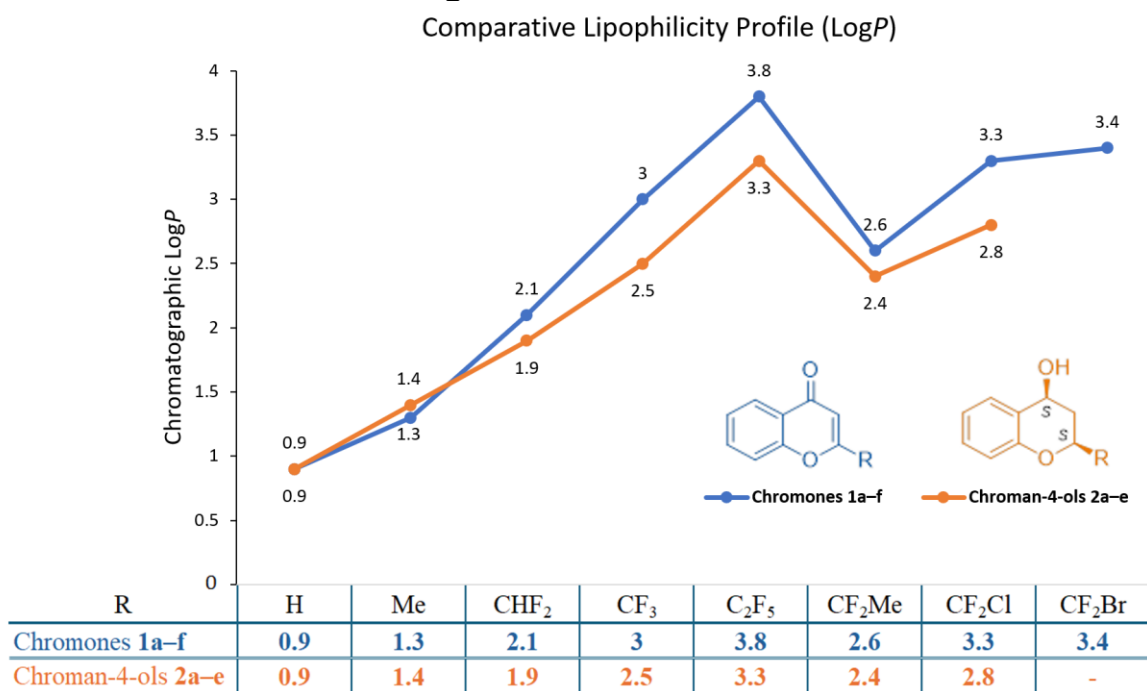


Рис.2. Залежність значень LogP від структури замісника.

- [1] Timokhin O.S., Romanova A.M., Moskvina V.S., Kucher O.V., Boiko A.I., Banasevych A.L., Durylin D., Brovarets V.S., Grygorenko O.O. (2025). Synthesis of enantioenriched 2-((hetera)cyclo)alkylchromanols and their spirocyclic analogs through enzymatic resolution. *European Journal of Organic Chemistry*, 28(8), e202401247. <https://doi.org/10.1002/ejoc.202401247>
- [2] Timokhin O.S., Hys V.V., Kucher O.V., Kozytskyi A.V., Yizhak R.V., Brovarets V.S., Grygorenko O.O., Moskvina V.S. (2026). From flavones to flavanols: an enzymatic kinetic resolution approach to enantioenriched 2-(het)arylchroman-4-ols. *Tetrahedron*, 135174. <https://doi.org/10.1016/j.tet.2026.135174>
- [3] Timokhin O.S., Rashevskyi S.A., Kucher O.V., Lesyk D., Holota Y., Borysko P., Pilyo S.G., Grygorenko O.O., Moskvina V.S. (2026). Expanding the Biocatalytic Toolbox: PLE-Catalyzed Kinetic Resolution and Lipophilicity Modulation of 2-Fluoroalkyl Chroman-4-ols. *Journal of Fluorine Chemistry*, 110566. <https://doi.org/10.1016/j.jfluchem.2026.110566>

КАТІОННИЙ КРОХМАЛЬ ДЛЯ ОСАДЖЕННЯ БИЧАЧОГО СИРОВАТКОВОГО АЛЬБУМІНУ

Романюк Ю. Р., Костик О. А., Будішевська О. Г.

Національний університет «Львівська політехніка»

yuliia.romaniuk.kht.2023@lpnu.ua

Значну екологічну небезпеку становить забруднення поверхневих вод органічними речовинами зі стоків харчових виробництв, зокрема білкового походження. Ці речовини, потрапляючи у водойми, спричиняють розвиток у них процесів гниття, зараження хвороботворними бактеріями, цвітіння води, негативно впливають на фауну та флору.

Стоки підприємств харчової та легкої промисловості є складними полідисперсними системами і містять різні за своєю природою забруднення, залежно від типу виробництва: жир, молоко, луску, кров, шматочки тканин тварин, солі, мінеральні нерозчинні домішки, мийні засоби, важкі метали тощо. Скидання стічних вод у водойми швидко виснажує запаси кисню, що спричиняє загибель гідробіонтів.

Для того щоб очистити водойми та стічні води, необхідні коагулянти та флокулянти, матеріали, які були би не токсичними, біосумісними, ефективними, забезпечували би необхідні виробничі функції, не завдавали би екологічну шкоду, а саме, були би біодеградабельними, під час розкладу не утворювали би токсичні сполуки. У цьому напрямі перспективним флокулянтами є сполуки природнього походження, зокрема, модифіковані крохмалі. Таки матеріали мають невисоку вартість, невичерпні та відтворювані джерела.

Метою роботи було дослідження флокуляції у розчинах бичачого сироваткового альбуміну (БСА) під дією катіонного крохмалю (ККР) як флокулянта.

ККР із ступенем заміщення (СЗ) атомів гідрогену у макромолекулах кукурудзяного крохмалю (КР) $СЗ=0,21$ одержували взаємодією КР з амінуючим реагентом N,N,N-триетил-N-(2-гідрокси-3-хлоропропіл)амоній хлоридом (АР) за методикою (рис. 1) [1].

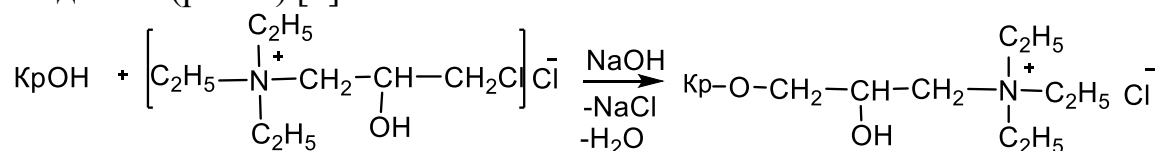


Рис. 1. Схема взаємодії крохмалю (КР) з амінуючим реагентом N,N,N-триетил-N-(2-гідрокси-3-хлоропропіл)амоній хлоридом (АР)

Процес флокуляції та осадження БСА оцінювали за залежністю зміни оптичної густини від часу водних розчинів БСА після їх змішування з флокулянтом ККР. Дослідження проводили за допомогою спектрофотометра ULAB 102UV СРЕКТРОФОТОМЕТЕР та відповідного програмного забезпечення до нього при сталій концентрації БСА та λ 560 нм

При змішуванні розчинів БСА та флокулянта ККР відбувається міжмолекулярна електростатична взаємодія макромолекул з утворенням флокул, які випадають в осад. Під час утворення флокул оптична густина суміші БСА та ККР зростає, а при осіданні флокул – зменшується.

При утворенні міжмолекулярних комплексів флокулянта і БСА порушується вторинна структура БСА у осадах, що підтверджено ІЧ спектрами.

Показано, що кінетика флокуляції і освітлення розчинів залежить від рН середовища та концентрації ККР (при сталому вмісті БСА у розчині). Дослідження проводили при значеннях рН нижче ізоелектричної точки БСА ($pI_{\text{БСА}} \approx 4,7-5,1$) та вище $pI_{\text{БСА}}$.

Встановлено, що флокуляцію у розчині БСА дією ККР проводити за рН нижчому, ніж $pI_{\text{БСА}}$ недоцільно. Очевидно, що за рН менше pI ζ -потенціал макромолекул БСА має позитивне значення, унаслідок чого електростатична взаємодія з ланцюгами макрокатионів катіонного крохмалю не відбувається, не утворюються міжмолекулярні комплекси і не відбувається флокуляція.

Показано, що при значенні рН, більшому, ніж $pI_{\text{БСА}}$ – рН 10,5 – 8,3 флокуляція, осадження осаду та освітлення суміші БСА та ККР відбувається ефективно протягом перших 10 хвилин.

Встановлено, що частка осадженого БСА дією ККР протягом 6 діб при рН 8,3 та при співвідношенні БСА:ККР = 9:1 складає 62%, при рН 10,3 – 58%, при рН 3,5 – незначна.

Таким чином зроблено висновок, що ККР, може використовуватися як флокулянт БСА за рН більшому, ніж pI білку з достатньою ефективністю довільного осадження сухих речовин

Для порівняння було проведено паралельні дослідження з використанням як флокулянтів хітозану (Хіт) та не модифікованого КР, відносно яких можна порівняти отримані дані. Оптимальна концентрація Хіт, за якої спостерігали найефективнішу флокуляцію при рН більше $pI_{\text{БСА}}$ на порядок менше, ніж концентрація ККР, що пояснено більшим вмістом амонійних груп у макрокатионі Хіт із ступенем деацетилювання 0,82. Разом з тим, використання ККР економічно доцільніше.

Ефективність не модифікованого КР як флокулянта у порівнянні ККР у рази менша при однаковій концентрації ККР і КР, що може свідчити про електростатичну природу взаємодії макромолекул БСА та ККР у процесі флокуляції.

Осади білкових сполук із стічних вод певних харчових виробництв, одержані при використанні як флокулянта ККР є нетоксичними та можуть бути використанні надалі у сільському господарстві, зокрема, у тваринництві.

[1] Cationation of starch with an aminating reagent based on triethylamine and epichlorohydrin Kostyk, O.A., Budishevskaya, O.H., Vostres, V.B., Nadashkevych, Z.Y., Voronov, S.A. *Voprosy Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii*, 2019, 2019(6), pp. 113–120. DOI: 10.32434/0321-4095-2019-127-6-113-120

СИНТЕЗ ТА МОДИФІКАЦІЯ ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНИХ 2,3-ДИГІДРОХІНОЛІН-4(1H)-ОНІВ

Семьошкіна О. Д.^{1,2}, *Якубовський В. П.*^{1,3}, *Мельников К. П.*^{1,3}, *Ляшук О. С.*^{1,2},
Григоренко О. О.^{1,2,3}

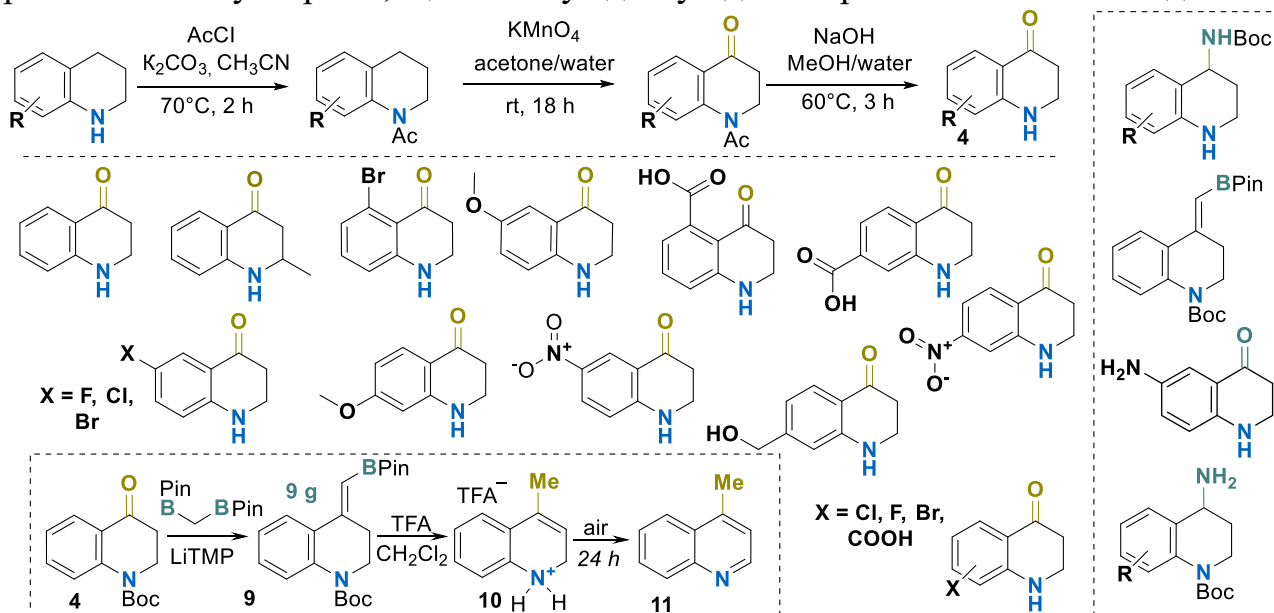
¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка

² ПУ «НДІ Єнамін», Київ

³ Enamine Ltd., Київ

semioshkinaelena@knu.ua

2,3-Дигідрохінолін-4(1H)-они та їх ненасичені аналоги є перспективними гетероциклічними скафолдами, що широко застосовуються в медичній хімії. Хінолінове ядро відіграє ключову роль у модулюванні біологічної активності, що продемонстровано для інгібіторів кіназ, протизапальних агентів, флуоресцентних зондів та численних антибіотиків хінолонового ряду. З огляду на їхню фармакологічну значущість, розробка ефективних і практичних синтетичних підходів до цих структур залишається актуальним завданням. Існуючі методи синтезу 2,3-дигідрохінолін-4(1H)-онів включають реакції ацилювання за Фріделем–Крафтсом відповідних анілінів або лактамів, часткове відновлення похідних хінолін-4-ону. Альтернативно, окиснення доступних 1,2,3,4-тетрагідрохінолінів становить препаративно зручний шлях до цільових продуктів. Відомі різноманітні каталітичні та некаталітичні системи окиснення, включаючи методи на основі перехідних металів, фотохімічні підходи та реакції з використанням органічних окисників. Проте ці методи часто не орієнтовані на різноманіття субстратів, що обмежує доступ до створення бібліотек похідних.



Нами розроблено препаративно зручний тристадійний підхід до синтезу похідних 2,3-дигідрохінолін-4(1H)-онів **4**, заснований на селективному окисненні *N*-захиснених 1,2,3,4-тетрагідрохінолінів **2** водним розчином

перманганату калію. Серед досліджених окисників (KMnO_4 , MnO_2 , CrO_3 , PCC , IBX , PIDA , DDQ) саме перманганат калію продемонстрував найкращі результати за конверсією та виходом продукту. Порівняння різних захисних груп показало, що *N*-ацетильні похідні забезпечують оптимальний баланс між стабільністю та реакційною здатністю. Подальша оптимізація показала, що збільшення кількості окисника покращує результат реакції, тоді як підвищення температури призводить переважно до розкладу субстрату.

Розроблена методика була застосована до широкого кола субстратів. Різноманітні *N*-захиснені тетрагідрохіноліни **2**, що містять замісники у різних положеннях бензольного та тетрагідропіридового фрагментів, були успішно перетворені у відповідні 2,3-дигідрохінолін-4(1*H*)-они **3**. Варіативність замісників (галогени, метоксигрупи, бензильні, естерні та нітрогрупи) свідчить про широкі межі застосування методу. Загальні виходи для тристадійної послідовності становлять 22–52%. Важливо, що процес легко масштабується, і цільові сполуки були отримані у кількості 12–20 г без суттєвої втрати ефективності.

Синтетична універсальність отриманих хінолінонів продемонстрована їх подальшим перетворенням у різноманітні біфункціональні будівельні блоки **5-8**. Один із підходів включає перетворення у оксими з подальшим каталітичним гідруванням до діамінів із високими виходами. Селективний захист отриманих діамінів дозволив одержати Вос-похідні **5**. Для субстратів, чутливих до умов гідрування, застосовано альтернативний підхід, що включає послідовне відновлення карбонільної групи до аміноспиртів, перетворення в азиди та відповідні аміни.

Доступ до похідних із ендациклічним *N*-Вос-захистом реалізовано за допомогою підходу, що включає первинний Вос-захист, відновлення, утворення азиду та реакцію Штаудінгера, що забезпечує отримання відповідних діамінів **6** із препаративними виходами. Нітрохінолінони **4** було каталітично відновлено із утворенням поліфункціонального аніліну **7**. Арилборонати **8** отримані за Сузукі-Міяурою з бромозаміщених хінолінонів **4** за стандартних умов без необхідності додаткового захисту функціональних груп, що забезпечує доступ до мультифункціональних будівельних блоків із ортогональною реакційною здатністю. Аналогічно було одержано вінілборонат **9**, що під впливом трифтороцтової кислоти зазнав кількісного протодоборилування із міграцією подвійного зв'язку в ендациклічне положення з утворенням 1,2-дигідрохіноліну **10** з високим виходом. Виявлено, що сполука **10** після виділення швидко окиснюється, кількісно утворюючи 4-метилхінолін **11**.

Таким чином, розроблено практичний та масштабований підхід до синтезу та модифікації 2,3-дигідрохінолін-4(1*H*)-онів із доступних тетрагідрохінолінів. Метод характеризується широким колом субстратів та можливістю масштабування до мультиграмових кількостей.

Роботу представлено в рамках виконання гранту Національного фонду досліджень України №2025.07/0179.

СИНТЕЗ ТА ФОТОФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НОВИХ ПОХІДНИХ 3-ГІДРОКСИФЛАВОНУ З ПОДОВЖЕНИМ ПОЛІЕНОВИМ ЛАНЦЮГОМ

Сніжко А. Д., Гладков Є. С, Чепелева Л. В., Кириченко О. В.

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

arsenii.snizhko@karazin.ua

Флуоресцентні барвники з внутрішньомолекулярним перенесенням протона у збудженому стані (ESIPT), зокрема похідні 3-гідроксифлавону (ЗНФ), характеризуються унікальною двосмуговою емісією та аномально великим Стоксовим зсувом. Завдяки здатності до внутрішнього самокалібрування через вимірювання співвідношення інтенсивностей нормальної (N) та таутомерної (T) форм, такі сполуки є ідеальними платформами для розробки високочутливих ратіометричних зондів [1]. Фотофізичний відгук цих систем критично залежить від електронної природи замісників та їхнього впливу на розподіл електронної густини у збудженому стані. У цій роботі досліджено вплив електроноакцепторної карбонільної групи та подовження π -спряженої системи (C4'-полієнового фрагмента) на спектральні параметри та ефективність ESIPT-процесу, що дозволяє раціонально керувати чутливістю зондів до властивостей мікрооточення (рис. 1a).

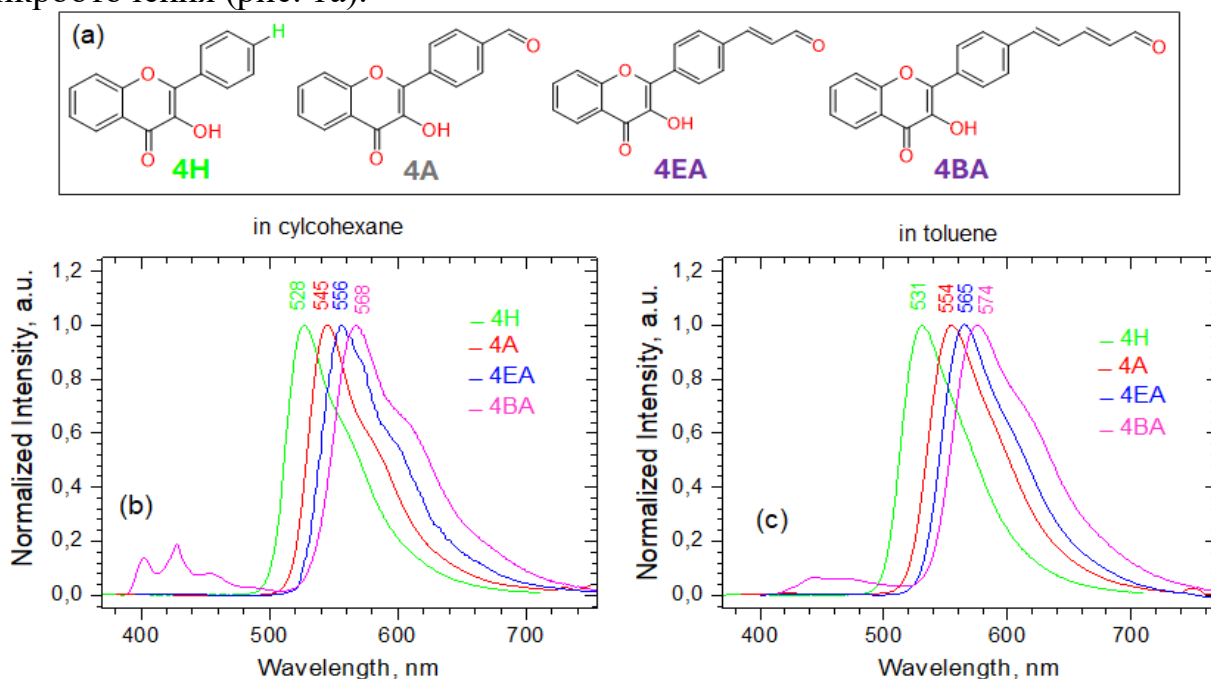


Рис. 1. Структурні формули зондів (a), нормалізовані спектри флуоресценції зондів у циклогексані (b) та толуені (c);

Синтез нових похідних 4А, 4ЕА та 4ВА (рис. 1а) здійснено шляхом ітераційного подовження π -кон'югованого полієнового ланцюга із застосуванням реакції Віттіга. Спектральні дослідження у розчинниках різної полярності (від циклогексану до ацетонітрилу) виявили суттєву модуляцію

фотофізичних властивостей. Для модифікованих 3-гідроксифлавонів спостерігається виразний батохромний зсув: зі збільшенням довжини спряження максимуми емісії таутомерної форми (Т) послідовно зміщуються у довгохвильову область, досягаючи 568–574 нм для сполуки 4ВА (рис. 1b, c). У полярних апротонних середовищах, окрім загального зсуву, зафіксовано перерозподіл інтенсивностей на користь нормальної форми (N), що проявляється у зростанні короткохвильової смуги випромінювання. Це вказує на те, що у випадку зонда 4ВА подовження ланцюга дещо дестабілізує ESIPT та підсилює внесок нормальної форми. Згідно з розрахунками TD-DFT, спостережуваний батохромний ефект зумовлений ефективною стабілізацією рівня LUMO та посиленням внутрішньомолекулярного перенесення заряду (ICT) під впливом C4'-акцепторних груп, що суттєво змінює дипольний момент збудженого стану.

Розроблені зонди на основі 3НФ серії 4А–4ВА є перспективними для біофізичних досліджень, зокрема для зондування гідратних оболонок макромолекул та архітектури поверхні функціоналізованих наночастинок. Завдяки інтенсивному ратіометричному сигналу та значному батохромному зсуву, ці флуорофори забезпечують високу контрастність сигналу на фоні біологічної автофлуоресценції. Здатність зондів модулювати співвідношення інтенсивностей нормальної та таутомерної форм (I_N/I_T) дозволяє з прецизійною точністю картувати градієнти локальної полярності, електростатичні варіації та доступність розчинника у сольватних шарах білків. Окрім того, чутливість емісії таутомерної форми до молекулярної упаковки відкриває нові можливості для моніторингу міжфазних взаємодій у гібридних наносистемах та детектування тонких конформаційних переходів у складних біологічних середовищах [2]. Таким чином, ці зонди є потужним аналітичним інструментом для визначення локальних діелектричних констант і динаміки мікрооточення на субнанометровому рівні.

Автори висловлюють подяку Міністерству освіти і науки України (грант «Новий клас флуоресцентних сенсорів для біомедичних досліджень»).

[1] Snizhko A. D., Chepeleva L. V., Gladkov E. S., Kyrychenko A. Tuning ESIPT in 3-hydroxyflavone by introducing electron-withdrawing dicyano group and extending its π -conjugation. *J. Photochem. Photobiol. A: Chemistry*, 2025. Art. num. 116524.

[2] Kyrychenko A., Ladokhin A. S. Fluorescent probes and quenchers in studies of protein folding and protein-lipid interactions. *Chemical Record*, 2024, 24 (2), Art. num. e202300232.

СИНТЕЗ 5,10,15,20-ТЕТРА(ПІРИДИН-3-ІЛ)-ХЛОРИНУ, ВИХОДЯЧИ З 5,10,15,20-ТЕТРА(ПІРИДИН-3-ІЛ)-ПОРФІРИНУ

Горобець М. Ю.¹, Терещенко А. Ю.²

¹ Інститут хімії функціональних матеріалів,
ДНУ «НТК «Інститут монокристалів» НАН України

² Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

arsen.tereshchenko@student.karazin.ua

Порфірини та порфіриноїди – це органічні гетеромакроцикли. Деякі з них, через свої унікальні фотофізичні властивості, використовуються у клінічній фототерапії та для візуалізації раку. Однак їхньому ширшому застосуванню в клінічному лікуванні захворювань перешкоджає погана розчинність у воді та недостатні біодоступність та накопичення в пухлинах, що спричиняє фототоксичну дію на клітини-хазяї, зокрема шкіри. Ці обмеження вимагають пошуку нових фотоактивних систем, позбавлених цих недоліків. В ряду порфіриноїдів хлорини мають хімічно-активний подвійний зв'язок, який можна використовувати для синтезу різноманітних похідних бактеріохлоринів.

Основний підхід до синтезу хлоринів – відновлення діїмідом відповідних порфіринів. Однак цей процес проходить не селективно, і окрім бажаного похідного хлорину неодмінно утворюється відповідний бактеріохлорин. Розділення порфіриноїдів – складна задача.

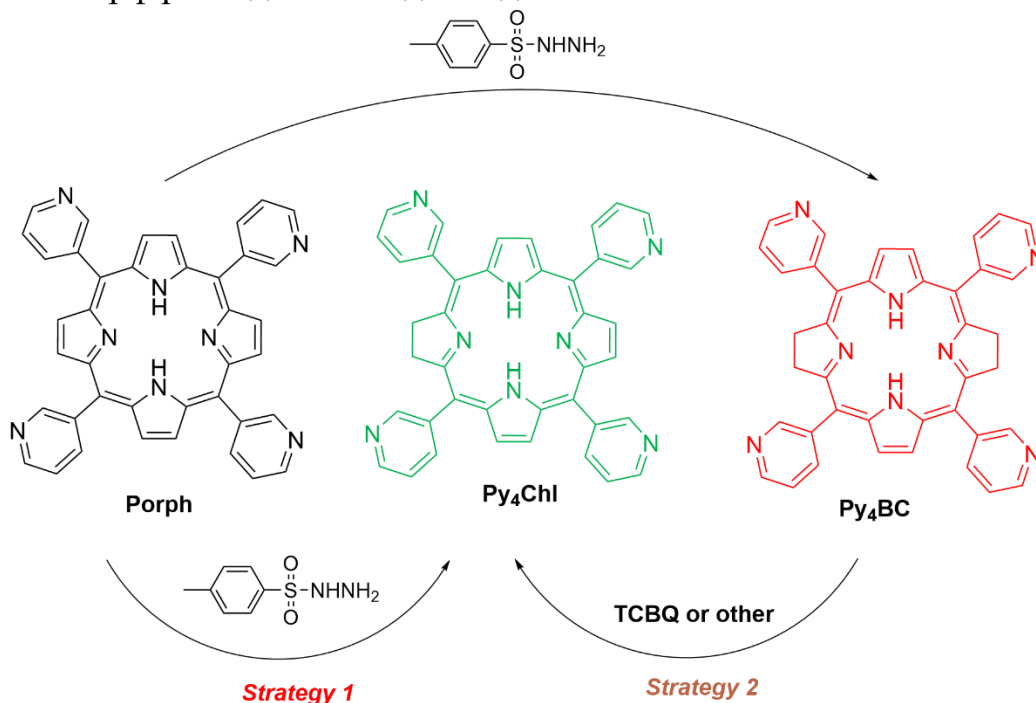


Рис. 1 Стратегії синтезу

Тому в цій роботі ми досліджуємо можливість одержати 3-піридинове похідне хлорину через альтернативну схему – відновлення порфірину до суміші хлорин/бактеріохлорин з подальшим окисленням бактеріохлорину до хлорину, додаванням о-хлоранілу для дегідрування бактеріохлорину.

РОЗРОБКА ФЕРМЕНТАТИВНОГО БІОСЕНСОРА НА ОСНОВІ ДІОКСИДУ МАНГАНУ ДЛЯ КІЛЬКІСНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ГЛЮКОЗИ В МІКРОФЛЮЇДНОМУ ЧИПІ

Федякіна Н. А., Полтавець В. В.

Дніпровський державний медичний університет, м. Дніпро

nataliafedyakina13@gmail.com

Згідно з прогнозами IDF (International Diabetes Federation), до 2045 року кількість пацієнтів із цукровим діабетом зросте до 783 мільйонів. Цей глобальний виклик зумовлює необхідність переходу від епізодичного контролю до безперервного моніторингу рівня глюкози за допомогою недорогих і доступних платформ «Лабораторія-на-чипі» (Lab-on-a-Chip, LoC) діагностики [1]. Мікрофлюїдні технології у поєднанні з новими наноструктурованими матеріалами є перспективним рішенням для мініатюризації аналітичних систем та зниження витрат реагентів.

Мікрофлюїдний чіп являє собою планарну структуру з інтегрованою системою мікроканалів Т-подібної геометрії, сформовану в шарі полідиметилсилоксану (ПДМС), що забезпечує ламінарний транспорт аналіту до поверхні сенсора при мінімальній витраті проби. Чутливий елемент реалізовано на основі скла з покриттям з оксиду індію-олова (ІТО, опір 6–8 Ом/кв, товщина ~185 нм, *Biotain Crystal Co.*). Робочий електрод було модифіковано наноструктурованим діоксидом мангану шляхом безпосереднього електрохімічного осадження.

Для забезпечення селективності на поверхню MnO_2 наносили 2 μ л розчину ферменту глюкозооксидази (GOx, *Aspergillus niger*, 100–250 од/мг) в оптимізованій концентрації 2 мг/мл. Стабільність біоселективного шару в умовах мікропотуку забезпечувалася висушуванням ферменту з наступною хімічною фіксацією (ковалентною зшивкою) у парах глутарового альдегіду.

Принцип дії біосенсора базується на ферментативному окисненні глюкози, що супроводжується генерацією перекису водню. Утворений H_2O_2 вступає в реакцію з MnO_2 , який виконує роль неорганічного медіатора. Механізм формування сигналу полягає у циклічному відновленні Mn^{4+} до Mn^{3+} при взаємодії H_2O_2 з подальшим електрохімічним окисненням мангану до вихідного стану. Оптимальний робочий потенціал системи склав +0,45 В (відн. Ag/AgCl) [2].

У ході експериментів було виявлено деградацію активного шару через утворення розчинних сполук тривалентного мангану. Для подолання цієї проблеми було впроваджено протокол stop-flow: при швидкості потоку 20 мкл/хв 90 с - пропускання розчину аналіту, 260 с - інкубація для накопичення продукту реакції, 250 с - промивання каналу фосфатним буфером.

Аналітичним сигналом обрано величину електрохімічного заряду (Q), отриману шляхом інтегрування хроноамперометричних кривих. Калібрувальна

залежність Q від концентрації глюкози є лінійною в діапазоні 0,1–3 мМ розчину глюкози, що дозволяє проводити кількісні вимірювання в малих концентраціях.

Розроблена мікрофлюїдна система на основі MnO_2 демонструє високу чутливість та стабільність завдяки ефективній фіксації ферменту та використанню режиму «зупиненого потоку». Система є перспективною основою для створення портативних пристроїв моніторингу глюкози.

[1] M. Bäcker, D. Rakowski, A. Poghossian, M. Biselli, P. Wagner, M. J. Schöning, Chip-Based Amperometric Enzyme Sensor System for Monitoring of Bioprocesses by Flow-Injection, *Analysis. J. Biotechnol.*, 2013, 163 (4), 371–376. <https://doi.org/10.1016/j.jbiotec.2012.03.014>.

[2] N. W. Beyene, P. Kotzian, K. Schachl, H. Alemu, E. Turkušić, A. Copra, H. Moderegger, I. Švancara, K. Vytřas, K. Kalcher, (Bio)sensors based on manganese dioxide-modified carbon substrates: retrospections, further improvements and applications, *Talanta*, 2004, 64, 1151-1159. doi:10.1016/j.talanta.2004.03.068.

ФІЗИЧНА ХІМІЯ

USE OF FUZZY LINEAR REGRESSION IN QSAR-PROBLEMS

Anokhin D. O., Panteleimonov A. V., Ivanov V. V.

V. N. Karazin Kharkiv National University

xa13121172@student.karazin.ua

Quantitative structure-property relationship (QSAR) is a powerful method for predicting various physico-chemical and biological properties of chemical compounds. However, not all properties have a high correlation with structural descriptors or can be accurately measured. As a result, common regression methods (such as Ordinary Least Squares, OLS) do not produce models with satisfactory accuracy. In this case, dependent variable (i. e. property) can be treated as triangular fuzzy number while independent variables (i. e. descriptors) are considered as exact values. Output regression coefficients are also fuzzy numbers.

Linear regression methods for fuzzy numbers are known. For the simplest case, namely the case of symmetric fuzzy numbers $\{Y, Y - \lambda, Y + \lambda\}$, the Fuzzy Least Squares (FLS) solution exists in the form of symmetric fuzzy coefficients $\{\beta, \beta - b, \beta + b\}$. Following the same logic, the weighted FLS method can be derived.

The criterion of fuzziness λ can be chosen arbitrary. In this work, a magnitude of fuzziness is considered as a linear reciprocal function of weights. The weights W_i were obtained according to [1] with a certain modification for a multi-variable case.

We calculated regression models for the datasets containing lipophilicity of organic compounds ($\log P$, $N = 328$) and solubility data ($\log S$, $N = 105$). The samples were preliminary split onto training sets and test sets in ratio of 70/30. For the molecules in the samples 1543 2D-descriptors were calculated with the PaDEL-descriptor software [2]. Then a few most important descriptors were selected by using the LARS-LASSO algorithm and finally the ordinary FLS and WFLS regressions were calculated for the shrunk data. For comparison, Least Absolute Deviation regression models (LAD) in non-fuzzy version were also calculated.

$\log P$ data is fitted considerably better than $\log S$ data. Therefore, the former sample has lower fuzziness magnitude compared to the latter one. In both FLS models more than 95% of the fuzzy points in the train and test sets fit to the experimental data. For WFLS this quantity is somewhat lower due to the less σ_w and fuzziness degree. For evaluating adequacy of fuzzy models we introduce the number of relative deviation

$\delta_i = (Y_i^{\text{calc}} - Y_i^{\text{exp}}) / \lambda_i$ and $\text{RMS}(\delta) = \sqrt{\sum_i \delta_i^2 / df}$, where df stands for degrees of

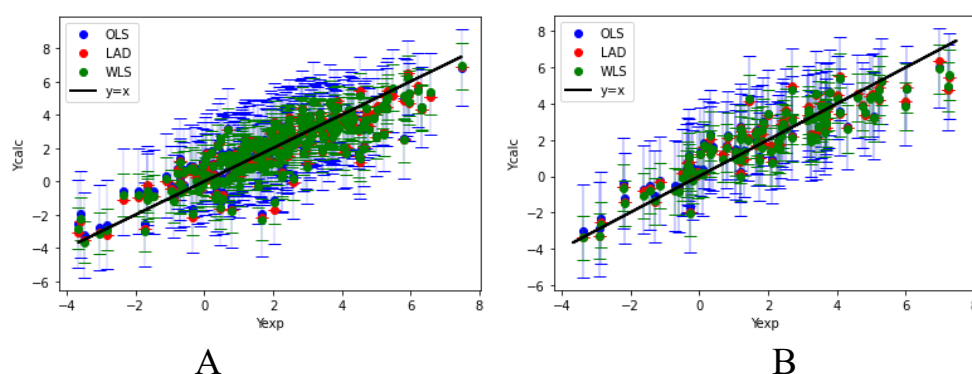
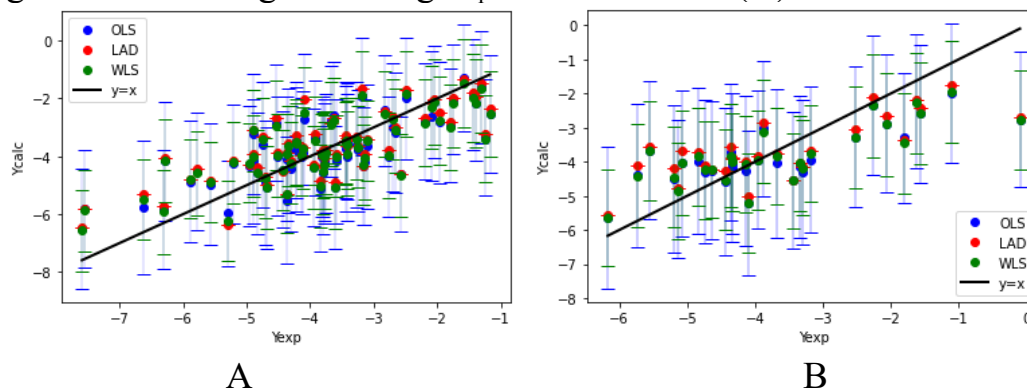
freedom, η is a proportion of points fitted to the fuzzy interval, i. e. having $|\delta_i| < 1$. Numerical data are presented in Tables 1 and 2 and the plots of dependence between Y_{calc} and Y_{exp} are given in Figures 1 and 2.

Table 1. Adequacy parameters of the regression models for the logP sample (2 descriptors: CrippenLogP and ALogP)

Method	R^2 , train/test	σ_w , train/test	RMS(δ) train/test	η , % train/test
FLS	0.743/0.808	1.055/1.016	0.433/0.424	96.9/99.0
LAD	0.735/0.817	0.438/0.983	-	-
WFLS	0.735/0.819	0.707/0.727	0.819/0.745	83.0/83.7

Table 2. Adequacy parameters of the regression models for the logS sample. (3 descriptors: XlogP, BCUTp-1h and piPC3)

Method	R^2 , train/test	σ_w , train/test	RMS(δ) train/test	η , % train/test
FLS	0.606/0.575	0.921/1.024	0.448/0.505	95.7/96.7
LAD	0.582/0.551	0.448/0.591	-	-
WFLS	0.597/0.578	0.770/0.734	0.644/0.699	88.6/90.0

Figure 1. Plot of $\log P_{\text{calc}}$ vs $\log P_{\text{exp}}$ for the train set (A) and the test set (B)Figure 2. Plot of $\log S_{\text{calc}}$ vs $\log S_{\text{exp}}$ for the train set (A) and the test set (B)

[1] Panteleimonov, A., Anokhin, D., Ivanov, V.. Robust evaluation of regression parameters. The fuzzy theory and other models. *Kharkiv University Bulletin. Chemical Series*. **2022**, 38, 6–15.

[2] Yap, C. W. PaDEL-descriptor: an Open Source Software to Calculate Molecular Descriptors and Fingerprints. *J. Comput. Chem.* **2011**, 32 (7), 1466–1474.

POLARIZABILITY EFFECTS ON MICROSTRUCTURE AND DYNAMICS OF LiFSI/DME ELECTROLYTE

Dikarieva K. S.¹, Koverga V.^{1,2,3}, Kalugin O. N.¹

¹ V.N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine

² University of Illinois Chicago, Chicago, USA

³ Argonne National Laboratory, Lemont, USA

katerynadikarieva@gmail.com

Advancing lithium-metal battery (LMB) technology hinges on the development of electrolytes capable of sustaining stable lithium deposition while enabling efficient ionic transport across a wide range of operating conditions. Ether-based solvents, particularly 1,2-dimethoxyethane (DME), have emerged as promising electrolyte components due to their compatibility with lithium metal anodes and their ability to support stable cycling. Despite growing experimental insight into the solvation and transport behavior of such systems, their accurate computational description remains an open challenge.

Molecular dynamics (MD) simulation is a powerful tool for studying electrolytes at the atomic level, however, the reliability of simulation results depends critically on the choice of force field. Non-polarizable models, such as OPLS-AA [1], treat atomic charges as fixed, neglecting the many-body electronic polarization that governs ion–solvent interactions in concentrated electrolytes. Polarizable force fields, such as CL&Pol [2], address this limitation through explicit induction effects via Drude oscillators, providing a more physically rigorous description of the local electronic environment.

In this work, molecular dynamics modeling of a 1 M lithium bis(fluorosulfonyl)imide (LiFSI) in 1,2-dimethoxyethane (DME) (Fig. 1) was carried out using both OPLS-AA and CL&Pol force fields. To isolate the contribution of polarizability at the molecular level, pure DME was additionally simulated with each model.

The calculations were performed using the LAMMPS package (version 08Feb2023). The LiFSI/DME system consisted of 82 ion pairs and 782 DME molecules, for the neat solvent simulation, a system of 864 DME molecules was used. Initial configurations were generated using Packmol. For the non-polarizable model, interactions were described using the OPLS-AA force field with parameters obtained from LigParGen. Quantum chemical calculations were also carried out for the FSI⁻ anion and its partial atomic charges were refined using the CHELPG scheme at the MP2/cc-pVTZ level of theory. For the polarizable model, the CL&Pol force field with Drude oscillators was employed. Polarization effects were introduced via Drude particles, and short-range dipole-dipole interactions were damped using the Thole screening function. The equations of motion were integrated using the velocity-Verlet algorithm with a timestep of 0.5 fs (1 fs for the polarizable model). After energy minimization, the system was equilibrated in the NPT ensemble at 298 K and 1 atm,

followed by production runs in the NVT ensemble at 298 K. After equilibration and production runs, the structural properties of the system were analyzed. In particular, the solvation structure of Li^+ was characterized using radial distribution functions.

The two force fields yield fundamentally different pictures of the Li^+ first coordination sphere: CL&Pol produces a sharper and more localized solvation shell with well-defined radial distribution function peaks for $\text{Li}^+\cdots\text{O}^{\text{DME}}$ and $\text{Li}^+\cdots\text{O}^{\text{FSI}}$ at a lower coordination number, whereas OPLS-AA gives a more diffuse and highly coordinated ion environment, reflecting distinct solvation mechanisms in the polarizable and non-polarizable models. These structural differences propagate directly into transport behavior, with the polarizable model predicting enhanced ion mobility consistent with the more dynamic solvation environment. For pure solvents, both models show notable deviations in reproducing thermodynamic and dynamic properties, demonstrating that polarizable force fields do not provide a universal advantage and require component-specific validation.

The findings highlight that the choice of force field is a physically consequential decision that shapes the interpretation of both solvation structure and ion transport in lithium ether electrolytes, with direct implications for the computational design of next-generation LMB systems.

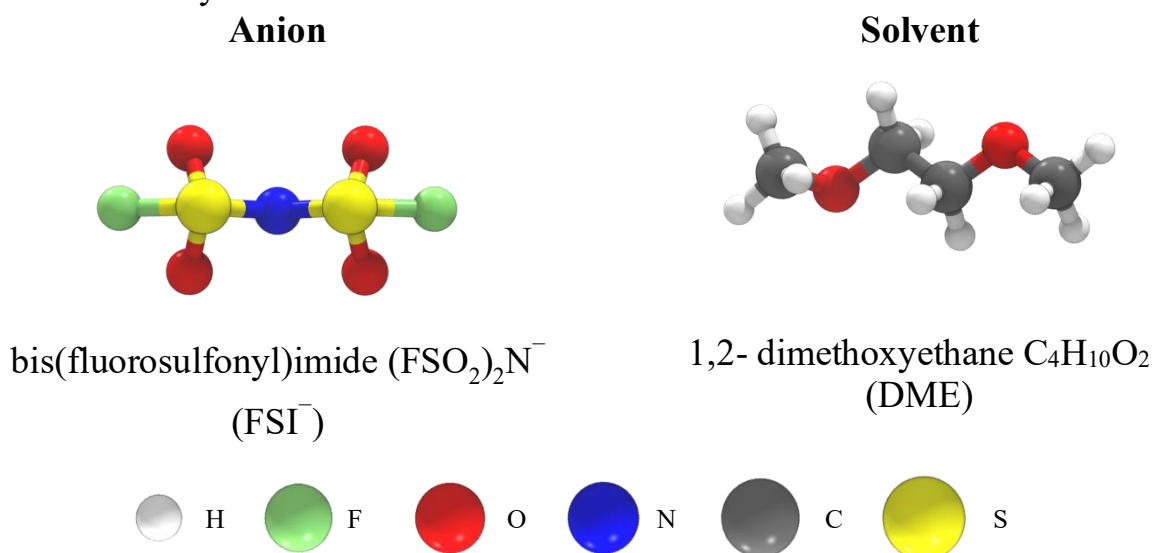


Fig. 1. Illustration of the molecular configurations of anion and solvent molecule used in MD simulation

The authors acknowledge the Ministry of Education and Science of Ukraine for the financial support provided by grant No. 0126U001145.

[1] Jorgensen, W.L., D.S. Maxwell, and J. Tirado-Rives, Development and Testing of the OPLS All-Atom Force Field on Conformational Energetics and Properties of Organic Liquids. *Journal of the American Chemical Society*, 1996. 118(45): p. 11225-11236.

[2] Goloviznina, K., et al., Extension of the CL&Pol Polarizable Force Field to Electrolytes, Protic Ionic Liquids, and Deep Eutectic Solvents. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2021. 17(3): p. 1606-1617.

NOVEL SHAPE AND DIMENSIONALITY DESCRIPTORS OF MOLECULAR ORBITALS

Курпа М. О., Іванов В. В.

V.N. Karazin Kharkiv National University

kyrpa@karazin.ua

The development of predictive models describing structure-property relationships is currently a central task in materials science. A wide range of approaches has been employed to address this challenge, including both quantum chemical methods and statistical (chemoinformatics) techniques. Such approaches are widely used in the design of molecules with specific biological activities, as well as in the development of models describing toxicity and carcinogenicity.

The design of systems with predefined physicochemical (e.g., optical or nonlinear optical) properties represents a particularly challenging problem. This complexity arises from the fact that spectral transitions involve multiple electronic states participating in the interaction with an external electromagnetic field. In this context, the standard set of molecular descriptors—including geometric, graph-based, and informational parameters—may be insufficient, since typical dyes are based on π -conjugated chromophores.

This limitation motivates the development of descriptors that reflect the underlying electronic structure more directly, in particular the spatial characteristics of molecular orbitals (MO). In this work, we consider a set of descriptors derived from the orbital shape tensor and its eigenvalues, which provide a compact representation of the spatial distribution of electronic density.

Our approach to distribution indices of MO is based on the second-moment tensor (M_φ) of the spatial distribution of the MO electron density. This tensor corresponds to a weighted covariance matrix for MO φ , defined as follows:

$$M_\varphi = \frac{1}{N_\varphi} \int |\varphi(\mathbf{r})|^2 (\mathbf{r} - \mathbf{r}_c)(\mathbf{r} - \mathbf{r}_c)^+ d\mathbf{r}, \quad (1)$$

where the normalization factor and center of orbital electron cloud (\mathbf{r}_c) are defined as follows:

$$N_\varphi = \int |\varphi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}, \quad \mathbf{r}_c = \frac{1}{N_\varphi} \int |\varphi(\mathbf{r})|^2 \mathbf{r} d\mathbf{r}. \quad (2)$$

The eigenvalues of M_φ , $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3$ characterize the extent of the MO distribution along the principal axes. Based on the eigenvalues λ_1 , λ_2 , λ_3 , we introduce a set of indices describing the spatial characteristics of the molecular orbital. Among them, the effective orbital size along the principal axis of ellipsoid is defined as:

$$L_\ell = \lambda_1 / (\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3); \quad (3)$$

effective size of orbital out of plain (OOP):

$$L_{\text{OOP}} = \lambda_3 / (\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3); \quad (4)$$

the dimensionality index DI:

$$DI = \frac{\lambda_1 - (\lambda_2 + \lambda_3)}{\lambda_1}, \quad DI \in [-1, 0, 1], \quad (5)$$

where $DI \approx -1$ corresponds to 3D spherical orbital, $DI \approx 0$ to dominantly planar orbital and $DI \approx 1$ to dominantly one dimensional orbital;

anisotropy of molecular orbital:

$$A = \frac{(\lambda_1 - \lambda_2)^2 + (\lambda_2 - \lambda_3)^2 + (\lambda_3 - \lambda_1)^2}{(\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3)^2}; \quad (6)$$







and effective volume of MO:

$$V^* \propto \sqrt{\lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdot \lambda_3}. \quad (7)$$

The corresponding program code was developed and implemented through interfaces with the Gaussian software packages.

Here, as an example, we reproduce the molecular orbital parameters for the water molecule, B3LYP/6-31G(d,p), (Table 1).

Table 1. Shape and dimensionality descriptors for MO of water molecule

№	MO Picture	L_ℓ	L_{OOP}	DI	A	V^*
1		0.33	0.33	-1.0	10^{-9}	0.004
2		0.42	0.27	-0.38	0.035	0.45
3		0.63	0.15	0.42	0.40	0.67
4		0.55	0.19	0.17	0.21	0.64
HOMO		0.59	0.20	0.31	0.29	0.48
LUMO		0.56	0.19	0.22	0.23	4.10

The presented indices characterize orbital 3 as the most extended along one dimension ($L_\ell = 0.63$), while the LUMO differs significantly from the other orbitals in terms of volume ($V^* = 4.10$). Orbital 1 exhibits a distinctly three-dimensional character, orbital 2 is close to three-dimensional, whereas orbital 4 is nearly planar, as reflected by the L_{OOP} and DI indices

Thus, the proposed indices enable the characterization of molecular orbitals from multiple perspectives, providing a comprehensive description of their spatial features.

The authors acknowledge the Ministry of Education and Science of Ukraine for the financial support provided by grant No. 0126U001145.

BENCHMARKING OPENFE FOR RELATIVE BINDING FREE ENERGY PREDICTIONS: A CASE STUDY ON JAK1 INHIBITORS

Morozova V. O.^{1,2}, Kyrychenko A. V.¹

¹ V.N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine

² Enamine Ltd, Kyiv, Ukraine

v.moroz.ukraine@gmail.com

The Janus kinases (JAKs) are key signaling proteins involved in the JAK/STAT pathway, which mediates intracellular signal transduction in response to extracellular cytokines. This pathway plays a crucial role in regulating immune responses and cellular communication. The JAK family includes four isoforms: JAK1, JAK2, JAK3, and TYK2 - whose inhibition has attracted significant interest as a therapeutic strategy for autoimmune diseases [1].

Compounds 10-12 (Fig 1A), which have been evaluated for inhibitory activity against JAK1, were used in this study to benchmark the performance of new computational tool OpenFE for relative binding free energy (RBEF) calculations. Compound 12 demonstrated the highest activity toward JAK1 ($IC_{50} = 157$ nM), whereas compound 10 showed moderate inhibition ($IC_{50} = 774$ nM). In contrast, despite a small structural alteration, compound 11 became significantly less active with an IC_{50} value > 7359 nM. Notably, compound 10 is supported by a reported co-crystal structure with JAK1 (PDB ID: 6W8L), providing structural insight into its binding mode within the Janus kinase 1 active site [1]. Therefore, this series of experimentally characterized and structurally resolved JAK1 inhibitors provides a representative basis for OpenFE benchmarking.

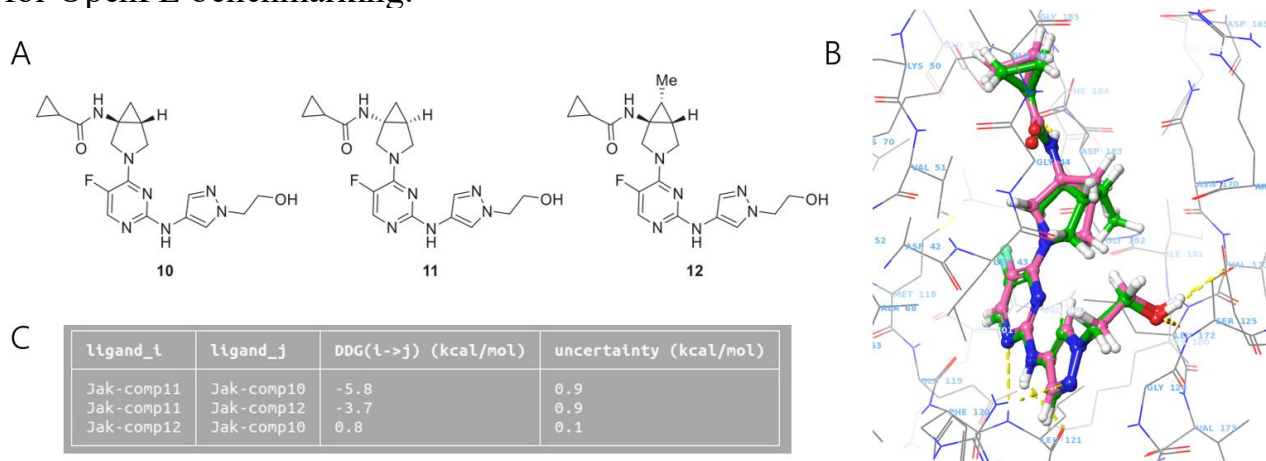


Fig. 1. (A) Chemical structures of three studied JAK1 inhibitors (compounds 10-12). (B) Binding modes of the ligands within the JAK1 (PDB ID: 6W8L) active site, shown as an overlay of representative poses. (C) RBEF ($\Delta\Delta G$) values calculated using OpenFE for alchemical ligand transformations along with associated uncertainties.

In brief, the OpenFE is a new toolkit based on an open-source framework for setting up, running, and analyzing alchemical free energy calculations [2]. In particular,

it supports relative binding free energy (RBFE) calculations, which are further used to estimate differences in binding affinity between structurally related ligands. RBFE is well suited for structure-activity relationship (SAR) studies involving congeneric ligand series.

Our RBFE results show excellent correlation with the experimental JAK1 inhibitory data (Fig. 1B-C). The predicted binding affinity ranking (Compound 12 > Compound 10 >> Compound 11) fully reproduces the experimental trend [1]. In particular, the significantly reduced activity of Compound 11 is correctly captured, and the relative ordering between compounds 12 and 10 is also consistent with experiment. Overall, the RBFE calculations reliably describe the observed SAR within this ligand series, making it a promising tool for hit-to-lead optimization.

[1] Fensome, A.; Ambler, C. M.; Arnold, E.; Banker, M. E.; Clark, J. D.; et al. Design and Optimization of a Series of 4-(3-Azabicyclo[3.1.0]hexan-3-yl)pyrimidin-2-amines: Dual Inhibitors of TYK2 and JAK1. *Bioorg. Med. Chem.* 2020, 28, 115481

[2] Open Free Energy Consortium. Large-Scale Collaborative Assessment of Binding Free Energy Calculations for Drug Discovery Using OpenFE. *ChemRxiv*. 17 March 2026. <https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2025-7sthd/v2>

FROM DOCKING SCORES TO FREE ENERGIES: RELATIVE BINDING FREE ENERGY IN OPENFE

Prud M. V.^{1,2}, Kyrychenko A. V.¹

¹ V.N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine

² Enamine Ltd, Kyiv, Ukraine

mykyta.prud@gmail.com

Free energy calculation methods are among the most accurate approaches for quantitatively predicting ligand–protein affinity in structure-based drug design. Unlike docking, which is based on simplified scoring functions and often has limited accuracy when ranking similar compounds, relative binding free energy (RBFЕ) methods are based on statistical thermodynamics and explicitly account for intermolecular interactions, solvation and conformational flexibility. One of the most common approaches is Free Energy Perturbation (FEP), which allows the evaluation of relative affinities by modelling alchemical transformations between related ligands in the complex and in solution. Thanks to advances in force fields, sampling algorithms and computational resources, RBFЕ has become an effective tool for hit-to-lead optimisation and refining the results of virtual screening, particularly for the analysis of minor chemical modifications.

The OpenFE (Open Free Energy) package [1] is a modern open-source framework for performing free energy calculations in structure-based drug design, specifically based on the FEP principle. It provides an automated and reproducible workflow covering system preparation, the construction of chemical transformations between ligands, the formation of ligand networks, and the execution of molecular dynamics simulations using the OpenMM engine. In the original study, a consortium of 15 leading global pharmaceutical companies conducted a systematic evaluation of the open-access RBFЕ protocol using both public and confidential private datasets, covering a total of over 1 700 ligands. For the public dataset comprising 58 systems, the weighted RMSE was 1.73 kcal/mol, with sub-kcal/mol accuracy achieved for 10 systems. In the case of the private dataset (37 systems), the weighted RMSE was higher - 2.44 kcal/mol - and sub-kcal/mol accuracy was observed for only 2 systems, reflecting the greater complexity of real-world drug discovery tasks. It has been shown that the accuracy of the protocol depends significantly on the specific system, with no single source of error dominating, indicating the decisive influence of input data quality and the type of transformations on the calculation results.

To illustrate the applicability of this methodology, ligands previously reported for Mpro SARS-CoV-2 [2] and identified via docking-based screening were re-evaluated using RBFЕ calculations. Here, we applied an improved protocol developed by us, utilising the OpenMM force field. The partial charges of the ligands were generated using the AM1-BCC method with AmberTools. To construct the alchemical transformation, a gapsys-type softcore potential with a parameter of $\alpha = 0.85$ was used, without accounting for dispersion and explicit charge corrections.

The system was simulated at 300 K with five independent repeats of the protocol. The alchemical path was divided into 16 λ -windows using standard interpolation functions. For each window, a 1 ns equilibration stage and 5 ns of productive simulation were performed. Solvation was carried out in the explicit solvent using the TIP3P model and 0.15 M NaCl buffer.

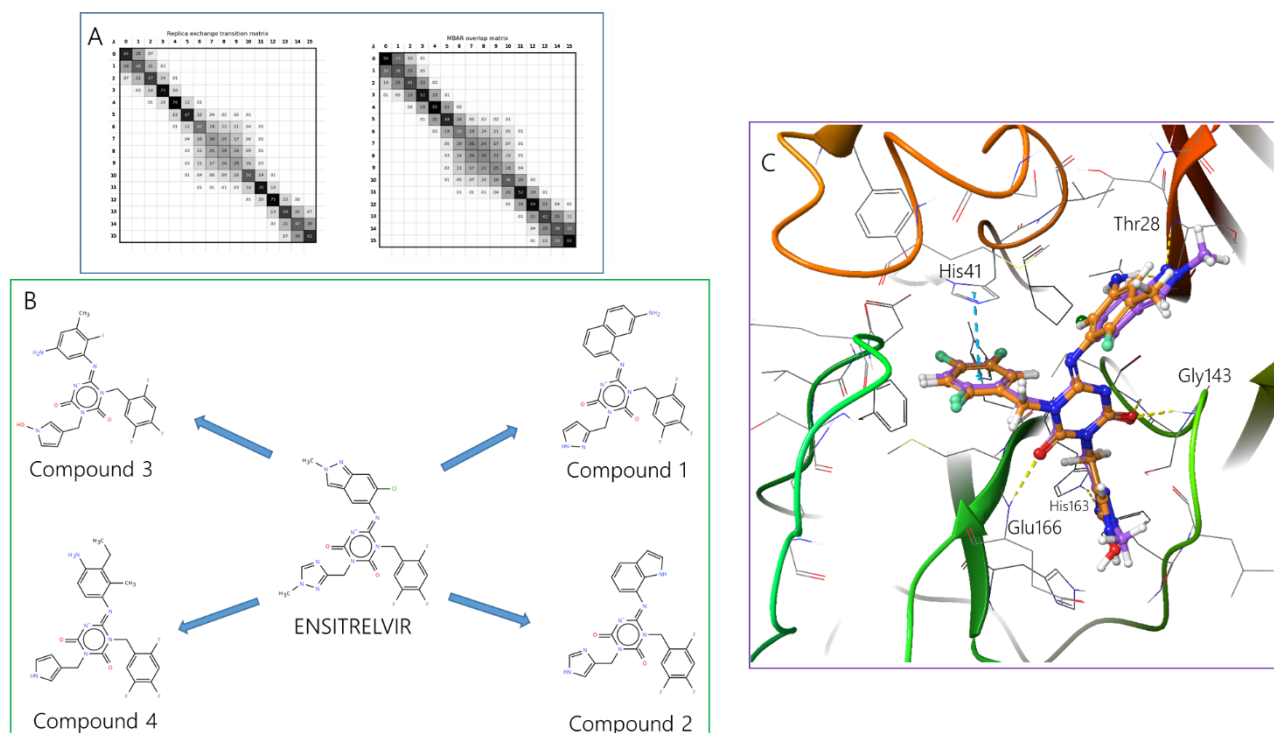


Figure 1. (A) Matrixes of alchemical transformation of Ensitrelvir to Compound 1. (B) Four transformations considered in the work. (C) Pose alignment of Ensitrelvir (purple) and Compound 3 (orange) in the active site of Mpro of SARS-CoV-2 (PDB ID: 8HEF)

In summary, we have demonstrated that the protocol we proposed for this system exhibits good internal statistical metrics, including MBAR and the degrees of freedom of the system's neighbouring replicas. We therefore propose the use of our protocol specifically for the study of systems containing Ensitrelvir-like inhibitors targeting the Mpro of SARS-CoV-2.

[1] Large-scale collaborative assessment of binding free energy calculations for drug discovery using OpenFE. ChemRxiv. 17 March 2026. <https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2025-7sthd/v2>

[2] Lohachova, K., Sviatenko, A., Kyrychenko, A., & Kalugin, O. (2024). Evolutionary Structure Optimization of Ensitrelvir as Non-Covalent Inhibitor of SARS-CoV-2 Main Protease Mpro. *Kharkiv University Bulletin. Chemical Series*, (43), 26-37.

COLLOIDAL STABILITY AND COAGULATION OF GRAPHENE DISPERSIONS IN WATER AND ORGANIC SOLVENTS

*Skliarova K. D.*¹, *Haidar V. I.*¹, *Zinin V. V.*^{2,3}, *Polishchuk Yu. V.*², *Mchedlov-Petrosyan N. O.*¹

¹ V. N. Karazin Kharkiv National University

² Ukrainian State University of Science and Technologies, Dnipro, Ukraine

³ LLC “Liquid Carbo”, Kyiv, Ukraine

Currently, graphene-based systems have become the most studied carbon nanomaterials. Many research articles devoted to the graphene dispersions in water, as well as in some organic solvents, have been published. However, the investigation of the colloidal stability was conducted almost exclusively for aqueous systems. Here we present some preliminary results of a comparative study of coagulation by electrolytes of graphene suspensions in water, 95 vol. % aqueous acetonitrile and 95 vol. % dimethyl sulfoxide (DMSO). Acetonitrile is a proto- and cationophobic solvent, while DMSO is a well-known proto- and cationophilic solvent. The Gutmann’s Donor Numbers, DN, are 14.1 and 29.8, respectively. Both of them are polar, with the values of the relative permittivity ϵ_r^{25} of 35.9 and 46.4, respectively; for water, $\epsilon_r^{25} = 78.4$. Hence, the electrolytes are strongly dissociated in all solvents under study.

The graphene samples were obtained by the gas detonation method at various precursor gas ratios and pressures. The graphene is turbostratic with structural defects; no activation of the graphene particles was performed.

Table 1. Characteristics of the graphene samples obtained by the gas detonation method.

Ratio O ₂ /C ₂ H ₂	Start pressure, B	Graphene pompon diameter, nm	Monolayer graphene (wt. %)	Bilayer graphene (wt. %)	3–7 layer graphene (wt. %)
0.35	1.1/1.2	40–80	10	80	10
0.4	1	60–120	5	60	35
0.5	1	100–150	5	50	45

For preparation of the colloidal solutions, the solid samples were dispersed in *N*-methyl-pyrrolidine-2-one under sonication for 2 h at 42 kHz, 70 W. Then the solution was diluted 100-fold with a corresponding solvent. The concentration of the graphene suspensions were about 5×10^{-4} g L⁻¹. For the characterization of the colloidal particles and determining the critical coagulation concentration (CCC) values, the dynamic light scattering method was used with a Zetasizer Nano ZS Malvern Instrument apparatus (UK) at 25°C, at a scattering angle of 173°. For size determination, all measurements were made 10 times for a working solution; each determination was based on 12–16 runs. All ζ -potential values were averages of three determinations; each determination was a result of 12–20 runs. When determining the coagulation rate, the number of size

measurements was 10 times, with automatically performed 12–16 runs. Here, the size of particles is usually expressed as Z-average (Z_{aver}) values. Z_{aver} is the intensity-weighted mean hydrodynamic size of the ensemble collection of particles. The time period from mixing the solutions to the first measurement was no more than 3 min.

The initial hydrodynamic diameter of the equivalent sphere in the dispersions varied within the range of 133 to 349 nm, depending on the solvent and sample. The values of the electrokinetic potential are always negative, from -27.5 to -54.4 mV, and the $|\zeta|$ increases in the sequence: 95 % acetonitrile < water < 95 % DMSO.

The determination of the CCC values was performed for NaCl and in some cases for HCl and $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ by monitoring the dependence of rate of particle size increase on the concentration of the electrolyte. The results are exemplified in Figure 1.

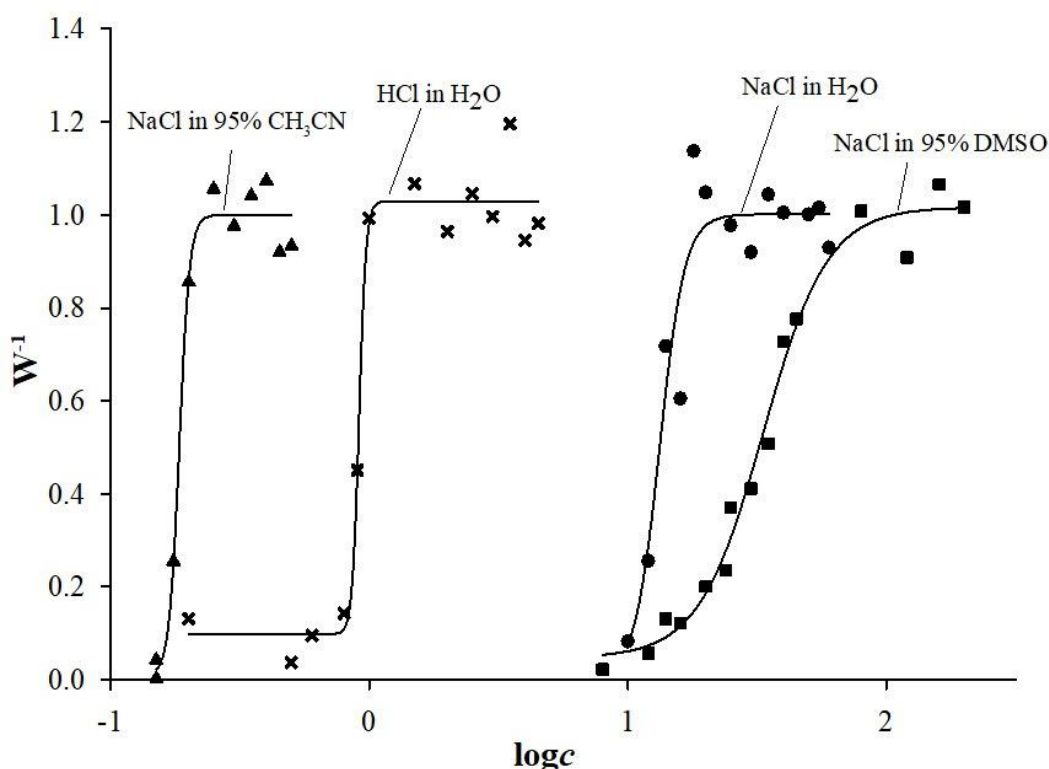


Figure 1. The reciprocal Fuchs function vs. the logarithm of electrolyte concentration (mM).

The pronounced coagulation influence of HCl gives evidence for the acid-base character of the origin of the surface charge. The CCCs for $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ are substantially lower than for NaCl in the same solvent, which is in accordance with the negative charge of the colloidal particles and the Schulze–Hardy rule.

The most important conclusion is that the CCC(NaCl) in 95 % acetonitrile is 79–156 times lower than in water, whereas the CCC(NaCl) in DMSO is even somewhat higher. This is in line with the difference of the DN values. The cationophobic acetonitrile poorly solvates the graphene species which are Lewis acids, while in the case of DMSO and water, an additional stabilizing contribution to the energy of interparticle interactions can be assumed.

This study was supported by the National Research Foundation of Ukraine via grant number 2025.07/0163.

THERMAL ANALYSIS OF PVB-BASED FILMS FORMED BY SOLUTION CASTING TECHNIQUE

Sokoliuk D. R.¹, Maruzhenko O. V.¹, Misiura A. I.^{1,2}, Mamunya Ye. P.^{1,3}

¹ E.O. Paton Electric Welding Institute NAS of Ukraine

² Taras Shevchenko National University of Kyiv

³ Institute of Macromolecular Chemistry NAS of Ukraine

denissokolyuk@gmail.com

Polymer materials can be used as coatings to protect surfaces from external factors. Common application methods include spin coating and solution casting. The benefit of solution casting is the simplicity of the technique, which can be easily applied to substrates of various size.

For current research, samples were produced by solution casting. The PVB polymer powdered was dissolved in ethanol for 2 hours in a magnetic stirrer, after which the solution was poured onto an aluminum substrate. The composite material was formed in the same way, but with the addition 13 vol.% of graphite. The image of the resulting sample, with an area of approx. 200 × 300 mm², is shown in Fig. 1.

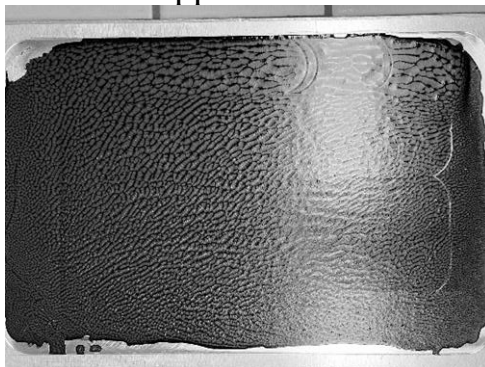


Fig. 1. Appearance of a PVB-based composite film with 13 vol.% of graphite

The thermophysical properties of the samples and the neat polymer powder were investigated using differential scanning calorimetry (DSC) and thermogravimetric analysis (TGA). The TGA analysis (Discovery TGA 55, TA Instruments) was performed in the range from room temperature up to 600 °C at a heating rate of 20 °C/min. Based on these results, the test conditions for DSC (Discovery DSC 25, TA Instruments) were selected a range -50...220 °C at a rate of 20 °C/min. The studies showed that the solvent did not evaporate completely spontaneously and remained in the sample even after a month of conditioning. No effect of sample preparation on the glass transition temperature (60–62 °C) was observed. However, thermogravimetric analysis revealed greater thermal stability of the composite film.

The results obtained indicate that proposed materials combination can be used on aluminum substrate surfaces as a coating material with potential for dual-use purposes.

ВПЛИВ ЕЛЕКТРОЛІТІВ РІЗНОЇ ПРИРОДИ НА КОЛОЇДНІ ВЛАСТИВОСТІ АРГЕНТУМ ЕРИТРОЗИНАТУ У ВОДНИХ РОЗЧИНАХ

Бабай А. В., Гога С. Т., Чейнеш Т. О.

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

artem.babai@student.karazin.ua

Відомо, що барвник еритрозин взаємодіє з катіонами Ag^+ з утворенням колоїдних частинок [1]. Наявність органічного компонента виділяє такі колоїди серед інших ліофобних систем, які представлені переважно неорганічними солями або металами. Вже запропоновано використання еритрозину як детектора для ідентифікації іонів срібла в розчинах [1]. Тому перспективним є виявлення впливу електролітів на колоїдні частинки аргентум еритрозинату.

Для дослідження колоїдних властивостей використовували метод динамічного розсіювання світла (прилад для фотонної кореляційної спектроскопії Malvern Zetasizer Nano Series ZS) і молекулярно-абсорбційної спектроскопії (спектрофотометр Hitachi U-2000). Колоїдні системи готували у колбі на 25 мл з вихідних розчинів AgNO_3 та еритрозину з концентраціями $5 \cdot 10^{-3}$ та $2,5 \cdot 10^{-3}$ моль/л відповідно. Додавали спочатку аліквоту розчину AgNO_3 , бідистильовану воду до половини, аліквоту розчину еритрозину та доводили до мітки тією ж водою. Вихідні розчини солей готували з сухої наважки та бідистильованої води. Перед кожним вимірюванням у хімічній склянці готувався досліджуваний розчин з певними об'ємами розчину аргентум еритрозинату, солі та бідистильованої води.

У результаті вимірювань отримали експериментальні дані про розмір частинок та електрокінетичний потенціал колоїдних частинок аргентум еритрозинату при розведенні, а також дані про залежність розміру цих частинок від часу при додаванні певної кількості електроліту. З цієї залежності для кожної концентрації електроліту оцінювали величину оберненої швидкості коагуляції, пропорційну функції Фукса. На перетині двох лінійних ділянок залежності логарифма цієї величини від логарифма концентрації електроліту знаходили критичну концентрацію агрегації (ККА), яка відповідає найменшій концентрації електроліту, при якій починається швидка коагуляція.

Виходячи зі спектрофотометричних досліджень (рис. 1), було показано, що відношення стехіометричних коефіцієнтів у реакції Ag^+ з еритрозином дорівнює 2:1, а умови синтезу з концентраціями $5 \cdot 10^{-4}$ AgNO_3 та $2,5 \cdot 10^{-4}$ моль/л еритрозину у розчині були обрані як оптимальні.

Досліджувані системи демонстрували бімодальний розподіл (рис. 2), характер якого не сильно залежить від розведення (до 1:10). Аналогічну поведінку виявив і дзета-потенціал, що дорівнював приблизно -40 мВ.

Були визначені ККА електролітів різного зарядного типу (рис. 3). Встановлено, що збільшення заряду катіона відповідно призводить до посилення коагулюючої дії електроліту. Так, при переході від Na^+ до Ba^{2+} ККА зменшилася приблизно в 46 разів.

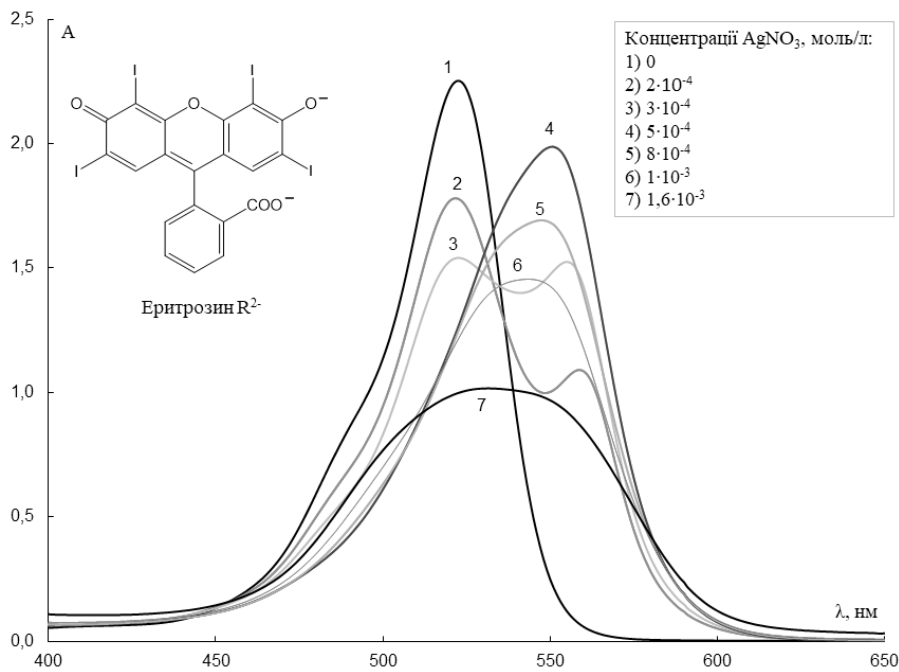


Рис. 1. Спектри поглинання еритрозину ($c=2,5 \cdot 10^{-4}$ моль/л) при різних концентраціях AgNO_3

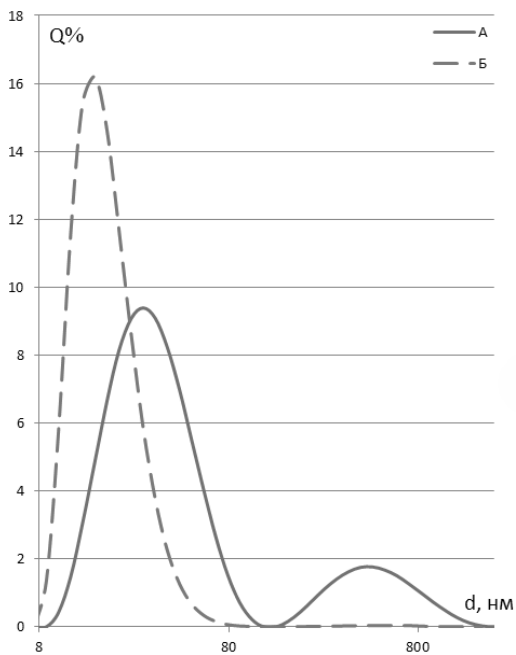


Рис. 2. Розподіл за розмірами аргентум еритрозинату за інтенсивністю розсіяного світла (А) та за об'ємом (Б)

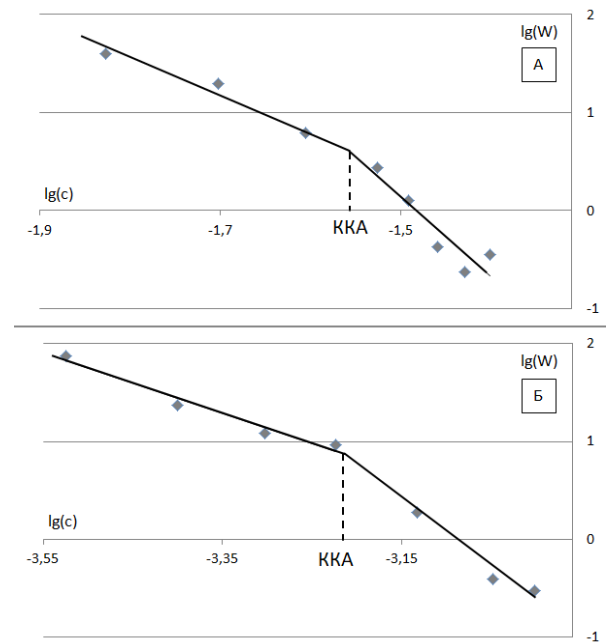


Рис. 3. Залежність логарифма оберненої швидкості коагуляції від логарифма концентрації електролітів NaNO_3 (А), $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ (Б)

Це дослідження було виконано при фінансовій підтримці гранту 0126U001145 МОН України.

[1] Wang J, Liu S and Shen W (2022) Absorption and Resonance Rayleigh Scattering Spectra of $\text{Ag}(\text{I})$ and Erythrosin System and Their Analytical Application in Food Safety. *Front. Nutr.* 9:900215. doi: 10.3389/fnut.2022.900215

ВЗАЄМОДІЯ НЕЙТРАЛЬНОГО ЧЕРВОНОГО З МІЦЕЛАМИ КАТІОННИХ ПАР ТА ЇЇ ВПЛИВ НА pK_a : ОЦІНЮВАННЯ КОНСТАНТ ЗВ'ЯЗУВАННЯ

Довбня А. А., Водолазька Н. О.

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

anastasiia.dovbnia@student.karazin.ua

Міцелярні системи широко використовуються для впливу на кислотно-основні рівноваги індикаторів і їх значення pK_a , на спектральні характеристики та різного ступеня зв'язування спряжених форм. Нейтральний червоний (НЧ) – катіонний індикаторний барвник ($HR^+ \rightleftharpoons R$, K_a), 3-аміно-7-диметиламіно-2-метилфеназин хлористий, є чутливим зондом таких систем завдяки наявності двох форм, що по-різному взаємодіють з мікросередовищем. НЧ використовується у багатьох областях хімії та біології, зокрема для дослідження властивостей наночастинок у розчинах, у тому числі вірусів [1].

На рис. 1 наведено структурну формулу та схему дисоціації НЧ.

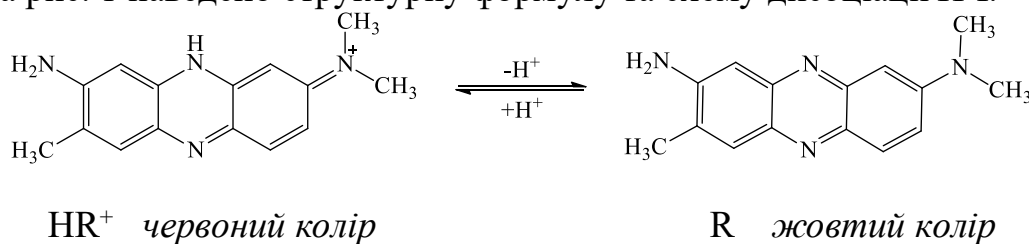


Рис. 1. Схема дисоціації нейтрального червоного

На даний час у літературі описано спектральні та кислотно-основні властивості НЧ у воді й різних мікрогетерогенних середовищах (міцели неіонних, аніонних і цвітеріонних ПАР, ліпосоми, біополімерні системи). Однак відсутні дані щодо його взаємодії з міцелами катіонних ПАР і констант зв'язування протонованої та депротонованої форм, використовуючи які можна оцінити pK_a в умовах повного зв'язування.

Тому метою даного дослідження було вивчення взаємодії НЧ з міцелами катіонних ПАР та її впливу на спектральні й кислотно-основні властивості індикатора, а також оцінювання констант зв'язування та показника «уявної» константи, pK_a^a , в умовах повного зв'язування спряжених форм НЧ наночастинами. Як катіонні ПАР обрано цетилтриметиламоній бромід (ЦТАБ), $KKM = 8 \cdot 10^{-4}$ М та димерну біс-четвертинну амонієву ПАР (Br^- , $C_{16}H_{33}(CH_3)_2N^+-(CH_2)_4-N^+(CH_3)_2C_{16}H_{33}Br^-$, 16-4-16), $KKM = 1 \cdot 10^{-4}$ М.

Кислотно-основні рівноваги НЧ в міцелярних розчинах було досліджено спектрофотометричним методом із потенціометричним контролем рН водної фази. Концентрація індикаторного барвника була порядку $2 \cdot 10^{-5}$ М; іонна сила (I) розчинів підтримувалась постійною 0.03 М (компоненти буферних розчинів + NaCl), $t = 25^\circ C$. Значення показника «уявної» ('apparent') константи дисоціації індикатора у міцелярних розчинах розраховували за рівнянням [1,2]:

$$pK_a^a = pN_w + \lg \frac{A_R - A}{A - A_{HR^+}} \quad (1)$$

де A – поглинання НЧ при відповідному значенні рН; A_R та A_{HR^+} – значення A при повному перетворенні індикаторного барвника в крайні форми R і HR^+ відповідно. Для розрахунків значень pK_a^a використовували довжини хвиль у максимумах спектрів поглинання кислій форми НЧ при λ_{max} та $\lambda_{max} \pm 5$ нм.

Для експериментального визначення розподілу речовини між водною і міцелярною фазами використовують константи зв'язування, $K_{b,i}$ (у л/моль) [2]:

$$K_{b,i} = \frac{[i_m]_t}{[i_w]_t} \cdot \frac{1}{C_{ПАР} - KKM}, \quad (2)$$

де $[i_m]_t$ і $[i_w]_t$ – рівноважні концентрації i -ої частинки (іона або молекули), зв'язаної міцелями та що перебуває у водній фазі відповідно, у моль/л усього розчину; KKM – критична концентрація міцелоутворення; $(C_{ПАР} - KKM)$ – концентрація міцелізованої ПАР, М.

Константи K_a^a і $K_{b,i}$ пов'язані між собою співвідношенням [2]:

$$\frac{1 - (10^{pK_a^{w*} - pK_a^a})}{C_{ПАР} - KKM} = -K_{b,R} + (10^{pK_a^{w*} - pK_a^a}) \cdot K_{b,HR^+}, \quad (3)$$

де значення pK_a^{w*} визначається при даній іонній силі. Таким чином, залежність експериментально знайдених значень pK_a^a індикатора від концентрації ПАР використовують для оцінювання значень $K_{b,i}$. Значення pK_a^w (НЧ) = 6.50.

Значення pK_a^a в умовах повного зв'язування ('complete') обох форм індикатора, pK_a^{ac} , визначається за рівнянням [2]:

$$pK_a^{ac} = pK_a^a + \lg \frac{(K_{b,R})^{-1} + (C_{ПАР} - KKM)}{(K_{b,HR^+})^{-1} + (C_{ПАР} - KKM)}. \quad (4)$$

Значення $K_{b,i}$ та pK_a^{ac} НЧ у міцелярних розчинах катіонних ПАР, які розраховано на основі експериментальних значень pK_a^a НЧ при варіюванні $C_{ПАР}$, наведено у таблиці 1.

Табл. 1. Значення $K_{b,i}$ та pK_a^{ac} НЧ у міцелях катіонних ПАР, $I=0.03$ М, 25°C

ПАР	$C_{ПАР}$, М	K_{b,HR^+}	$K_{b,R}$	pK_a^{ac}	$\Delta pK_a^{ac} = pK_a^{ac} - pK_a^w$
ЦТАБ	$3 \cdot 10^{-3} - 1.2 \cdot 10^{-2}$	25 ± 11	$5.8 \cdot 10^3 \pm 200$	4.13 ± 0.04	-2.37
16-4-16	$3 \cdot 10^{-3} - 6 \cdot 10^{-3}$	9 ± 1	$1 \cdot 10^4 \pm 50$	3.45 ± 0.01	-3.05

У доповіді аналізуються одержані значення констант зв'язування спряжених форм нейтрального червоного у міцелях катіонних ПАР різної природи та значення pK_a^{ac} , які порівнюються між двома дослідженими системами та з літературними даними.

[1] N. A. Vodolazkaya et al. // J. Phys. Chem. B. Vol. 126 (41). 2022. P. 8166.

[2] Mchedlov-Petrosyan N.O. et al. // J. of Molecular Liquids. Vol. 87. 2000. P. 75.

ПОЛІМЕРИЗАЦІЯ АНІЛІНУ В ПРИСУТНОСТІ НЕМОДИФІКОВАНОГО ТА МОДИФІКОВАНОГО ГРАФІТУ

Ловчицька В. С., Ковалишин Я. С.

Львівський національний університет імені Івана Франка

viktoriia.lovchytska@lnu.edu.ua

Дослідження поліанілін-графітових композитів є перспективним для розвитку електрохімічних матеріалів для енергетики, сенсорів, суперконденсаторів, батарей та антикорозійних покриттів. Модифікація поверхні дозволяє регулювати електрохімічну активність, що безпосередньо впливає на процес полімеризації аніліну та однорідність утворення плівок. Такий матеріал демонструє стабільність та покращені електрохімічні характеристики, що є важливим для новітніх технологій

Для проведення досліджень було використано як немодифікований, так і модифікований терморозширений графіт АВГ-81. Модифікацію графіту здійснювали відновленням фенілдіазоній тетрафторборату гіпофосфітом натрію у водно-ацетонітрильному розчині. Для досліджень готували 1 н розчин аніліну у 3 н НСІ. До розчину додавали графіт в кількості 1% від сумарної маси аніліну та графіту, піддавали ультразвуковій обробці протягом 2 хвилин. Дослідження проводили методом циклічної вольтамперометрії, використовували триелектродну електрохімічну комірку. Робочим електродом слугував платиновий електрод, допоміжним – платиновий електрод, а електродом порівняння – насичений хлорсрібний.

На ЦВА-кривих спостерігається два піки окиснення. Перший (приблизно при 0.4 В) відповідає процесу окиснення лейкоемеральдинової форми поліаніліну до емеральдинової форми. Другий пік (близько 1.0 В) зумовлений процесами окиснення аніліну та емеральдинової форми з утворенням перніграніліну.

Отримано залежності струмів та потенціалів першого піку окиснення від номера циклу сканування потенціалу. Отримані результати показують, що потенціали піку за наявності модифікованого графіту є нижчими порівняно з немодифікованим графітом на 0,01 – 0,03 В у перших циклах та на 0,03 – 0,05 В для останніх циклів. При цьому струми у випадку модифікованого графіту суттєво менші (на 10 – 25 %). Винятком є випадок, коли швидкість розгортки потенціалу становила 100 мВ/с, тоді струми для модифікованого графіту є вищими на 2 – 20 % залежно від циклу.

Варто зазначити, що для немодифікованого графіту зі збільшенням швидкості розгортки потенціалу спостерігається зменшення струмів, тоді як для модифікованого спостерігається зменшення струмів при швидкостях 10 – 70 мВ/с, а при 100 мВ/с – найвищі значення.

Отримано залежності струмів та потенціалів другого піку окиснення від номера циклу сканування потенціалу. Отримані результати свідчать, що зі

збільшенням швидкості розгортки потенціали піку зростають, і за наявності модифікованого графіту вони є вищими порівняно з немодифікованим на 0,02 – 0,05 В. При цьому струми у випадку модифікованого графіту є суттєво меншими (на 15 – 25 %). Винятком є швидкість розгортки потенціалу 100 мВ/с, у цьому випадку для модифікованого графіту струми вищі на 8 – 15 % залежно від циклу.

Слід також зазначити, що для немодифікованого графіту спостерігається неоднозначна залежність сили струму від швидкості розгортки потенціалу. Тоді як для модифікованого графіту простежується зменшення струмів у діапазоні швидкостей 10 – 30 мВ/с, а при подальшому збільшенню швидкості розгортки спостерігається зростання струмів.

Отримані результати свідчать, що у випадку немодифікованого графіту кількість синтезованого поліаніліну є вищою, що підтверджується вищими значеннями струмів піків. Однак відсутність чіткої залежності струмів піків від швидкості розгортки потенціалу свідчить про неоднорідність структури матеріалу та різну кількість інкорпорованого графіту. Тобто внаслідок гідрофобних властивостей графіту відбувається агрегування його в розчині і під час росту полімерної плівки випадковим чином відбувається захоплення утворених агрегатів.

У випадку модифікованого графіту модифікація фенільними групами призводить до формування на поверхні ділянок з великим електричним опором. Це утруднюватиме процес окиснювальної конденсації аніліну, що підтверджується вищими значеннями потенціалів другого піку. Як наслідок кількість осадженого поліаніліну буде меншою, що підтверджується меншими значеннями струмів піків. Додатковим підтвердженням є менші значення потенціалів першого піку, що зумовлено меншим омичним опором тоншого шару осаду. Однак слід зазначити, що за високих швидкостей потенціалу струми стають вищими, ніж у випадку немодифікованого графіту. Це можна пояснити великим вкладом струмів заряджання подвійного електричного шару, тобто у випадку модифікованого графіту матеріал має більшу питому площу поверхні і характеризується одноріднішим розподілом компонентів.

Потенціали першого піку в обох випадках збільшуються внаслідок зростання омичного спаду потенціалу при збільшенні товщини осаду на поверхні електроду при повторних скануваннях потенціалу. Потенціали другого піку зменшуються внаслідок полегшення процесу окиснення аніліну завдяки електрокаталітичним властивостям поліаніліну, осадженого в попередніх циклах.

Подані у цій роботі результати досліджень отримано за фінансової підтримки Міністерства освіти і науки України (держбюджетна тема: ХФ-30Ф “Синтез, структура та фізико-хімія електропровідних матеріалів та композитів”, Державний реєстраційний номер: 0126U002042).

АНАЛІЗ ВОЛЮМОМЕТРИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ВОДНО-ОРГАНІЧНИХ РОЗЧИННИКІВ

Минка А. О., Єфімов П. В.

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
pavel.v.efimov@karazin.ua

Змішані розчинники відіграють значну роль у всіх галузях хімії. Особливе місце займають водно-органічні системи. Волюмометричні властивості, такі як густина, мольний об'єм, надлишковий мольний об'єм, є найважливішими термодинамічними характеристиками розчинів. У науковій літературі накопичено велику кількість даних щодо волюмометричних властивостей водно-органічних систем і вони продовжують активно вивчатися. Актуальним завданням є аналіз впливу складу та природи компонентів на фізико-хімічні властивості сумішей, що визначаються специфікою міжчасткових взаємодій. Розроблено велику кількість багатопараметричних рівнянь, здатних описувати експериментальні дані. Проте, переважну більшість водно-органічних систем досліджено з типовим кроком шкали складу $\sim 0,1$ одиниці мольної частки, що становить лише дюжину точок для кожної системи. Що не дозволяє коректно використовувати рівняння з великою кількістю параметрів. Для таких систем було розроблено модель бінарних адитивних квазі-сольватів – БАКС (<https://doi.org/10.26565/2220-637X-2023-41-03>). Модель включає всього два підгоночні параметри – ефективні граничні парціальні молярні об'єми компонентів у співрозчиннику. Граничні парціальні молярні об'єми становлять особливий інтерес. Для точного визначення граничних парціальних молярних об'ємів необхідний великий обсяг даних в області розбавлених розчинів. Найчастіше при цьому проводяться спеціальні експерименти, проте даних із них значно менше, ніж звичайних, що охоплюють весь діапазон складів.

В рамках моделі БАКС пропонується метод аналізу волюмометричних даних подвійних рідких сумішей за наявності апріорної інформації про граничні парціальні молярні об'єми. Порівняння величин літературних даних про граничні парціальні молярні об'єми з розрахованими ефективними значеннями показує, що вони досить близькі між собою. З одного боку, це свідчить про адекватність моделі БАКС. З іншого боку, відмінності перевищують похибки експерименту. В рамках моделі це може бути пояснено зсувом рівноваги між квазі-сольватами.

Цей підхід протестовано на 12 водно-органічних системах. Отримано кількісні характеристики параметрів моделі БАКС. Зокрема залежності від складу тенденції утворювати надлишкові змішані квазі-сольвати та зміщення ролей у функціональній рівновазі розчинник-розчинена речовина. А також низка диференціальних та інтегральних характеристик. Досліджено кореляції розрахованих параметрів з відомими фізико-хімічними та емпіричними властивостями органічного косольвенту. Виявлено низку закономірностей. З урахуванням універсальності моделі БАКС цей похід може бути використаний і для інших властивостей змішаних розчинників.

ОСОБЛИВОСТІ ПЕРЕБІГУ ДЕЯКИХ РЕАКЦІЙ В РОЗЧИНАХ, ЩО ВИКОРИСТОВУЮТЬСЯ В ДЕМОНСТРАЦІЙНОМУ КІНЕТИЧНОМУ ЕКСПЕРИМЕНТІ

Плотнікова І. В., Єльцов С. В.

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

eltsov@karazin.ua

Робота присвячена дослідженню питання проведення демонстраційного хімічного експерименту. Проведено аналіз широкого кола літературних джерел, які стосуються проведення демонстраційного кінетичного експерименту у розчинах. Виділено основні кінетичні закономірності, які можуть бути продемонстровані, навіть, у візуальному експерименті [1, 2]:

- 1) вивчення впливу концентрації реагентів на швидкість реакцій, визначення порядку реакції та констант швидкості;
- 2) дослідження впливу температури на швидкість реакцій та констант швидкості;
- 3) вплив розчинника та властивостей середовища на константи швидкості реакцій;
- 4) вплив іонної сили розчину на константи швидкості реакцій;
- 5) вплив міцелярного середовища на константи швидкості реакцій;
- 6) вплив каталізатора на швидкість та константи швидкості реакцій.

Серед багатьох реакцій, що використовуються як модельні, виділено реакцію відновлення барвника метиленового синього аскорбіновою кислотою в кислому середовищі [3-5].

Детально розглянуто кінетичні особливості перебігу реакції між метиленовим синім та аскорбіновою кислотою в розчинах за різних умов її проведення. Із використанням літературних даних про величини ефективної константи швидкості реакції метиленового синього з аскорбіновою кислотою кількісно обраховано вплив різних факторів (вихідних концентрацій реагентів, температури, величини рН середовища, іонної сили та природи доданого електроліту, розчинника, поверхнево-активних речовин) на час знебарвлення розчину, в якому перебігає хімічне перетворення.

Показано, що певні обрані умови проведення реакції забезпечують час перебігу реакції від декількох до десятків хвилин, що робить його зручним для використання як демонстраційного та/або навчального експерименту.

[1] Marzabal, A.; Delgado, V.; Moreira, P.; Barrientos, L.; Moreno, J. Pedagogical Content Knowledge of Chemical Kinetics: Experiment Selection Criteria To Address Students' Intuitive Conceptions. *J. Chem. Educ.* 2018, 95 (8), 1245–1249.

[2] Laguta, A. N.; Eltsov, S. V.; Mchedlov-Petrossyan, N. O. Nitrophenol Violet as a New Tool for Studying of Kinetics of Reactions in Solutions. *J. Chem. Educ.* 2021, 98 (9), 2964–2972.

- [3] Mowry, S.; Ogren, P. J. Kinetics of Methylene Blue Reduction by Ascorbic Acid. *J. Chem. Educ.* 1999, 76 (7), 970–973.
- [4] Snehalatha, T.; Rajanna, K. C.; Saiprakash, P. K. Methylene Blue–Ascorbic Acid An Undergraduate Experiment in Kinetics. *J. Chem. Educ.* 1997, 74 (2), 228–233.
- [5] El-Aila, H. J. Reduction of Methylene Blue by Ascorbic Acid: Kinetic and Thermodynamic Aspects. *Tenside Surfactants Detergents.* 2012, 49 (1), 26–31.

АВТОРСЬКИЙ ПОКАЖЧИК

Anokhin D. O.	92	Горин М. М.	28, 36, 54
Borysov O. V.	56	Горобець М. Ю.	88
Chudak D. M.	12	Готинчан А. Г.	60
Dikarieva K. S.	94	Григоренко О. О.	60, 64, 84
Haidar V. I.	102	Грищук О. В.	60
Ivanov V. V.	92, 96	Гуріна Г. І.	17
Kalugin O. N.	94	Гуцул Х. Р.	47
Koverga V.	94	Давтян А. С.	62
Курпа М. О.	96	Дармонук О. Т.	26
Kurychenko A. V.	98, 100	Демчук О. П.	60
Mamunya Ye. P.	104	Добридень О. В.	75
Maruzhenko O. V.	104	Довбня А. А.	107
Mchedlov-Petrosyan N. O.	102	Донченко А. О.	30
Misiura A. I.	104	Єльцов С. В.	112
Morozova V. O.	98	Єфімов П. В.	111
Mykhailiuk P. K.	56	Збруєв О. І.	68
Panteleimonov A. V.	92	Знов'як К. О.	45
Polishchuk Yu. V.	102	Іванов В.	38
Prud M. V.	100	Іванова А. О.	22
Sham V. A.	56	Кемський С. В.	73
Skliarova K. D.	102	Кириченко О. В.	86
Sokoliuk D. R.	104	Кирій С. О.	47
Stovba Y. A.	12	Клименко Д. С.	64
Zinin V. V.	102	Ковалишин Я. С.	109
Амірханов В. М.	45	Козачук М. О.	23
Андрюшкевич Є. А.	13	Колос Н. М.	70
Бабай А. В.	105	Колосова О. С.	58
Бакланов О. М.	51	Кордан В. М.	26
Беляєв А. М.	15, 43	Коркуна О. Я.	42
Білик Г. В.	17	Корнієнко І. С.	66
Блашко Н. М.	19	Коробка А. Ю.	68
Большаніна С. Б.	24	Коробка О. П.	70
Будішевська О. Г.	82	Костик О. А.	82
Васильків О. М.	21	Кочура Є. К.	24
Васюк С. О.	30	Кравчук О. Ф.	70
Ващенко. А. П.	58	Красіцька А. М.	26
Власенко Г. С.	58	Криворучко А. Р.	72
Вовк М. В.	73	Кривошей О. І.	58
Водолазька Н. О.	107	Кусяк А.	34
Воловенко Ю. М.	75	Кут Д. Ж.	72
Гись В. Ю.	75	Кут М. М.	72
Гладков Є. С.	86	Кучер О. В.	79
Гога С. Т.	105	Левченко О. О.	62
Горбаточкін Ю. О.	70	Лесько Ю. Ю.	28
Горбик П.	34	Ледней Р. Р.	30

Лиска А. С.	17	Федяй В. Д.	47
Ловчицька В. С.	109	Федякіна Н. А.	89
Логойда Л. С.	28, 36, 49, 54	Ханін В. А.	37
Ляшук О. С.	60, 64, 84	Христенко І.	38
Максименко Д. Д.	31	Чебанов В. А.	68, 79
Максимів Т. В.	33	Чейпеш Т. О.	105
Марчук О. В.	19	Чемна Х. І.	49
Мельников К. П.	84	Чепелева Л. В.	86
Мечик П. О.	34	Черних А. В.	64
Микитин І. М.	23	Чернишова О. С.,	58
Минка А. О.	111	Шафорост Ю. А.	15, 43
Михальська А. А.	36	Шевченко І. Р.	51
Мілохов Д. С.	75	Шпирка З. М.	26
Москвіна В. С.	79	Штефан С. О.	53
Нечесний Я. І.	73	Щеглов О.	34
Оліфір О. С.	64	Юрченко О. І.	31, 37, 51, 53
Осипов А. В.	37, 53	Яворська Х. Д.	54
Павлюк В. В.	26	Якубовський В. П.	84
Пацай І. О.	21, 33		
Петрановська А.	34		
Плотнікова І. В.	112		
Полтавець В. В.	13, 89		
Помалін М. С.	75		
Попенко Р.	38		
Потапчук М. О.	66, 77		
Прокіпчук І. В.	23		
Рашевський А. С.	79		
Ридчук П. В.	21, 22, 33		
Романюк Ю. Р.	82		
Рудюк В. В.	49		
Саєнко Л. Д.	40		
Свердліковська О. С.	66, 77		
Семьошкіна О. Д.	84		
Середюк М. Л.	45		
Слободенюк К. С.	42		
Слободяник М. С.	40		
Сніжко А. Д.	86		
Тарадайка В. А.	43		
Татарець А. Л.	58		
Теребіленко К. В.	40		
Терещенко А. Ю.	88		
Терпелюк І. С.	45		
Тимошук О. С.	21, 33		
Тімохін О. С.	79		
Трачова В. В.	60		

ЗМІСТ

Програма конференції.....	4
Неорганічна та Аналітична хімія	11
Органічна хімія.....	55
Фізична хімія.....	91
Авторський покажчик.....	114

НАУКОВЕ ВИДАННЯ

XVIII Всеукраїнська наукова
конференція студентів та аспірантів
"Хімічні Каразінські читання - 2026"
(ХКЧ'26)
(28 квітня 2026 року, м. Харків)

Тези доповідей
Українською, англійською мовами

Відповідальні за випуск *Н. О. Леонова*

Комп'ютерне верстання *Я. В. Колесник*

Підписано до друку ХХ.04.26
Папір офсетний
Друк. арк –
Зам. №131/20

Обл.-вид. арк. –

Формат 60x84/16
Друк різнограф
Наклад 20 прим.
Ціна договірна

Видавець і виготовлювач
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна,
61022, м. Харків, майд. Свободи, 4.
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 3367 від 13.01.2009

Видавництво ХНУ імені В.Н. Каразіна
Тел. : 707-24-32